

FERNUNIVERSITÄT IN HAGEN
Fakultät für Mathematik und Informatik
Lehrgebiet Analysis

BACHELORARBEIT

Das effektive Potential von M -Matrizen

Liza Schonlau

Überarbeitete Version

Betreuer:

Prof. Dr. Delio Mugnolo

Dr. Matthias Täufer

4. Oktober 2022

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Notation	5
3	Grundlagen	6
3.1	Gemischte Resultate	6
3.2	Z -Matrizen	8
3.3	Die Riemannsche Abstandsfunktion	12
3.4	Spektraltheorie selbstadjungierter Operatoren	13
3.4.1	Zerlegung der Spektralmaße	22
4	Einführung in die Quantenmechanik	24
4.1	Der Hamiltonoperator	24
4.1.1	Positivität des kleinsten Eigenwerts	27
4.1.2	Existenz und Eindeutigkeit von schwachen Lösungen	29
4.2	Zeitentwicklung	31
5	Das effektive Potential des Hamiltonoperators	34
5.1	Agmons Methode	34
5.2	Nachweis von Lokalisierung mit Hilfe der Landschaftsfunktion	39
5.3	Vom Hamiltonoperator zu M -Matrizen	42
6	Das effektive Potential von M-Matrizen	43
6.1	Definitionen	43
6.2	Lokalisierung der Eigenvektoren symmetrischer M -Matrizen	44
6.3	Diagonalisierung	49
6.4	Ausblick	54
	Literatur	58

1. Einleitung

Diese Arbeit widmet sich der Frage, inwiefern die Lokalisierung von Eigenfunktionen des Hamiltonoperators - insbesondere auf endlichen Graphen - durch Kenntnis des Potentials V und später der Landschaftsfunktion u vorhersehbar ist. Eine Funktion nennen wir lokalisiert, wenn sie auf ein kleines Gebiet konzentriert vorliegt und auf dem Rest gegen Null geht.

Der Hamiltonoperator hat die Gestalt

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V,$$

mit Δ dem Laplace Operator und V einem Potential. Es bezeichnet $m > 0$ eine Masse und \hbar das Plancksche Wirkungsquantum. Die normierten Eigenfunktionen des Hamiltonoperators sind die (bzgl. der Zeit) *stationären* Zustände, die ein subatomares Partikel, das sich im Potential V aufhält, annehmen kann. Die zugehörigen Eigenwerte entsprechen ihren Energien. Da wir Quantensysteme beschreiben, sind Zustandsfunktionen nicht deterministisch, sondern probabilistisch zu werten: Ein Partikel im Zustand ψ befindet sich mit einer Wahrscheinlichkeit von $\int_{\Omega} |\psi|^2 dx$ auf dem Gebiet Ω . Ein genaueres Verständnis der Quantenmechanik werden wir in Kapitel 4 entwickeln, in diesem Rahmen führen wir auch den Hamiltonoperator und seine selbstadjungierten Erweiterungen ein (Abschnitt 4.1).

Wir möchten eine erste Intuition dafür entwickeln, inwiefern das Potential Einfluss auf

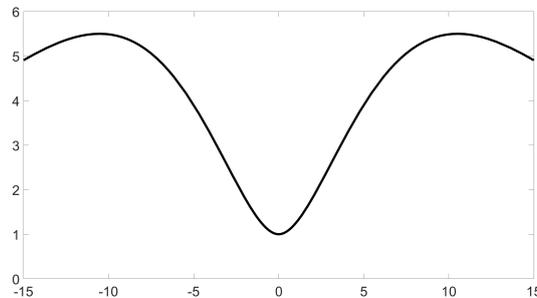


Abbildung 1.1: Potential V mit Tal

die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators nimmt¹. Dazu betrachten wir das Potential aus Abb. 1, das aus einem von zwei Hügeln eingeschlossenen Tal besteht. Nach den Gesetzen der klassischen Mechanik würden wir erwarten, dass ein Partikel mit Energie kleiner als $V_{\max} \approx 5.5$ außerhalb des Tals nicht existieren kann. So verhält es sich aber nicht im subatomaren Bereich; wir sehen in Abb. 2 drei Eigenfunktionen des Hamiltonoperators mit Eigenwerten $E < V_{\max}$, bei denen eine gewisse Masse auch außerhalb des Tals liegt. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich ein Partikel in Zustand (a), (b) oder (c) dort

¹Die folgenden Abbildungen wurden zu diesem Zweck mit MATLAB [MAT22] erzeugt. Die Eigenvektoren und Eigenwerte des eindimensionalen Hamiltonoperators wurden numerisch mit Hilfe der Methode `bvp4c()` berechnet und visualisiert.

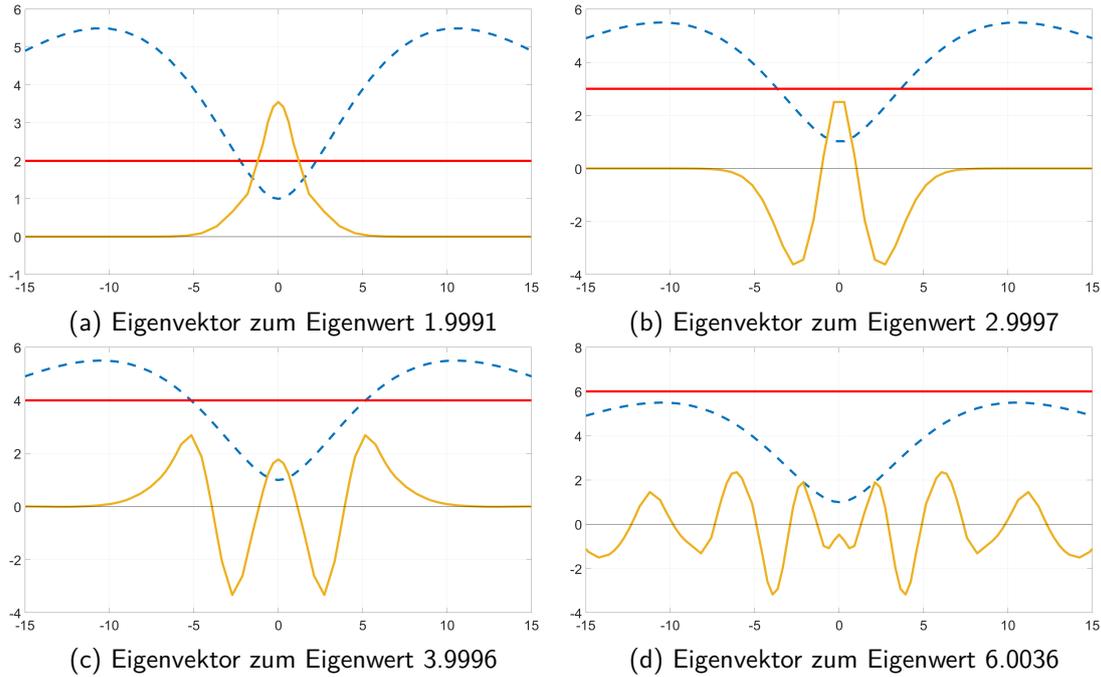


Abbildung 1.2: Ausschnitt der Eigenvektoren (gelb) des Hamiltonoperators $H = -\frac{d}{dx} + V$ zu vier verschiedenen Eigenwerten (rot) auf dem Gebiet $(-30, 30)$ mit Dirichlet-Randbedingung. Das Potential in blau.

aufhalt, ist also nicht Null. Trotzdem lasst sich eindeutig eine Konzentration auf das Gebiet $\{x \in \mathbb{R} \mid V(x) \leq E\}$, den so genannten *Potentialtopf*, feststellen. Die Eigenfunktion mit Eigenwert $E \approx 6 > V_{\max}$ liegt dann, wie zu erwarten, homogen(er) verteilt vor. Dieses Verhalten der Eigenfunktionen - also ihr exponentieller Abfall auerhalb des Potentialtopfs - werden wir in Abschnitt 5.1 mit Agmons Methode [Agm82] beweisen.

Im Allgemeinen ist das Potential V kein guter Pradiktor fur Lokalisierung. Man stelle sich ein Potential in \mathbb{R}^2 vor, das jeweils zufallig einen Wert zwischen 0 und V_{\max} auf den Quadraten $(n, n + 1) \times (m, m + 1)$ fur $n, m \in \mathbb{Z}$ annehme, dann ware der Potentialtopf vollig durchlochert und wurde keine Aussage uber das Erscheinungsbild der Eigenfunktionen erlauben. Eine viel besser geeignete Funktion ist die *Landschaftsfunktion* u , die Losung von $Hu = 1$ ist und von M. Filoche und S. Mayboroda 2012 in [FM12] erstmalig vorgestellt wurde. Sie zeichnet eine (stetige) Landschaft, die aus klar trennbaren Hugeln und Talern besteht und in enger Beziehung zu den Eigenfunktionen von H steht. Sei ψ normierte Eigenfunktion von H mit Eigenwert E auf dem Gebiet Ω , dann gilt

$$|\psi(x)| \leq Eu(x) \quad x \in \Omega,$$

solange $Eu(x) < 1$. Im Allgemeinen nimmt u sehr kleine (positive) Werte an und beschrankt die Eigenfunktionen von oben, auer wenn $Eu(x) \geq 1$. D.h. ψ nimmt hohere Werte ausschlielich auf dem *effektiven Potentialtopf* $\{x \in \mathbb{R}^n \mid \frac{1}{u(x)} \leq E\}$ an und fallt auerhalb nach Vorgabe der Landschaftsfunktion ab. $1/u$ ersetzt hier V und wird das *effektive Potential* genannt. Den Eigenschaften der Landschaftsfunktion widmen wir uns in Abschnitt 5.2, dort werden wir sie dann mathematisch belegen. Die Vorlage ist hier [ADFJM19].

Schlielich ubertragen wir den Begriff des effektiven Potentials auf den diskreten Ha-

Hamiltonoperator auf endlichen Graphen (Kapitel 6). Grundlage hierfür ist ein weiterer Artikel [MFT21] von M. Filoche, S. Mayboroda und T. Tao, der das Thema dieser Bachelorarbeit inspiriert hat und gleichnamig „The effective potential of an M -matrix“ heißt. Zunächst sehen wir in Abschnitt 5.3, dass der diskrete Hamiltonoperator als Matrix geschrieben werden kann, die für positives Potential der Klasse der nichtsingulären M -Matrizen angehört. Das Besondere ist, dass sich die Abschätzungen auf Eigenvektoren beliebiger M -Matrizen übertragen lassen, und dass auch hier ein effektives Potential (besser gesagt eine Vielzahl effektiver Potentiale) existiert, das die Gebiete, auf denen die Eigenvektoren lokalisiert vorliegen, vorhersagt.

Unser letztes Vorhaben in Abschnitt 6.3 wird sein, die Diagonalisierbarkeit von M -Matrizen mit Hilfe der neu entwickelten Begriffe abzuschätzen. Sei A eine M -Matrix der Dimension N . Nehmen wir an, der effektive Potentialtopf K besteht aus mehreren disjunkten Töpfen K_l , die soweit auseinander liegen, dass die Einträge der Eigenvektoren zwischen den K_l einmal vollständig auf 0 abfallen. Legen wir dann disjunkte Umgebungen Ω_l um die K_l , sodass die Eigenvektoren auf den Rändern der Ω_l den Wert 0 annehmen, dann lassen sich die Teilmatrizen $A|_{\Omega_l}$ vollständig entkoppeln und A kann als Blockdiagonalmatrix geschrieben werden. Aber auch wenn die Eigenvektoren nicht vollends auf 0 abfallen, kann A durch $\bigoplus_l A|_{\Omega_l}$ approximiert werden. Die Güte dieser Approximation werden wir durch Vergleichen der Eigenvektoren bzw. Eigenwerte von A und $\bigoplus_l A|_{\Omega_l}$ abschätzen.

2. Notation

Es bezeichnet \mathcal{H} einen Hilbertraum und $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}}$ das zugehörige Skalarprodukt. Wenn eindeutig ist, welches Skalarprodukt gemeint ist, so wird dieses nicht extra kennzeichnet.

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ eine offene Menge und $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder $\mathbb{C} = \mathbb{R}$.

Wir bezeichnen mit $\mathbf{C}^k(\Omega)$ die Menge aller k -fach stetig differenzierbaren Funktionen $f: \Omega \rightarrow \mathbb{K}$ über Ω . Die Menge $C_0^k(\Omega)$ besteht aus allen Funktionen $f \in C^k(\Omega)$ mit kompaktem Träger, wobei $\text{Tr}(f) := \overline{\{x \in \Omega \mid f(x) \neq 0\}}$.

Es bezeichnet $\mathbf{L}^2(\Omega)$ den Lebesgueraum aller quadratisch integrierbaren Funktionen mit Skalarprodukt

$$\langle f, g \rangle = \int_{\Omega} f \bar{g} \, dx, \quad f, g \in L^2(\Omega).$$

Es ist $\mathbf{H}^m(\Omega) = \mathbf{W}^{m,2}(\Omega)$ der Sobolevraum der Ordnung m ; er enthält alle Funktionen f , deren schwache Ableitungen $D^\alpha f$ für jeden Multiindex $|\alpha| \leq m$ existieren und in $L^2(\Omega)$ liegen. Das zugehörige Skalarprodukt ist

$$\langle f, g \rangle = \int_{\Omega} \sum_{|\alpha| \leq m} (D^\alpha f) (\overline{D^\alpha g}) \, dx.$$

$\mathbf{H}_0^m(\Omega)$ enthält entsprechend alle Funktionen aus $H^m(\Omega)$ mit kompaktem Träger in Ω .

Mit $\mathbf{l}^2([\mathbf{N}]) = \mathbf{l}^2(\{\mathbf{1}, \dots, \mathbf{N}\})$ bezeichnen wir den Raum aller endlichen Folgen $(x_i)_{i \in \{1, \dots, N\}} \subset \mathbb{K}$ der Länge $N \in \mathbb{N}$. Hier ist

$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^N x_i \bar{y}_i, \quad x, y \in l^2(N).$$

Sei X ein normierter Raum, dann bezeichnet $\mathcal{L}(X)$ den Raum aller beschränkten Operatoren $T: X \rightarrow X$ mit Norm

$$\|T\|_{\mathcal{L}(X)} = \sup_{x \in X} \frac{\|Tx\|_X}{\|x\|_X}.$$

Des weiteren bezeichnet

$\mathbf{B}(\mathbf{x}_0, \mathbf{R})$ die Einheitskugel in \mathbb{R}^n mit Ursprung x_0 und Radius R .

$\Im(\mathbf{z})$ den Imaginärteil von $z \in \mathbb{C}$.

$\Re(\mathbf{z})$ den Realteil von $z \in \mathbb{C}$.

$\sigma(\mathbf{A})$ das Spektrum des Operators A .

$\rho(\mathbf{A})$ die Resolventenmenge des Operators A .

3. Grundlagen

Der erste Abschnitt besteht aus einer Sammlung nebensächlicher Resultate, die dem Lesenden vor allem als Referenz dienen sollen.

In Abschnitt 3.2 definieren wir dann zwei wichtige Objekte dieser Arbeit: Z - und M -Matrizen. Dort werden verschiedene Charakterisierungen nichtsingulärer M -Matrizen vorgestellt.

Nach einem kurzen Einschub zur Riemannschen Abstandsfunktion folgt noch eine Einführung in die Spektraltheorie selbstadjungierter Operatoren. Mit ihrer Hilfe werden wir begründen, warum wir ausschließlich Eigenvektoren auf Lokalisierung zu untersuchen brauchen.

Vorausgesetzt wird eine grundlegende Kenntnis der Funktionalanalysis, wie sie in [MKL22] vermittelt wird. Alle Resultate, die nicht mit einer extra Literaturangabe versehen sind, können dort nachgeschlagen werden.

3.1 Gemischte Resultate

Im Folgenden sind verschiedene (zusammenhangslose) Resultate aufgelistet, die im Verlauf dieser Arbeit zum Einsatz kommen. Beweise werden nur dann angegeben, wenn sich diese nicht in der zugehörigen Literatur finden.

Lemma 3.1.1 (Polarisationsidentität) [Tes09, S.67]. *Sei A ein Operator auf \mathcal{H} mit Definitionsbereich $\mathcal{D}(A)$. Dann lässt sich $\langle A\psi, \varphi \rangle$ mit Hilfe der quadratischen Form $q_A(\psi) = \langle A\psi, \psi \rangle$, $\psi \in \mathcal{D}(A)$, durch die Polarisationsidentität*

$$\langle A\psi, \varphi \rangle = \frac{1}{4} (q_A(\varphi + \psi) - q_A(\varphi - \psi) + iq_A(\varphi - i\psi) - iq_A(\varphi + i\psi)), \quad \varphi, \psi \in \mathcal{D}(A),$$

darstellen.

Lemma 3.1.2 (Cauchy-Schwarz Ungleichung für Sesquilinearformen) [Tes09, Problem 0.24]. *Sei V ein Vektorraum und $s(v, w)$ eine Sesquilinearform auf V mit der zugehörigen quadratischen Form $q(v) = s(v, v)$. Ist $q(v) \geq 0$ für alle $v \in V$, dann gilt*

$$|s(v, w)| \leq q(v)^{\frac{1}{2}} q(w)^{\frac{1}{2}}.$$

Beweis. Da die quadratische Form nichtnegativ ist, haben wir

$$0 \leq q(\alpha v + w) = |\alpha|^2 q(v) + 2\operatorname{Re}(\alpha s(v, w)) + q(w)$$

für $v, w \in V$ und $\alpha \in \mathbb{C}$. Die Ungleichung folgt für $\alpha = -\overline{s(v, w)}/q(v)$. \square

Sei X ein normierter Raum. Wir nennen eine Folge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset X$ *schwach konvergent* gegen x , in Zeichen $x_n \rightharpoonup x$, wenn

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle x', x_n \rangle = \langle x', x \rangle \quad \forall x' \in X'.$$

Lemma 3.1.3 (schwache Konvergenz) [Tes09, Lemma 1.12]. Sei \mathcal{H} ein Hilbertraum.

(i) $\psi_n \rightharpoonup \psi$ impliziert $\|\psi\| \leq \liminf \|\psi_n\|$.

(ii) Eine schwach konvergente Folge $\psi_n \rightharpoonup \psi$ konvergiert genau dann in Norm gegen ψ ($\psi_n \rightarrow \psi$), wenn $\limsup \|\psi_n\| \leq \|\psi\|$.

Wir gehen kurz auf zwei wichtige Klassen von linearen Operatoren über \mathcal{H} ein. Sei $T: \mathcal{H} \supset \mathcal{D}(T) \rightarrow \mathcal{H}$ ein (nicht notwendigerweise beschränkter) linearer Operator. Wir nennen ihn *symmetrisch*, wenn

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

für alle $\psi, \varphi \in \mathcal{D}(T)$. Symmetrische Operatoren können nicht nur beschränkt oder unbeschränkt, sondern auch *halbbeschränkt* bzw. *von unten beschränkt* sein.

Definition 3.1.4 (von unten beschränkter Operator, nichtnegativer Operator). Sei T ein symmetrischer Operator auf \mathcal{H} , dessen Definitionsbereich $\mathcal{D}(T)$ dicht in \mathcal{H} liegt. Dann nennen wir T *von unten beschränkt*, wenn es eine Konstante $a \in \mathbb{R}$ gibt, sodass

$$\langle T\psi, \psi \rangle \geq a\|\psi\|^2, \quad \forall \psi \in \mathcal{D}(T).$$

Ist $a \geq 0$, dann nennen wir T *nichtnegativ*.

Der Raum $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ aller linearen, beschränkten Operatoren formt einen Vektorraum, den wir durch die Verknüpfung $(T, Z) \mapsto T \circ Z$ zu einer unitären Banachalgebra erweitern können. Der Konvention folgend schreiben wir meist TZ statt $T \circ Z$. Versehen wir $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ zusätzlich noch mit der Involution $T \mapsto T^*$, die jedem Operator $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ die Adjungierte T^* zuordnet, dann erhalten wir eine C^* -Algebra, die wir wieder mit $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ bezeichnen.

Beschränkte Operatoren $P \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, für die $P \circ P = P$ gilt, heißen *Projektionen*. Gilt dazu $\text{ran}(P) = \ker(P)^\perp$, dann nennen wir P eine *orthogonale Projektion*.

Lemma 3.1.5 [Rud91, Satz 12.14]. Sei $P \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ eine Projektion. Dann sind die nachfolgenden Aussagen alle äquivalent:

- (a) P ist selbstadjungiert.
- (b) P ist eine orthogonale Projektion.
- (c) $\langle P\psi, \psi \rangle = \|P\psi\|^2$ für alle $\psi \in \mathcal{H}$.

Es folgen zwei Resultate zu lokal lipschitzstetigen Funktionen.

Satz 3.1.6 (Satz von Rademacher) [Eva10, 5.8. Satz 6]. Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ eine offene, beschränkte Menge und g eine lokal lipschitzstetige Funktion auf Ω . Dann ist g fast überall differenzierbar in Ω .

Den Beweis zu folgendem Resultat hat die Autorin selbst formuliert.

Lemma 3.1.7. Sei $M \subset \mathbb{R}^n$ kompakt mit C^1 -Rand und g lokal lipschitzstetig auf M . Dann liegt $g^2\varphi$ in $H^1(M)$, vorausgesetzt $\varphi \in H^1(M)$.

Beweis. Da M kompakt ist, ist g und somit auch $h := g^2$ lipschitzstetig auf M . Nach [Eva10, 5.8. Satz 4] liegt h dann in $W^{1,\infty}(M)$. Da $\mu(M) < \infty$ (μ das Lebesgue-Maß) und $h \in L^\infty(M)$, gilt

$$\|h\|_{L^2(M)} \leq \mu(M)^{\frac{1}{2}} \|h\|_{L^\infty(M)}.$$

Dasselbe lässt sich für ∇h zeigen, demnach $h \in H^1(M)$. Wir können folglich die Produktregel [MKL22, Satz 5.3.16] auf $h \cdot \varphi$ anwenden und erhalten

$$\nabla(h \cdot \varphi) = \nabla h \cdot \varphi + h \cdot \nabla \varphi.$$

Wegen

$$\|h\varphi\|_{L^2(M)} \leq \|h\|_{L^\infty(M)} \|\varphi\|_{L^2(M)} < \infty$$

und

$$\|\nabla(h\varphi)\|_{L^2(M)} \leq \|\nabla h\|_{L^\infty(M)} \|\varphi\|_{L^2(M)} + \|h\|_{L^\infty(M)} \|\nabla \varphi\|_{L^2(M)} < \infty$$

gilt schließlich $h\varphi = g^2\varphi \in H^1(M)$. \square

Abschließend zeigen wir eine Möglichkeit, die Norm einer (endlichen) Matrix abzuschätzen. Wir bedienen uns dafür einem Resultat von Issai Schur [Sch11, §2 I.].

Lemma 3.1.8. *Sei A eine $N \times N$ Matrix mit*

$$\sum_{j=1}^N \left| \sum_{l=1}^N a_{lj} a_{lj} \right| \leq M, \quad p = 1, \dots, N.$$

Dann gilt $\|A\|_{\mathcal{L}(l^2(N))} \leq \sqrt{M}$.

Beweis. Sei $C_{ij} = \sum_{l=1}^N a_{li} a_{lj}$. Offensichtlich ist $C := (C_{ij})_{i,j \in 1, \dots, N}$ eine symmetrische Matrix und

$$\begin{aligned} \langle Cx, x \rangle &= \sum_{i,j=1}^N C_{ij} x_j x_i = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{l=1}^N a_{li} a_{lj} x_j x_i = \sum_{l=1}^N \sum_{i=1}^N a_{li} x_i \sum_{j=1}^N a_{lj} x_j = \sum_{l=1}^N \left(\sum_{i=1}^N a_{li} x_i \right)^2 \\ &= \|Ax\|^2 \end{aligned}$$

für alle $x \in l^2(N)$. Da C symmetrisch ist, ist $\lambda = \max_{\|x\|=1} \langle Cx, x \rangle$ ein Eigenwert von C (für einen Beweis siehe z.B. [Tay85, Satz 6.11-B]) und für den zugehörigen Eigenvektor $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_N) \neq 0$ gilt $C\xi = \lambda\xi$. Dieser ist nichtnegativ, denn $\langle Cx, x \rangle \geq 0$ für alle $x \in l^2(N)$. Sei $|\xi_p|$ der größte der Einträge $|\xi_1|, \dots, |\xi_N|$, dann folgt

$$\lambda \xi_p = \sum_{j=1}^N C_{pj} \xi_j, \quad \lambda |\xi_p| \leq \sum_{j=1}^N |C_{pj}| |\xi_j| \leq |\xi_p| \sum_{j=1}^N |C_{pj}|,$$

d.h. $\lambda \leq \sum_{j=1}^N |C_{pj}| \leq M$. Insgesamt folgt

$$\max_{\|x\|=1} \langle Cx, x \rangle = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|^2 \leq M,$$

und damit die Aussage. \square

3.2 Z-Matrizen

Sei $N \in \mathbb{N}$ eine natürliche Zahl und $[N] := \{1, \dots, N\}$. Sei $A = (a_{ij})_{i,j \in [N]} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ eine reelle $N \times N$ Matrix. Wir sagen A ist nichtnegativ (positiv), in Zeichen $A \geq 0$ ($A > 0$), wenn $a_{ij} \geq 0$ ($a_{ij} > 0$) für alle $i, j \in [N]$. Genauso bezeichnen wir einen Vektor $x \in \mathbb{R}^N$ als nichtnegativ (positiv), wenn jede seiner Komponenten nichtnegativ (positiv) ist. Die Aussage $A \geq B$ ($A > B$) ist so zu verstehen, dass $A - B \geq 0$ ($A - B > 0$), gleiches gilt für Vektoren.

Definition 3.2.1 (*Z-Matrix, M-Matrix*) [Ple77, S.176]. Wir nennen eine Matrix $A = (a_{ij})_{i,j \in 1, \dots, N} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ **Z-Matrix**, wenn $a_{ij} \leq 0$ für $i \neq j$. Gibt es eine $N \times N$ Matrix $B \geq 0$ und $s \in \mathbb{R}$ mit $s \geq \rho(B) := \max\{|\lambda| \mid \lambda \text{ ist Eigenwert von } B\}$, sodass $A = sI - B$, dann ist A eine **M-Matrix**.

Offensichtlich ist jede *M-Matrix* eine *Z-Matrix*. Alle Lösungen der Gleichung $\det(\lambda I - B) = 0$ sind Eigenwerte von B ; alle Lösungen von $\det(\mu I - A) = \det((s - \mu)I - B) = 0$ sind Eigenwerte von A . D.h. $\sigma(A) = \{s - \lambda \mid \lambda \in \sigma(B)\}$. Da B nichtnegativ ist, folgt mit Perron und Frobenius [siehe insb. Fro12], dass $\rho(B)$ selbst Eigenwert von B ist. Wir können daraus schließen, dass die Matrix A nur im Fall $s > \rho(B)$ invertierbar ist. Wir werden nun solche, also nichtsinguläre *M-Matrizen* genauer charakterisieren.

Die folgenden Aussagen entsprechen C_9, K_{43}, F_{16} und F_{15} in [Ple77], jedoch sind dort keine Beweise angegeben. Diese sind aus verschiedenen Quellen zusammengesucht.

Satz 3.2.2 (Positivität der Eigenwerte). *Eine Z-Matrix A ist genau dann eine nichtsinguläre M-Matrix, wenn all ihre reellen Eigenwerte positiv sind.*

Beweis. \Rightarrow : Es ist $A = sI - B$ mit $s > \rho(B)$. Aus $\sigma(A) = \{s - \lambda \mid \lambda \in \sigma(B)\}$ folgt die Aussage.

\Leftarrow : Da A eine *Z-Matrix* ist, können wir schreiben $A = sI - B$ mit $s = \max_{i \in [N]} a_{ii}$ und $B = sI - A \geq 0$. Es ist offensichtlich, dass A invertierbar ist. Es bleibt zu zeigen, dass $s > \rho(B)$. Dazu beweisen wir zunächst mit Hilfe der Neumann-Reihe, dass jede *Z-Matrix* C mit $C \geq A$ ebenfalls invertierbar ist [FP62, (4,2) 1°]. Es sei $\delta > 0$ so klein gewählt, dass $T = I - \delta C \geq 0$. Dann ist $S = I - \delta A \geq I - \delta C \geq 0$ und für den maximalen Eigenwert $\rho(S)$ von S gilt

$$\det((1 - \rho(S))I - \delta A) = \det(S - \rho(S)I) = 0.$$

Da alle reellen Eigenwerte von A positiv sind, gilt $1 - \rho(S) > 0$, folglich $0 \leq \rho(S) < 1$. Somit $\|S\| = \rho(S) < 1$ und es konvergiert die Neumann-Reihe

$$\sum_{k=0}^{\infty} S^k = (I - S)^{-1} = (\delta A)^{-1}.$$

Wegen $S^k \geq T^k$ für alle $k \in \mathbb{N}$, konvergiert auch die Reihe

$$\sum_{k=0}^{\infty} T^k = (I - T)^{-1} = (\delta C)^{-1}$$

und somit existiert C^{-1} .

Sei nun $r = \rho(B)$, dann ist $rI - B = rI - (sI - A) = (r - s)I + A$ und wir sehen, dass diese Matrix im Fall $r - s \geq 0$ invertierbar ist, folglich $s > r$. □

Das bedeutet insbesondere, dass symmetrische, nichtsinguläre *M-Matrizen* nur positive Eigenwerte besitzen. Mit Hilfe dieses ersten Resultates können wir folgenden Ringschluss führen:

Satz 3.2.3 (weitere Charakterisierungen nichtsingulärer *M-Matrizen*). *Sei A eine Z-Matrix. Dann sind die nachfolgenden Aussagen alle äquivalent:*

- (a) A ist eine nichtsinguläre *M-Matrix*
- (b) Es gibt einen Vektor $x \in \mathbb{R}^n$ mit $x \geq 0$, sodass $Ax > 0$.

(c) A ist monoton, d.h. $Ax \geq 0 \Rightarrow x \geq 0$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$.

(d) A ist invers-positiv, d.h. A^{-1} existiert und $A^{-1} \geq 0$.

Beweis. Wir beweisen (b) \Rightarrow (c) \Rightarrow (d) \Rightarrow (b) \Rightarrow (a) \Rightarrow (d).

(b) \Rightarrow (c)[Sch61, Hilfssatz 1.1.,1.2. 2]: Zunächst setzen wir wieder $A = sI - B$ für $s = \max_{i \in [N]} a_{ii}$ und $B = sI - A \geq 0$. Ist $x \geq 0$ ein Vektor für den $Ax > 0$ gilt, dann muss schon $x > 0$ gelten, sonst wäre

$$(Ax)_i = \sum_{j=1}^N a_{ij}x_j = a_{ii}x_i - \sum_{j=1, j \neq i}^N |a_{ij}|x_j \leq 0$$

für ein $i \in [N]$. Offensichtlich muss auch $s > 0$ gelten. Wir zeigen nun, dass $u > 0$, wenn $(sI - B)u > 0$. Wir nehmen an $u \not> 0$, folglich $v = -u \not\leq 0$. Dann gibt es ein $\alpha \in \mathbb{R}$, sodass

$$v \leq \alpha x,$$

und für die größte untere Schranke $\alpha_0 = \inf\{\alpha \in \mathbb{R} \mid v \leq \alpha x\}$ gilt $\alpha_0 \geq 0$. Da dann auch $v \leq (\alpha_0 + \varepsilon)x$, also $v - \alpha_0 x \leq \varepsilon x$, für beliebiges $\varepsilon > 0$ folgt $v - \alpha_0 x \leq 0$ und somit ist

$$\alpha_0 = \min\{\alpha \in \mathbb{R} \mid v \leq \alpha x\}.$$

Wegen $(sI - B)v < 0$ und $(sI - B)x > 0$ sowie $B \geq 0$, d.h. aus $z \geq 0$ folgt $Bz \geq 0$, erhalten wir die Ungleichungskette

$$sIv < Bv \leq \alpha_0 Bx < \alpha_0 sIx,$$

was zeigt, dass $\alpha_0 x - v > 0$. Demnach gilt für ε klein genug

$$\alpha_0 x - v \geq \varepsilon x \quad (\alpha_0 x - v \neq \varepsilon x), \quad \text{d.h. } v \leq (\alpha_0 - \varepsilon)x,$$

ein Widerspruch, denn α_0 wurde minimal gewählt. Folglich gilt $u > 0$. Zuletzt bleibt zu zeigen $Au \geq 0 \Rightarrow u \geq 0$. Sei also u ein Vektor mit $Au \geq 0$, dann haben wir $A(nu + x) = nAu + Ax > 0$ für beliebiges $n \in \mathbb{N}$. Nach dem gerade gezeigten folgt daraus

$$nu + x > 0 \quad \Leftrightarrow \quad x > n(-u)$$

und da n beliebig groß werden kann, muss $-u \leq 0$, also $u \geq 0$ gelten.

(c) \Rightarrow (d)[Sch61, Hilfssatz 1.1 2]: Sei z im Kern von A , also $Az = 0$, dann folgt aus der Monotonie $z \geq 0$. Zugleich ist $A(-z) = 0$, demnach auch $-z \geq 0$, folglich $z = 0$. A ist damit invertierbar und wir finden zu jedem nichtnegativen Vektor v ein w , sodass $v = Aw \geq 0$. Das impliziert $A^{-1}(Aw) = w \geq 0$. Wir haben damit gezeigt $v \geq 0 \Rightarrow A^{-1}v \geq 0$. Wählt man nun für v nacheinander die Einheitsvektoren in \mathbb{R}^N , so lässt sich (d) schnell einsehen.

(d) \Rightarrow (b)[FP62, Satz (4,3) 11 $^\circ \Rightarrow$ 1 $^\circ$]: Sei $e = (1, 1, \dots, 1)^T$, dann gilt $A^{-1}e \geq 0$ und $A(A^{-1}e) = e > 0$.

(b) \Rightarrow (a): Eine Z -Matrix $A = sI - B$ mit Eigenschaft (b) ist nach dem Gezeigten invertierbar. Mit der gleichen Argumentation wie im Beweis zu Satz 3.2.2 können wir daraus schon $s > \rho(B)$ folgern.

(a) \Rightarrow (d)[FP62, Satz (3,1),(3,2),(3,3)]: Es bezeichne $A_{N-j} \in \mathbb{R}^{N-j \times N-j}$ für $j \in \{0, 1, \dots, N-1\}$ die quadratische Matrix, die aus den ersten $N-j$ Zeilen und Spalten von A besteht. Wähle j beliebig. Offensichtlich ist $A_{N-j} = sI - B_{N-j}$ wieder eine Z -Matrix und nach Frobenius gilt $\rho(B_{N-j}) \leq \rho(B)$ [Fro12, §1], also $s > \rho(B_{N-j})$. Somit sind alle reellen Eigenwerte von A_{N-j} positiv. Die Determinante $\det(A_{N-j})$ entspricht dem Produkt der

Eigenwerte von A_{N-j} und da je zwei komplexe Eigenwerte einer reellen Matrix konjugiert zueinander sind, und $\lambda\bar{\lambda} > 0$, folgt insgesamt $\det(A_{N-j}) > 0$. Wir zeigen nun, dass aus $\det(A_{N-j}) > 0$ für alle $j \in \{0, 1, \dots, N-1\}$ folgt, dass $A = T_1 T_2$ für eine untere bzw. obere Dreiecksmatrix T_1 bzw. T_2 , die beide positive Diagonalelemente besitzen. Wir verwenden dazu vollständige Induktion. Der Fall $N = 1$ ist klar, wähle also ein $N > 1$. Wir können davon ausgehen, dass die Aussage für alle Matrizen mit Dimension kleiner als N wahr ist, sodass insbesondere $A_{N-1} = \tilde{T}_1 \tilde{T}_2$, für eine untere (obere) Dreiecksmatrix \tilde{T}_1 (\tilde{T}_2) mit positiver Diagonalen. Es erfülle

$$A = \begin{pmatrix} A_{N-1} & a \\ b^T & a_{NN} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times N}, \quad a, b \in \mathbb{R}^{N-1}$$

die Annahme. Wir betrachten das Gleichungssystem

$$\tilde{A}x = \begin{pmatrix} a \\ a_{NN} \end{pmatrix}, \quad \tilde{A} = \begin{pmatrix} A_{N-1} & 0 \\ b^T & 1 \end{pmatrix}, \quad x \in \mathbb{R}^N.$$

Es gilt

$$\tilde{A}x = \begin{pmatrix} A_{N-1}x' \\ b^T x' + x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ a_{NN} \end{pmatrix}, \quad x' \in \mathbb{R}^{N-1}$$

wobei $x'_i = x_i$ für $i \in [N-1]$. Folglich ist $x' = A_{N-1}^{-1}a$ und

$$x_N = a_{NN} - b^T A_{N-1}^{-1}a.$$

Da nach dem Entwicklungssatz von Laplace $\det(\tilde{A}) = \det(A_{N-1})$, ist mit der Cramerschen Regel

$$a_{NN} - b^T A_{N-1}^{-1}a = \det(A) / \det(A_{N-1}) > 0 \quad (\text{nach Voraussetzung}).$$

Somit entsprechen die Matrizen

$$T_1 = \begin{pmatrix} \tilde{T}_1 & 0 \\ b^T \tilde{T}_2^{-1} & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad T_2 = \begin{pmatrix} \tilde{T}_2 & \tilde{T}_1^{-1}a \\ 0 & a_{NN} - b^T A_{N-1}^{-1}a \end{pmatrix}$$

der gewünschten Form und $A = T_1 T_2$. Als letztes prüfen wir nach, dass $T_1 = (r_{ij})$ und $T_2 = (s_{ij})$ monotone Z -Matrizen sind. Zuerst beweisen wir $r_{ij} \leq 0$ und $s_{ij} \leq 0$ für $i \neq j$, wieder mit Hilfe vollständiger Induktion, diesmal nach $i+j$. Im Fall $i+j = 3$ ist $a_{12} = r_{11}s_{12}$ sowie $a_{21} = r_{21}s_{11}$ und wegen $r_{11} > 0, s_{11} > 0$ folgt die Aussage. Als nächstes wählen wir $i+j > 3$ und zeigen die Implikation unter der Annahme, dass sie für alle $k+l < i+j$ bereits erfüllt ist. Sei $i < j$. Da $r_{ik} = 0$, wenn $i < k$ und $s_{kj} = 0$, wenn $j < k$, gilt

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^N r_{ik}s_{kj} = r_{ii}s_{ij} + \sum_{k < i} r_{ik}s_{kj}.$$

Es ist $i+k < i+j$ sowie $k+j < i+j$, demnach nach Voraussetzung $r_{ik} \leq 0$ und $s_{kj} \leq 0$ für $k < i$, also $\sum_{k < i} r_{ik}s_{kj} \geq 0$. Da $r_{ii} > 0$, aber $a_{ij} \leq 0$, folgt damit $s_{ij} \leq 0$. Indem wir $j < i$ annehmen, lässt sich dasselbe für r_{ij} zeigen. Die Monotonie lässt sich nach einem ähnlichen Verfahren nachweisen. Ist $w = T_1 z \geq 0$, dann lässt sich $z_1 \geq 0$ sofort einsehen. Ist $k > 1$ und $z_p \geq 0$ für alle $p < k$, so folgt $z_k \geq 0$ aus der Identität $w_k = r_{kk}z_k + \sum_{i < k} r_{ki}z_i \geq 0$. Ergo $z \geq 0$ und ganz analog folgt die Monotonie für T_2 . Aus dem bereits Gezeigten folgt $T_1^{-1} \geq 0$ und $T_2^{-1} \geq 0$, d.h. $A^{-1} = T_2^{-1}T_1^{-1} \geq 0$. \square

3.3 Die Riemannsche Abstandsfunktion

Wir werden diese Abstandsfunktion in Kapitel 5 verwenden und wollen vorweg ihre Definition und einige wichtige Eigenschaften vorstellen. Sei Ω eine offene zusammenhängende Menge in \mathbb{R}^n und μ eine nichtnegative, stetige Funktion auf Ω . Wir definieren die Riemannsche Abstandsfunktion $\rho_\mu: \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$\rho_\mu(x, y) := \inf_{\gamma} \int_0^1 \mu(\gamma(t))^{\frac{1}{2}} \|\dot{\gamma}(t)\| dt, \quad \|\dot{\gamma}(t)\| = \sqrt{\dot{\gamma}_1^2(t) + \dots + \dot{\gamma}_n^2(t)},$$

wobei hier das Infimum über alle stückweise stetig differenzierbare Wege $\gamma: [0, 1] \rightarrow \Omega$ mit Anfangspunkt $\gamma(0) = x$ und Endpunkt $\gamma(1) = y$ gemeint ist ([ADFJM19, S.13],[Agm82, S.12]). Die Abstandsfunktion ρ_μ ist offensichtlich symmetrisch, nichtnegativ und erfüllt die Dreiecksungleichung. Sie ist aber nicht positiv definit, denn μ kann den Wert Null annehmen, deshalb nennen wir ρ_μ eine Pseudometrik. Wir definieren den Abstand eines Punktes $x \in \Omega$ zu einer Menge $E \subset \Omega$ durch

$$\rho_\mu(x, E) := \inf_{y \in E} \rho_\mu(x, y)$$

und den Abstand zweier Mengen $E, F \subset \Omega$ durch

$$\rho_\mu(F, E) := \inf_{x \in F} \rho_\mu(x, E).$$

Ist μ positiv auf Ω mit $\min_{x \in \Omega} \mu(x) = c > 0$, dann können wir abschätzen

$$\rho_\mu(x, y) \geq \inf_{\gamma} \sqrt{c} \int_0^1 \|\dot{\gamma}(t)\| dt \geq \sqrt{c} \|x - y\|_2. \quad (3.1)$$

Abschließend stellen wir ein wichtiges Lemma vor.

Lemma 3.3.1 [Agm82, Lemma 1.3, Satz 1.4 (ii)] *Ist h eine reelle Funktion mit $|h(x) - h(y)| \leq \rho_\mu(x, y)$ für alle $x, y \in \Omega$, dann ist h lokal lipschitzstetig und es gilt fast überall*

$$\|\nabla h(x)\|^2 = \nabla h(x) \cdot \nabla h(x) \leq \mu(x).$$

Insbesondere erfüllt die Funktion $h(x) = \rho_\mu(x, E)$, mit $E \subset \Omega$ einer beliebigen Teilmenge, die Bedingung von Lemma 3.3.1 (auf Grund der umgekehrten Dreiecksungleichung).

Beweis. Wir zeigen zuerst, dass h lokal lipschitzstetig ist. Sei $x_0 \in \Omega$ gegeben. Wähle $r > 0$, sodass $B(x_0, r) \subset \overline{B}(x_0, r) \subset \Omega$, dann gilt für $x, y \in B(x_0, r)$

$$\begin{aligned} |h(x) - h(y)| &\leq \rho_\mu(x, y) = \inf_{\gamma} \int_0^1 \mu(\gamma(t))^{\frac{1}{2}} \|\dot{\gamma}(t)\| dt \\ &\leq \int_0^1 \mu(tx + (1-t)y)^{\frac{1}{2}} \|x - y\| dt \\ &\leq \|x - y\| \cdot \sup_{z \in \overline{B}(x_0, r)} \mu(z)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Folglich ist h lokal Lipschitzstetig und nach dem Satz von Rademacher (3.1.6) damit f. ü. differenzierbar. Sei $x \in \Omega$ ein Punkt in dem ∇h existiert, dann existiert zu beliebigem $\nu \in \mathbb{R}^n$ die Richtungsableitung $\langle \nabla h(x), \nu \rangle$. Sei $\varepsilon > 0$ so klein, dass $x + t\nu \in \Omega$ für $0 \leq t \leq \varepsilon$. Dann folgt

$$h(x + \varepsilon\nu) - h(x) \leq \rho_\mu(x + \varepsilon\nu, x) \leq \int_0^1 \sqrt{\mu(x + \varepsilon t\nu)} \|\varepsilon\nu\| dt$$

und somit

$$\begin{aligned} \langle \nabla h(x), \nu \rangle &= \lim_{\varepsilon \downarrow 0} \frac{h(x + \varepsilon\nu) - h(x)}{\varepsilon} \\ &\leq \lim_{\varepsilon \downarrow 0} \int_0^1 \sqrt{\mu(x + \varepsilon t\nu)} \|\nu\| dt = \int_0^1 \sqrt{\mu(x)} \|\nu\| dt \\ &= \sqrt{\mu(x)} \|\nu\|, \end{aligned}$$

wobei die Existenz des Limes aus der Stetigkeit von μ folgt. Nehmen wir vorerst an, μ sei positiv, dann können wir mit Cauchy-Schwarz zeigen

$$\sup_{\nu \neq 0} \frac{\langle \nabla h(x), \nu \rangle}{\sqrt{\mu(x)} \|\nu\|} = \sup_{\nu \neq 0} \frac{\langle \frac{1}{\sqrt{\mu(x)}} \nabla h(x), \sqrt{\mu(x)} \nu \rangle}{\sqrt{\mu(x)} \|\nu\|} \leq \frac{1}{\sqrt{\mu(x)}} \|\nabla h(x)\|.$$

Für $\nu = \nabla h(x)$ wird Gleichheit angenommen, daher ist

$$\frac{1}{\sqrt{\mu(x)}} \|\nabla h(x)\| = \sup_{\nu \neq 0} \frac{\langle \nabla h(x), \nu \rangle}{\sqrt{\mu(x)} \|\nu\|} \leq 1$$

und es folgt die Aussage für f. a. $x \in \Omega$. Für allgemeine nichtnegative μ setzen wir $\mu_\varepsilon(x) = \mu(x) + \varepsilon$. Dann gilt nach dem gerade gezeigten

$$\|\nabla h(x)\|^2 \leq \mu_\varepsilon(x) = \mu(x) + \varepsilon, \quad \text{für f. a. } x \in \Omega.$$

Da ε beliebig klein gewählt werden kann, gilt die Aussage auch für nichtnegative μ . (Diese Verallgemeinerung wird in [ADFJM19, 3.3] eingeführt) \square

3.4 Spektraltheorie selbstadjungierter Operatoren

In diesem Abschnitt geben wir eine Einführung in die Spektraltheorie selbstadjungierter, nicht notwendigerweise beschränkter Operatoren auf Hilberträumen. Unser Ziel ist, für jeden Operator A mit den genannten Eigenschaften die Identität

$$A = \int_{\sigma(A)} \lambda dP(\lambda), \tag{3.2}$$

herzuleiten. $P(\lambda)$ bezeichnet hier ein spezielles, projektionswertiges Maß. Dieses Vorhaben geht Hand in Hand mit der Entwicklung eines Funktionalkalküls für unbeschränkte, selbstadjungierte Operatoren: Kennen wir das Maß $P(\lambda)$, das (3.2) erfüllt, so können wir die Menge der messbaren Funktionen via $f \mapsto \int_{\sigma(A)} f(\lambda) dP(\lambda)$ auf die der unbeschränkten Operatoren über \mathcal{H} abbilden, wobei insbesondere gilt $f = \sum_{j=0}^n \alpha_j \lambda^j \mapsto \sum_{j=0}^n \alpha_j A^j = f(A)$ (unter entsprechender Anpassung der Definitionsbereiche).

Der ganze Abschnitt ist eine Wiedergabe von [Tes09, Abschnitt 3.1].

Es sei \mathfrak{B} die Borel- σ -Algebra über \mathbb{R} . Wir erinnern daran, dass eine orthogonale Projektion $P \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ durch $P \circ P = P$ und $P^* = P$ charakterisiert wird (siehe Lemma 3.1.5).

Definition 3.4.1. Ein projektionswertiges Maß ist eine Abbildung $P: \mathfrak{B} \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$, $\Omega \mapsto P(\Omega)$, die Borel-Mengen auf orthogonale Projektionen abbildet, sodass gilt

- (i) $P(\mathbb{R}) = \mathbb{I}$,
- (ii) P ist stark σ -additiv, d.h. wenn $\Omega = \bigcup_n \Omega_n$ mit $\Omega_n \cap \Omega_m = \emptyset$ für $n \neq m$, dann gilt $P(\Omega)\psi = \sum_n P(\Omega_n)\psi$ für alle $\psi \in \mathcal{H}$.

Aus diesen zwei Eigenschaften können wir folgern:

Satz 3.4.2. Sei P ein projektionswertiges Maß, dann gilt

- (i) $P(\emptyset) = 0$,
- (ii) $P(\Omega \setminus \Omega_1) = P(\Omega) - P(\Omega_1)$, wenn $\Omega_1 \subset \Omega$,
- (iii) $P(\Omega_1 \cup \Omega_2) + P(\Omega_1 \cap \Omega_2) = P(\Omega_1) + P(\Omega_2)$,
- (iv) $P(\Omega_1 \cap \Omega_2) = P(\Omega_1)P(\Omega_2)$,
- (v) $\Omega_1 \subset \Omega_2 \Rightarrow P(\Omega_1) \leq P(\Omega_2)$, wobei $P(\Omega_1) \leq P(\Omega_2)$ bedeutet, dass $\langle P(\Omega_1)\psi, \psi \rangle \leq \langle P(\Omega_2)\psi, \psi \rangle$ für alle $\psi \in \mathcal{H}$.

Beweis. (i) Es gilt $P(\Omega) = P(\emptyset \cup \Omega) = P(\emptyset) + P(\Omega)$ und folglich $P(\emptyset) = 0$.

(ii) Für $\Omega_1 \subset \Omega$ haben wir $P(\Omega) = P(\Omega \setminus \Omega_1 \cup \Omega_1) = P((\Omega \setminus \Omega_1) + P(\Omega_1))$ und es folgt die Aussage.

(iii) Der Fall $\Omega_1 \cap \Omega_2 = \emptyset$ ist offensichtlich, wir nehmen also an $\Omega_1 \cap \Omega_2 \neq \emptyset$. Wegen $P(\Omega_1 \cup \Omega_2) = P(\Omega_1 \setminus (\Omega_1 \cap \Omega_2)) + P(\Omega_2)$, folgt die Aussage zusammen mit (ii).

(iv) Sei zuerst $\Omega_1 \cap \Omega_2 = \emptyset$. Dann ist wegen $P \circ P = P$

$$\begin{aligned} P(\Omega_1 \cup \Omega_2) &= P(\Omega_1 \cup \Omega_2)^2 = (P(\Omega_1) + P(\Omega_2))^2 \\ &= P(\Omega_1) + P(\Omega_1)P(\Omega_2) + P(\Omega_2)P(\Omega_1) + P(\Omega_2), \end{aligned}$$

d.h. $P(\Omega_1)P(\Omega_2) + P(\Omega_2)P(\Omega_1) = 0$. Multiplikation von rechts mit $P(\Omega_2)$ liefert

$$P(\Omega_1)P(\Omega_2) = -P(\Omega_2)P(\Omega_1)P(\Omega_2).$$

Damit ist $P(\Omega_1)P(\Omega_2)$ selbstadjungiert, und folglich $P(\Omega_1)P(\Omega_2) = P(\Omega_2)P(\Omega_1) = 0$, nach obiger Gleichung. Sei nun $\Omega_1 \cap \Omega_2 \neq \emptyset$, dann ist

$$P(\Omega_1)P(\Omega_2) = (P(\Omega_1 \setminus \Omega_2) + P(\Omega_1 \cap \Omega_2))(P(\Omega_2 \setminus \Omega_1) + P(\Omega_1 \cap \Omega_2))$$

Multiplizieren wir die Klammern aus, dann bleibt wegen dem gerade gezeigten nur der Ausdruck $P(\Omega_1 \cap \Omega_2) \circ P(\Omega_1 \cap \Omega_2) = P(\Omega_1 \cap \Omega_2)$ übrig.

(v) folgt direkt aus (ii), denn $\langle P(\Omega_2 \setminus \Omega_1)\psi, \psi \rangle = \|P(\Omega_2 \setminus \Omega_1)\psi\|^2 \geq 0$. \square

Jedem projektionswertigen Maß können wir eine *projektive Auflösung der Identität* \mathbb{I} zuordnen via

$$P(\lambda) = P((-\infty, \lambda]).$$

Diese erfüllt die Eigenschaften

- (i) $P(\lambda)$ ist eine orthogonale Projektion für alle $\lambda \in \mathbb{R}$.
- (ii) $P(\lambda_1) \leq P(\lambda_2)$ für $\lambda_1 \leq \lambda_2$.
- (iii) $P(\lambda)$ ist rechtsseitig stark stetig, d.h., $s - \lim_{\lambda_n \downarrow \lambda} P(\lambda_n) = P(\lambda)$.
- (iv) $s - \lim_{\lambda \rightarrow -\infty} P(\lambda) = 0$ und $s - \lim_{\lambda \rightarrow +\infty} P(\lambda) = \mathbb{I}$.

Weiter erhalten wir für $\psi, \varphi \in H$ durch

$$\mu_\psi(\Omega) = \langle P(\Omega)\psi, \psi \rangle = \|P(\Omega)\psi\|^2 \quad (3.3)$$

bzw.

$$\mu_{\psi, \varphi}(\Omega) = \langle P(\Omega)\psi, \varphi \rangle$$

zwei Borel-Maße. Letzteres ist komplex und kann mittels der Polarisationsformel (Lemma 3.1.1) aus μ_ψ hergeleitet werden. Beide Maße sind endlich, denn $\mu_\psi(\mathbb{R}) = \|\psi\|^2 < \infty$ und $\mu_{\varphi, \psi}(\mathbb{R}) \leq \|\varphi\| \|\psi\|$ nach Cauchy-Schwarz.

Sei $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ der Raum aller Borel-messbaren, beschränkten Funktionen, versehen mit der Supremumnorm $\|\cdot\|_\infty$. Da das Produkt zweier beschränkter Funktionen wieder beschränkt ist und $\|\bar{f}\|_\infty = \|f\|_\infty$, formt $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ eine C^* -Algebra zusammen mit der Involution $f \mapsto \bar{f}$. Indem wir nun Funktionen aus $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ bezüglich P integrieren, erhalten wir eine Abbildung Ψ von $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ nach $\mathcal{L}(\mathcal{H})$. Auch letzterer Raum ist (zusammen mit der Involution $T \mapsto T^*$) eine C^* -Algebra, wie wir in Abschnitt 3.1 gesehen haben. Das Schöne ist, dass diese zusätzlichen Strukturen unter Ψ erhalten bleiben.

Satz 3.4.3. *Sei P ein projektionswertiges Maß. Der Operator*

$$\Psi: \mathcal{B}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}), \quad f \mapsto \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) dP(\lambda)$$

ist ein C^* -Algebra Homomorphismus, d.h. ein Homomorphismus zwischen C^* -Algebren mit $\Psi(fg) = \Psi(f)\Psi(g)$ und $\Psi(\bar{f}) = \Psi(f)^*$, mit Norm 1. Des weiteren gilt für beliebige $\psi, \varphi \in H$

$$\langle \Psi(f)\psi, \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) d\mu_{\psi, \varphi}(\lambda), \quad f \in \mathcal{B}(\mathbb{R}), \quad (3.4)$$

und

$$\|\Psi(f)\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |f(\lambda)|^2 d\mu_\psi(\lambda), \quad f \in \mathcal{B}(\mathbb{R}). \quad (3.5)$$

Beweis. Sei $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ die Menge aller Treppenfunktionen über \mathbb{R} und Ψ zunächst auf $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ definiert durch

$$\Psi(f) = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) dP(\lambda) = \sum_{j=1}^n \alpha_j P(\Omega_j), \quad f = \sum_{j=1}^n \alpha_j \chi_{\Omega_j} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}).$$

Dann lässt sich schnell einsehen, dass $\Psi(1) = \mathbb{I}$ und $\Psi(\bar{f}) = \Psi(f)^*$. Das Produkt zweier Treppenfunktionen $f = \sum_{j=1}^n \alpha_j \chi_{\Omega_j}$ und $g = \sum_{i=1}^m \beta_i \chi_{\tilde{\Omega}_i}$ ist $fg = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m \alpha_j \beta_i \chi_{\Omega_j \cap \tilde{\Omega}_i}$ und somit

$$\Psi(fg) = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m \alpha_j \beta_i P(\Omega_j \cap \tilde{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m \alpha_j \beta_i P(\Omega_j) P(\tilde{\Omega}_i) = \Psi(f)\Psi(g).$$

Identität (3.4) ist offensichtlich und wegen $\langle P(\Omega_i)\psi, P(\Omega_j)\psi \rangle = \langle \psi, P(\Omega_i \cap \Omega_j)\psi \rangle = 0$, wenn $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset$, folgt

$$\begin{aligned}
\langle \Psi(f)\psi, \Psi(f)\psi \rangle &= \left\langle \sum_{j=1}^n \alpha_j P(\Omega_j)\psi, \sum_{i=1}^n \alpha_i P(\Omega_i)\psi \right\rangle \\
&= \sum_{j=1}^n \alpha_j \sum_{i=1}^n \bar{\alpha}_i \langle P(\Omega_j)\psi, P(\Omega_i)\psi \rangle \\
&= \sum_{j=1}^n |\alpha_j|^2 \mu_\psi(\Omega_j) \\
&= \int_{\mathbb{R}} |f(\lambda)|^2 d\mu_\psi(\lambda). \tag{3.6}
\end{aligned}$$

Es bleibt zu zeigen, dass $\|\Psi\| = 1$. Wir haben

$$\|\Psi\| = \sup_{f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})} \frac{\|\Psi(f)\|}{\|f\|_\infty} = \sup_{f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}), \psi \in H} \frac{\|\Psi(f)\psi\|}{\|f\|_\infty \|\psi\|}.$$

Nach (3.6) ist $\|\Psi(f)\psi\| \leq \|f\|_\infty \|\psi\|$ und da für $f = 1$ Gleichheit angenommen wird, folgt die Aussage.

Wir können nun Ψ stetig erweitern auf $\mathcal{B}(\mathbb{R})$, denn $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ liegt dicht in $\mathcal{B}(\mathbb{R})$. Diese Erweiterung, die wir wieder mit Ψ bezeichnen, ist eindeutig und besitzt ebenfalls Norm 1. Damit ist alles gezeigte auch für Funktionen aus $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ gültig. \square

Nach der Definition von Ψ ist $\Psi(\chi_\Omega) = P(\Omega)$. Damit können wir zeigen

$$\begin{aligned}
\mu_{\Psi(f)\psi, \Psi(g)\varphi}(\Omega) &= \langle P(\Omega)\Psi(f)\psi, \Psi(g)\varphi \rangle = \langle \Psi(\bar{g} \cdot \chi_\Omega \cdot f), \varphi \rangle \\
&= \int_{\Omega} \overline{g(\lambda)} f(\lambda) d\mu_{\psi, \varphi}(\lambda).
\end{aligned}$$

Für Treppenfunktionen lässt sich herleiten, dass dann

$$d\mu_{\Psi(f)\psi, \Psi(g)\varphi}(\Omega) = \bar{g} f d\mu_{\psi, \varphi}(\Omega) \tag{3.7}$$

und aus der Stetigkeit von Ψ folgt die Aussage wieder für alle $f, g \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$.

Im nächsten Schritt möchten wir Ψ auch für unbeschränkte Borel-messbare Funktionen definieren. Da im Allgemeinen der Operator $\Psi(f)$ dann ebenfalls unbeschränkt ist, müssen wir einen geeigneten Definitionsbereich wählen. Mit Blick auf (3.5) setzen wir

$$\mathcal{D}_f = \{ \psi \in \mathcal{H} \mid \int_{\mathbb{R}} |f(\lambda)|^2 d\mu_\psi(\lambda) < \infty \}.$$

Lemma 3.4.4. *Die soeben definierte Menge \mathcal{D}_f ist ein linearer, dichter Unterraum von \mathcal{H} .*

Beweis. Nach (3.3) ist $\mu_{\alpha\psi}(\lambda) = |\alpha|^2 \mu_\psi(\lambda)$ und

$$\begin{aligned}
\mu_{\varphi+\psi}(\lambda) &= \|P(\lambda)(\varphi + \psi)\|^2 \leq \|P(\lambda)\varphi\|^2 + 2\|P(\lambda)\varphi\|\|P(\lambda)\psi\| + \|P(\lambda)\psi\|^2 \\
&\leq 2 \left(\|P(\lambda)\varphi\|^2 + \|P(\lambda)\psi\|^2 \right) \\
&= 2\mu_\varphi(\lambda) + 2\mu_\psi(\lambda),
\end{aligned}$$

wobei wir uns erst der Dreiecksungleichung und dann der Youngschen Ungleichung bedienen haben. Demnach ist \mathcal{D}_f ein linearer Unterraum von \mathcal{H} . Dichtigkeit sieht man wie folgt ein: Zu gegebener Borel-messbarer Funktion f sei $\Omega_f^n := \{\lambda \mid |f(\lambda)| \leq n\}$. Für beliebiges $\psi \in \mathcal{H}$ liegt dann $\psi_n = P(\Omega_f^n)\psi$ in \mathcal{D}_f , denn nach (3.7) ist $\int_{\mathbb{R}} |f|^2 d\mu_{\psi_n}(\lambda) = \int_{\mathbb{R}} |f|^2 \chi_{\Omega_f^n} d\mu_{\psi}(\lambda) < \infty$. Außerdem

$$\|\psi - \psi_n\| = \|\Psi(\chi_{\mathbb{R} \setminus \Omega_f^n})\psi\| \rightarrow 0,$$

denn $\chi_{\Omega_f^n} \rightarrow \chi_{\mathbb{R}}$ in $L^2(\mathbb{R}, d\mu_{\psi})$. □

Die Dichtigkeit von \mathcal{D}_f ist wichtig, damit eine eindeutige Adjungierte zu $\Psi(f)$ existiert. Da wir nun mit unbeschränkten Operatoren arbeiten, müssen wir bei Untersuchungen auf Äquivalenz immer den Definitionsbereich mit in Betracht ziehen. Wenn $T_1\psi = T_2\psi$ für alle $\psi \in \mathcal{D}(T_1)$ und $\mathcal{D}(T_1) \subseteq \mathcal{D}(T_2)$, dann schreiben wir $T_1 \subseteq T_2$ und nennen T_2 eine *Erweiterung* von T_1 . Wenn $T_1 \subseteq T_2$ und $T_2 \subseteq T_1$, dann sind T_1 und T_2 *identisch*, in Zeichen $T_1 \equiv T_2$. Bevor wir uns dem nächsten Satz zuwenden, müssen wir noch Ψ auf die Menge der unbeschränkten Borel-Funktionen erweitern. Sei

$$\Omega_f^n := \{\lambda \mid |f(\lambda)| \leq n\} \quad \text{und} \quad f_n = \chi_{\Omega_f^n} f.$$

Da nach dem Satz der monotonen Konvergenz (von Beppo-Levi) $f_n \rightarrow f$ in $L^2(\mathbb{R}, d\mu_{\psi})$ für $\psi \in \mathcal{D}_f$, gilt $\int_{\mathbb{R}} f_n(\lambda) dP(\lambda) \xrightarrow{s} \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) dP(\lambda)$ auf \mathcal{D}_f und wir setzen

$$\Psi(f)\psi = \lim_{n \rightarrow \infty} \Psi(f_n)\psi = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\int_{\mathbb{R}} f_n(\lambda) dP(\lambda) \right) \psi = \left(\int_{\mathbb{R}} f(\lambda) dP(\lambda) \right) \psi, \quad \psi \in \mathcal{D}_f.$$

D.h. $\Psi(f) \equiv \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) dP(\lambda)$ auf $\mathcal{D}(\Psi(f)) = \mathcal{D}_f$.

Satz 3.4.5. *Sei f eine Borel-messbare Funktion. Der Operator*

$$\Psi(f) \equiv \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) dP(\lambda), \quad \mathcal{D}(\Psi(f)) = \mathcal{D}_f$$

erfüllt

$$\alpha\Psi(f) + \beta\Psi(g) \subseteq \Psi(\alpha f + \beta g), \quad \mathcal{D}(\alpha\Psi(f) + \beta\Psi(g)) = \mathcal{D}_{|f|+|g|}.$$

Weiterhin gilt $\Psi(\bar{f}) \equiv \Psi(f)^$ und*

$$\|\Psi(f)\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |f(\lambda)|^2 d\mu_{\psi}(\lambda) \quad \text{sowie} \quad \langle \Psi(f)\psi, \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) d\mu_{\psi, \psi}(\lambda)$$

für $\psi \in \mathcal{D}_f$. Außerdem

$$\Psi(f)\Psi(g) \subseteq \Psi(fg), \quad \mathcal{D}(\Psi(f)\Psi(g)) = \mathcal{D}_g \cap \mathcal{D}_{fg}.$$

Beweis. Wir beginnen mit der ersten Aussage. Es ist

$$\mathcal{D}(\alpha\Psi(f) + \beta\Psi(g)) = \mathcal{D}(\Psi(f)) \cap \mathcal{D}(\Psi(g)) = \mathcal{D}_f \cap \mathcal{D}_g$$

und mit Cauchy-Schwarz lässt sich zeigen, dass $\mathcal{D}_f \cap \mathcal{D}_g = \mathcal{D}_{|f|+|g|}$ (wichtig sind hier die Betragsstriche). Setzen wir

$$\Omega_{|f|+|g|}^n = \{\lambda \mid |f(\lambda)| + |g(\lambda)| \leq n\}, \quad f_n = \chi_{\Omega_{|f|+|g|}^n} f \quad \text{und} \quad g_n = \chi_{\Omega_{|f|+|g|}^n} g,$$

dann gilt $\Psi(f_n) \xrightarrow{s} \Psi(f)$ und $\Psi(g_n) \xrightarrow{s} \Psi(g)$. Somit $\alpha\Psi(f)\psi + \beta\Psi(g)\psi = \lim_{n \rightarrow \infty} \alpha\Psi(f_n)\psi + \beta\Psi(g_n)\psi = \lim_{n \rightarrow \infty} \Psi(\alpha f_n + \beta g_n)\psi = \lim_{n \rightarrow \infty} \Psi((\alpha f + \beta g)\chi_{\Omega_n})\psi = \Psi(\alpha f + \beta g)\psi$ für $\psi \in \mathcal{D}_{|f|+|g|}$.

Nun zu $\Psi(\bar{f}) \equiv \Psi(f)^*$. Für $\psi, \varphi \in \mathcal{D}_f = \mathcal{D}_{\bar{f}}$ folgern wir

$$\langle \Psi(f)\psi, \varphi \rangle = \langle \psi, \Psi(\bar{f})\varphi \rangle$$

aus der Stetigkeit von Ψ , d.h. $\Psi(\bar{f}) \subseteq \Psi(f)^*$. Es bleibt zu zeigen, dass $\mathcal{D}(\Psi(f)^*) \subseteq \mathcal{D}_f$. Sei dazu $\psi \in \mathcal{D}(\Psi(f)^*)$ und $\Psi(f)^*\psi = \xi$. Wegen $\Psi(f_n) = \Psi(f)P(\Omega_f^n)$ ist

$$\langle \varphi, \Psi(\bar{f}_n)\psi \rangle = \langle \Psi(f_n)\varphi, \psi \rangle = \langle \Psi(f)P(\Omega_f^n)\varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, P(\Omega_f^n)\xi \rangle$$

für $\varphi \in \mathcal{H}$. Demnach ist $\Psi(\bar{f}_n)\psi = P(\Omega_f^n)\xi$ und folglich

$$\int_{\mathbb{R}} |f_n|^2 d\mu_\psi = \|\Psi(\bar{f}_n)\psi\|^2 = \|P(\Omega_f^n)\xi\|^2 \rightarrow \|\xi\|^2$$

für $n \rightarrow \infty$. Nach dem Satz der monotonen Konvergenz erhalten wir $f \in L^2(\mathbb{R}, d\mu_\psi)$, also $\psi \in \mathcal{D}_f$.

Wir kommen zu den Identitäten (3.5) und (3.4), die wir auf unbeschränkte Borel-Funktionen übertragen wollen. Sei also f unbeschränkt und $\psi \in \mathcal{D}_f$. Wir haben

$$\|\Psi(f)\psi\|^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \|\Psi(f_n)\psi\|^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} |f_n(\lambda)|^2 d\mu_\psi(\lambda) = \int_{\mathbb{R}} |f(\lambda)|^2 d\mu_\psi(\lambda)$$

und wegen $f \in L^1(\mathbb{R}, d\mu_\psi)$ (denn μ_ψ ist endlich), lässt sich (3.4) analog für $\varphi = \psi$ herleiten. Nun zu der letzten Aussage. Zunächst nehmen wir an, g sei beschränkt. Wir nutzen wieder, dass $\Psi(f_n) = \Psi(f)P(\Omega_f^n)$. Zum einen haben wir $P(\Omega_f^n)\Psi(g)\psi \rightarrow \Psi(g)\psi$, zum anderen $\Psi(f)P(\Omega_f^n)\Psi(g)\psi = \Psi(f_n)\Psi(g)\psi = \Psi(f_n g)\psi \rightarrow \Psi(fg)\psi$, wenn $\psi \in \mathcal{D}_f$. D.h. auf \mathcal{D}_f gilt $\Psi(f)\Psi(g)\psi = \Psi(fg)\psi$ und demnach $\Psi(g)\psi \in \mathcal{D}(\Psi(f))$ (Man beachte, dass $\mathcal{D}_g \cap \mathcal{D}_{fg} = \mathcal{D}_f$, wenn g beschränkt ist). Ist nun g unbeschränkt, dann gilt für $\psi \in \mathcal{D}_g \cap \mathcal{D}_{fg}$ (und Ω_g^n und g_n definiert wie üblich):

$$\Psi(g_n)\psi \rightarrow \Psi(g)\psi, \quad \Psi(f)\Psi(g_n)\psi = \Psi(fg_n)\psi \rightarrow \Psi(fg)\psi,$$

d.h. auch hier ist $\Psi(g)\psi \in \mathcal{D}(\Psi(f))$ und es folgt die Aussage. \square

Wir können nun, gegeben ein projektionswertiges Maß P , jeder Borel-messbaren Funktion einen Operator auf \mathcal{H} zuordnen. Setzen wir $A = \Psi(\text{id}) = \int_{\mathbb{R}} \lambda dP(\lambda)$, dann ist A selbstadjungiert und wir schreiben statt $\Psi(f)$ auch $f(A)$, motiviert dadurch, dass

$$\Psi\left(\sum_{i=0}^n \alpha_i \lambda^i\right) = \sum_{i=0}^n \alpha_i A^i$$

(wenn man den Definitionsbereich entsprechend anpasst).

Jetzt ist unser Ziel, diesen Prozess umzukehren: Zu gegebenem selbstadjungierten Operator A suchen wir ein eindeutiges projektionswertiges Maß, sodass $A = \int_{\mathbb{R}} \lambda dP(\lambda)$ und $f(A) = \Psi_A(f)$.

Nehmen wir an, es gibt ein eindeutiges Maß P_A , sodass $A = \int_{\mathbb{R}} \lambda dP_A(\lambda)$. Dieses induziert wiederum ein eindeutiges Borel-Maß μ_ψ für jedes $\psi \in \mathcal{H}$, das wir das *Spektralmaß* zu A

nennen. Über die Resolvente $R_A(z) = (A - z)^{-1} = \int_{\mathbb{R}} (\lambda - z)^{-1} dP_A(\lambda)$ definieren wir die Funktion

$$f_\psi(z) = \langle R_A(z)\psi, \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\lambda - z} d\mu_\psi(\lambda), \quad z \in \rho(A), \psi \in \mathcal{H}.$$

Das Integral $\int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\lambda - z} d\mu_\psi(\lambda)$ nennen wir Borel Transformierte des Maßes μ_ψ . Die Funktion f_ψ besitzt zwei besondere Eigenschaften: Sei $z \in \rho(A)$. Aus der ersten Resolventenidentität $R_A(z_2) - R_A(z_1) = (z_2 - z_1)R_A(z_2)R_A(z_1)$ und $R_A(z)^* = R_A(\bar{z})$ folgt

$$\begin{aligned} \Im(f_\psi(z)) &= \frac{1}{2i} (\langle R_A(z)\psi, \psi \rangle - \langle \varphi, R_A(z)\varphi \rangle) = \frac{1}{2i} \langle \psi, (R_A(\bar{z}) - R_A(z))\psi \rangle \\ &= \frac{1}{2i} (z - \bar{z}) \langle \psi, R_A(\bar{z})R_A(z)\psi \rangle \\ &= \Im(z) \|R_A(z)\psi\|^2. \end{aligned}$$

Das bedeutet, f_ψ bildet die obere komplexe Halbebene $\mathbb{C}_+ = \{z \in \mathbb{C} \mid \Im(z) > 0\}$ auf sich selbst ab. Eine kurze Rechnung zeigt $f_\psi(\bar{z}) = \overline{f_\psi(z)}$ und wegen

$$\lim_{\mu \rightarrow z} \frac{f_\psi(z) - f_\psi(\mu)}{z - \mu} = \lim_{\mu \rightarrow z} \left\langle \frac{R_A(z) - R_A(\mu)}{z - \mu} \psi, \psi \right\rangle$$

ist f_ψ holomorph, denn $R_A(\cdot)$ ist holomorph. Funktionen mit diesen Eigenschaften haben einen eigenen Namen.

Definition 3.4.6 (Herglotz-Nevanlinna Funktionen) [Tes09, S. 119]. Wir nennen eine holomorphe Funktion $F: \mathbb{C}_+ \rightarrow \overline{\mathbb{C}_+}$, die die obere komplexe Halbebene in sich selbst abbildet eine *Herglotz-Nevanlinna Funktion*.

Für sie gilt:

Lemma 3.4.7 [Tes09, Satz 3.22]. *Eine Funktion F ist genau dann eine Herglotz-Nevanlinna Funktion, die*

$$|F(iy)| \leq \frac{M}{y} \quad \text{für } y > 0$$

erfüllt, wenn F die Borel Transformierte eines endlichen Maßes μ ist.

Da

$$|f_\psi(z)| = |\langle R_A(z)\psi, \psi \rangle| \leq \|R_A(z)\psi\| \|\psi\| \leq \frac{\|\psi\|^2}{d(z, \sigma(A))} \leq \frac{\|\psi\|^2}{|\Im z|},$$

ist f_ψ die Borel Transformierte eines endlichen Maßes μ und dieses entspricht gerade dem Spektralmaß μ_ψ . Der springende Punkt ist nun, dass μ_ψ eindeutig durch f_ψ bestimmt wird und sich mit Hilfe des Stieltjes-Rekonstruktionssatzes durch

$$\mu_\psi(\lambda) = \lim_{\delta \downarrow 0} \lim_{\varepsilon \downarrow 0} \frac{1}{\psi} \int_{-\infty}^{\lambda + \delta} \Im(f_\psi(t + i\varepsilon)) dt$$

rekonstruieren lässt. Außerdem lässt sich zeigen $\mu_\psi(\mathbb{R}) \leq \|\psi\|^2$. Mit der Polarisationsformel können wir schließlich für $\psi, \varphi \in \mathcal{H}$ das komplexe Maß $\mu_{\psi, \varphi}$ bestimmen, sodass

$$\langle R_A(z)\psi, \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\lambda - z} d\mu_{\psi, \varphi}(\lambda).$$

Wie können wir aus $\mu_{\psi, \varphi}$ das projektionswertige Maß P_A gewinnen? Unser Anhaltspunkt ist die Relation $\mu_{\psi, \varphi}(\Omega) = \langle P(\Omega)\psi, \varphi \rangle$. Wir definieren zunächst die Sesquilinearform

$$s_{\Omega}(\psi, \varphi) = \int_{\mathbb{R}} \chi_{\Omega} d\mu_{\psi, \varphi}(\lambda) = \mu_{\psi, \varphi}(\Omega).$$

Die zugehörige quadratische Form $q_{\Omega}(\psi) = s_{\Omega}(\psi, \psi) = \mu_{\psi}(\Omega)$ ist nichtnegativ, folglich ist nach Lemma 3.1.2

$$|s_{\Omega}(\psi, \varphi)| \leq q(\psi)^{\frac{1}{2}} q(\varphi)^{\frac{1}{2}} = \mu_{\psi}(\Omega)^{\frac{1}{2}} \mu_{\psi}(\Omega)^{\frac{1}{2}} \leq \|\psi\| \|\varphi\|.$$

Das Funktional $\varphi \mapsto s_{\Omega}(\varphi, \psi)$ ist also für jedes $\Omega \subset \mathfrak{B}$ und $\psi \in \mathcal{H}$ beschränkt. Sei $\Omega \subset \mathfrak{B}$ fest aber beliebig gewählt. Nach dem Darstellungssatz von Fréchet-Riesz existiert zu jedem $\psi \in \mathcal{H}$ ein eindeutiges $y_{\psi} \in \mathcal{H}$ mit $s_{\Omega}(\varphi, \psi) = \langle \varphi, y_{\psi} \rangle$. Sei $P(\Omega)$ der Operator, der ψ auf y_{ψ} abbildet, dann ist dieser offensichtlich auf ganz \mathcal{H} definiert und somit beschränkt. Insbesondere gilt $\langle P_A(\Omega)\psi, \varphi \rangle = s_{\Omega}(\psi, \varphi) = \mu_{\psi, \varphi}(\Omega)$, des weiteren ist $P_A(\Omega)$ selbstadjungiert, denn $\langle P_A(\Omega)\psi, \varphi \rangle = s_{\Omega}(\psi, \varphi) = \overline{s_{\Omega}(\varphi, \psi)} = \overline{\langle P_A(\Omega)\varphi, \psi \rangle} = \langle \psi, P_A(\Omega)\varphi \rangle$.

Satz 3.4.8. Die Abbildung $P_A: \mathfrak{B} \rightarrow \mathcal{L}(H)$, $\Omega \mapsto P_A(\Omega)$ ist ein projektionswertiges Maß.

Beweis. Zuerst zeigen wir $P_A(\Omega_1)P_A(\Omega_2) = P_A(\Omega_1 \cap \Omega_2)$. Aus der ersten Resolventenidentität können wir folgern

$$\langle R_A(z_2)R_A(z_1)\psi, \varphi \rangle = \frac{1}{z_2 - z_1} \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\lambda - z_2} - \frac{1}{\lambda - z_1} d\mu_{\psi, \varphi}(\lambda) = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\lambda - z_1} \frac{d\mu_{\psi, \varphi}(\lambda)}{\lambda - z_2}.$$

Zugleich ist

$$\langle R_A(z_2)R_A(z_1)\psi, \varphi \rangle = \langle R_A(z_1)\psi, R_A(\overline{z_2})\varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\lambda - z_1} d\mu_{\psi, R_A(\overline{z_2})\varphi}(\lambda)$$

und damit $d\mu_{\psi, R_A(\overline{z_2})\varphi}(\lambda) = (\lambda - z_2)^{-1} d\mu_{\psi, \varphi}(\lambda)$. Also

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\lambda - z} d\mu_{P_A(\Omega)\psi, \varphi}(\lambda) = \langle R_A(z)P_A(\Omega)\psi, \varphi \rangle = \langle P_A(\Omega)\psi, R_A(\overline{z})\varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \chi_{\Omega} \frac{1}{\lambda - z} d\mu_{\psi, \varphi}(\lambda),$$

was wiederum impliziert $d\mu_{P_A(\Omega)\psi, \varphi}(\lambda) = \chi_{\Omega} d\mu_{\psi, \varphi}(\lambda)$. Ergo

$$\langle P(\Omega_1)P(\Omega_2)\psi, \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \chi_{\Omega_1} \chi_{\Omega_2} d\mu_{\psi, \varphi}(\lambda) = \int_{\mathbb{R}} \chi_{\Omega_1 \cap \Omega_2} d\mu_{\psi, \varphi}(\lambda) = \langle P(\Omega_1 \cap \Omega_2)\psi, \varphi \rangle.$$

Setzen wir $\Omega_1 = \Omega_2$, dann sehen wir, dass $P_A(\Omega_1)$ eine Projektion ist. Selbstadjungiertheit haben wir schon gezeigt, damit sind die $P_A(\Omega)$ orthogonale Projektionen.

Um $P_A(\mathbb{R}) = \mathbb{I}$ zu zeigen, brauchen wir nur nachzuweisen, dass $\ker(P_A(\mathbb{R})) = \{0\}$. Sei $\psi \in \ker(P_A(\mathbb{R}))$, dann wäre wegen $0 = \langle P_A(\mathbb{R})\psi, \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \chi_{\mathbb{R}} d\mu_{\psi, \varphi}(\lambda) = \mu_{\psi, \varphi}(\mathbb{R})$ auch $\langle R_A(z)\psi, \varphi \rangle = 0$ und folglich $\psi = 0$.

Zum Schluss zeigen wir starke σ -Additivität. Sei $\Omega = \bigcup_{j=1}^{\infty} \Omega_j$ mit $\Omega_j \cap \Omega_i = \emptyset$ für $i \neq j$. Aus der σ -Additivität von $\mu_{\psi, \varphi}$ folgt, dass P_A schwach σ -additiv ist, denn

$$\sum_{j=1}^n \langle P_A(\Omega_j)\psi, \varphi \rangle = \sum_{j=1}^n \mu_{\psi, \varphi}(\Omega_j) \rightarrow \langle \mu_{\psi, \varphi}(\Omega) = \langle P(\Omega)\psi, \varphi \rangle, \quad \varphi \in \mathcal{H}.$$

Des weiteren gilt

$$\sum_{j=1}^n \langle P_A(\Omega_j)\psi, \psi \rangle = \sum_{j=1}^n \|P_A(\Omega_j)\psi\|^2 = \left\| \sum_{j=1}^n P_A(\Omega_j)\psi \right\|^2,$$

denn $P_A(\Omega_j)\psi$ und $P_A(\Omega_i)\psi$ sind für $j \neq i$ orthogonal zueinander. Folglich

$$\langle P_{A,n}\psi, \psi \rangle = \|P_{A,n}\psi\|^2 \rightarrow \|P_A(\Omega)\psi\|^2$$

mit $P_{A,n} = \sum_{j=1}^n P_A(\Omega_j)$ und somit $\limsup \|\sum_{j=1}^n P_A(\Omega_j)\psi\| \leq \|P_A(\Omega)\psi\|$. Das impliziert nach Lemma 3.1.3 (ii), dass P_A sogar stark σ -additiv ist. \square

Damit haben wir gezeigt:

Satz 3.4.9 (Spektralsatz für selbstadjungierte Operatoren). *Zu jedem selbstadjungierten Operator A gibt es ein eindeutiges projektionswertiges Maß P_A , sodass*

$$A = \int_{\mathbb{R}} \lambda dP_A(\lambda).$$

Zu Beginn dieses Kapitels hatten wir angedeutet, dass A als Integral über $\sigma(A)$ dargestellt werden kann. Tatsächlich ist $\mathbb{R} \cap \rho(A)$ eine P_A -Nullmenge, wie die nächsten zwei Sätze zeigen werden.

Satz 3.4.10. *Das Spektrum von A entspricht*

$$\sigma(A) = \{\lambda \in \mathbb{R} \mid P_A((\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)) \neq 0, \forall \varepsilon > 0\}.$$

Beweis. Wenn $P_A(\Omega_n) \neq 0$ für $\Omega_n = (\lambda_0 - \frac{1}{n}, \lambda_0 + \frac{1}{n})$, dann ist das Bild von $P_A(\Omega_n)$ ein echter Unterraum von \mathcal{H} und wir können ein $\psi_n \in \text{Ran}(P_A(\Omega_n))$ finden mit $\|\psi_n\| = 1$. Wegen

$$\|(A - \lambda_0)\psi_n\|^2 = \|(A - \lambda_0)P_A(\Omega_n)\psi_n\|^2 = \int_{\mathbb{R}} (\lambda - \lambda_0)^2 \chi_{\Omega_n}(\lambda) d\mu_{\psi_n}(\lambda) \leq \frac{1}{n^2}$$

ist λ_0 approximativer Eigenwert von A , d.h. $\lambda_0 \in \sigma(A)$.

Nehmen wir dagegen an, dass $P_A((\lambda_0 - \varepsilon, \lambda_0 + \varepsilon)) = 0$ für ε klein genug, dann ist $(A - \lambda_0)$ invertierbar. Wir setzen $f_\varepsilon(\lambda) = \chi_{\mathbb{R} \setminus (\lambda_0 - \varepsilon, \lambda_0 + \varepsilon)}(\lambda)(\lambda - \lambda_0)^{-1}$, dann ist

$$(A - \lambda_0)\Psi_A(f_\varepsilon) = \Psi_A((\lambda - \lambda_0)f_\varepsilon(\lambda)) = \Psi_A(\mathbb{R} \setminus (\lambda_0 - \varepsilon, \lambda_0 + \varepsilon)) = \mathbb{I}$$

und ebenso folgt $(\Psi_A(f_\varepsilon)(A - \lambda_0)) = \mathbb{I}$. Folglich $\lambda_0 \in \rho(A)$. \square

Als direkte Konsequenz erhalten wir wie versprochen

Satz 3.4.11. *Es gilt $P_A(\mathbb{R} \cap \rho(A)) = 0$.*

Beweis. Ist $\lambda \in \mathbb{R} \cap \rho(A)$, dann gibt es ein offenes Intervall I_λ , sodass $P_A(I_\lambda) = 0$. All diese Intervalle zusammengenommen bilden eine offene Überdeckung von $\mathbb{R} \cap \rho(A)$, aus der wir eine abzählbare Teilüberdeckung $(J_n)_{n \in \mathbb{N}}$ wählen können. Um eine Überdeckung disjunkter Mengen zu erhalten, setzen wir $\Omega_n = J_n \setminus (\cup_{m < n} J_m)$. Nun gilt $\mathbb{R} \cap \rho(A) = \cup_n \Omega_n$, sowie $P_A(\Omega_n) = 0$ für alle $n \in \mathbb{N}$ und es folgt mir der starken σ -Additivität, dass $P_A(\mathbb{R} \cap \rho(A))\psi = 0$ für alle $\psi \in \mathcal{H}$. \square

Damit folgt sofort, dass $P_A(\sigma(A)) = \mathbb{I}$, sowie $\Psi_A(f) = P(\sigma(A))\Psi_A(f) = \Psi(\chi_{\sigma(A)}f)$, d.h.

$$A = \int_{\sigma(A)} \lambda dP_A(\lambda).$$

Zuletzt möchten wir das Spektralmaß μ_ψ für den Fall, dass ψ Eigenvektor von A zum Eigenwert λ_0 ist, explizit berechnen. Wir haben dann

$$0 = \|(A - \lambda_0)\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |\lambda - \lambda_0|^2 d\mu_\psi(\lambda).$$

Da $|\lambda - \lambda_0|^2 > 0$ auf ganz $\mathbb{R} \setminus \{\lambda_0\}$, muss $\mu_\psi(\mathbb{R} \setminus \{\lambda_0\}) = 0$ gelten. Wegen

$$|\lambda_0|^2 \|\psi\|^2 = \|A\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} \|\lambda\|^2 d\mu_\psi(\lambda) = |\lambda_0|^2 \mu_\psi(\{\lambda_0\}),$$

folgt $\mu_\psi(\Omega) = \|\psi\|^2 \chi_{\lambda_0}(\Omega)$.

Im übrigen gilt $\text{Ran}(P_A(\{\lambda_0\})) = \text{Ker}(A - \lambda_0)$. Denn wenn $\psi \in \text{Ran}(P_A(\{\lambda_0\}))$, dann gilt $\psi = P_A(\{\lambda_0\})\psi$ und somit

$$\|(A - \lambda_0)\psi\|^2 = \|(A - \lambda_0)P_A(\{\lambda_0\})\psi\|^2 = 0.$$

Ist nun $\psi \in \text{Ker}(A - \lambda_0)$, dann ist wegen $\mu_\psi(\Omega) = \|\psi\|^2 \chi_{\lambda_0}(\Omega)$

$$\langle P_A(\{\lambda_0\})\psi, \psi \rangle = \langle \psi, \psi \rangle,$$

folglich $\psi = P_A(\{\lambda_0\})\psi$.

3.4.1 Zerlegung der Spektralmaße

Wir wissen, dass sich das Spektrum eines selbstadjungierten Operators A in ein kontinuierliches Spektrum und ein Punktspektrum aufteilt. Wir können das Spektrum von A aber auch mit Hilfe des Spektral-Maßes μ_ψ charakterisieren. Dazu folgende Definition.

Definition 3.4.12 [Tes09, S. 331]. Seien μ und ν zwei Maße auf dem Maßraum (X, Σ) . Wir nennen μ *singulär* bezüglich ν , in Zeichen $\mu \perp \nu$, wenn es eine messbare Menge M gibt, sodass $\mu(M) = 0$ und $\nu(\mathbb{R} \setminus M) = 0$. Dagegen nennen wir μ *absolut stetig* bezüglich ν , in Zeichen $\mu \ll \nu$, wenn $\nu(M) = 0$ impliziert, dass $\mu(M) = 0$.

Wir werden ohne Beweis den nachfolgenden Satz verwenden.

Satz 3.4.13 (Zerlegungssatz von Lebesgue) [Tes09, Satz A.39]. Seien μ und ν zwei σ -endliche Maße auf dem Maßraum (X, Σ) . Dann gibt es eine eindeutige Zerlegung $\mu = \mu_{ac} + \mu_s$ von μ in das Maß μ_{ac} , das absolut stetig bzgl. ν ist und das Maß μ_s , das singulär bzgl. ν ist.

Ist ν das Lebesgue-Maß, dann können wir μ_s noch weiter aufteilen in ein singulär stetiges Maß μ_{sc} und ein reines Punktmaß μ_{pp} [Tes09, S. 115]. Jedes Punktmaß ist von der Form $\mu_{pp} = \sum_i b_i \delta_{a_i}$ für eine höchstens abzählbare Folge von reellen Punkten a_1, a_2, \dots (und offensichtlich singulär bzgl. des Lebesgue-Maßes). μ_{sc} ist dann ein Maß, welches auf überabzählbaren Lebesgue-Nullmengen lebt (man denke z.B. an die Cantor-Menge).

Da wir jedem $\psi \in \mathcal{H}$ ein Spektralmaß zuordnen können, lässt sich auch der Hilbertraum \mathcal{H} in drei Teilräume zerlegen. Wir definieren

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{ac} &:= \{\psi \in \mathcal{H} \mid \mu_\psi \text{ ist absolutstetig bzgl. des Lebesgue-Maßes}\}, \\ \mathcal{H}_{sc} &:= \{\psi \in \mathcal{H} \mid \mu_\psi \text{ ist singulärstetig bzgl. des Lebesgue-Maßes}\}, \\ \mathcal{H}_{pp} &:= \{\psi \in \mathcal{H} \mid \mu_\psi \text{ ist ein reines Punktmaß}\}.\end{aligned}$$

Tatsächlich gilt $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ac} \oplus \mathcal{H}_{sc} \oplus \mathcal{H}_{pp}$ [Tes09, Satz 3.17], d.h. jedes Element $\varphi \in \mathcal{H}$ kann dargestellt werden als Summe $\varphi = \varphi_{ac} + \varphi_{sc} + \varphi_{pp}$ mit $\varphi_{xx} \in \mathcal{H}_{xx}$ für $xx \in \{ac, sc, pp\}$. Ist $\varphi = \sum_i \alpha_i \psi_i$ Linearkombination von Eigenvektoren ψ_i von A mit zugehörigen Eigenwerten λ_i , dann ist wegen $\mu_{\psi_i} = \|\psi_i\|^2 \delta_{\lambda_i}$ und der paarweisen Orthogonalität der ψ_i

$$\mu_\varphi = \sum_i |\alpha_i|^2 \|\psi_i\|^2 \delta_{\lambda_i}.$$

D.h. $\varphi \in \mathcal{H}_{pp}$. Andersrum lässt sich schnell einsehen, dass wenn μ_φ reines Punktmaß ist, φ Linearkombination von Eigenvektoren von A ist. Trotzdem gilt im Allgemeinen lediglich $\sigma(A|_{\mathcal{H}_{pp}}) = \overline{\sigma_p(A)}$ [Tes09, S. 115].

4. Einführung in die Quantenmechanik

Das Folgende ist eine Zusammenfassung von [Tes09, Abschnitt 2.1].

In der klassischen Mechanik können wir zu jedem Zeitpunkt den Aufenthaltsort x und Impuls p eines makroskopischen Teilchens bestimmen, wenn wir die Anfangswerte x_0, p_0 und die Kräfte kennen, die auf dieses Teilchen wirken. Die möglichen Zustände eines Systems werden durch Vektoren $(x, p) \in \mathbb{R}^{2n}$ beschrieben, und durch Lösen der Newton'schen Bewegungsgleichung erhalten wir eine (numerisch approximierte) Kurve $\{(x^t, p^t)\}_{t \in \mathbb{R}_+}$ in \mathbb{R}^{2n} , die die zeitliche Entwicklung des Systems beschreibt [vD21, Abschnitt 2.6]. Betrachten wir Systeme, deren Größenordnung der von Atomen oder kleineren Partikeln entspricht, dann können wir nur noch Wahrscheinlichkeiten angeben, wie eine Messung ausfallen wird. Die möglichen Zustände in quantenmechanischen Systemen sind folglich Funktionen $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R}^n)$, sodass $|\psi(x)|^2$ eine Wahrscheinlichkeitsdichte auf \mathbb{R}^n ist. Allgemeiner formuliert (1. Axiom der Quantenmechanik): Der Phasenraum ist ein komplexer Hilbertraum \mathcal{H} , und die möglichen Zustände sind alle Elemente $\psi \in \mathcal{H}$ mit $\|\psi\| = 1$.

In der Quantenmechanik werden messbare Größen a als Observablen bezeichnet und ihnen wird ein linearer Operator A auf \mathcal{H} zugeordnet. Dabei ist „observabel“ nur, ob ein bestimmtes Ereignis eintritt oder nicht, wir können nicht feststellen, welches der möglichen Ereignisse gerade eintritt. Z.B. können wir messen, ob ein Partikel in \mathbb{R}^3 sich gerade in dem Gebiet Ω aufhält oder nicht. Kennen wir den momentanen Zustand ψ , dann können wir den Erwartungswert für den Ausgang der Messung bestimmen durch

$$\mathbb{E}_\psi(\chi_\Omega) = \int_{\Omega} |\psi(x)|^2 d^3x.$$

Wir sehen, dass χ_Ω der zu unserer Messung zugehörige Operator ist. Im Allgemeinen können wir den Erwartungswert einer jeden Observablen a , wenn sich das System im Zustand ψ befindet, bestimmen via

$$\mathbb{E}_\psi(A) = q_A(\psi) = \langle A\psi, \psi \rangle.$$

Das wird u. a. im dritten Axiom der Quantenmechanik postuliert, zusammen mit der Forderung, dass $\langle A\psi, \psi \rangle$ immer reell sein muss (denn Messwerte dürfen nicht komplex sein). Der Operator A muss nicht beschränkt sein, was die Wahl von ψ einschränkt. Damit die Einschränkung so gering wie möglich ist, fordern wir, dass der Operator A einer jeden Observable a maximal definiert ist und sein Definitionsbereich dicht in \mathcal{H} liegt. Man kann zeigen, dass ein jeder solcher Operator A selbstadjungiert ist. D.h., Observablen korrespondieren zu selbstadjungierten Operatoren.

4.1 Der Hamiltonoperator

Sei Ω eine offene, beschränkte Menge mit Lipschitz-Rand und $M = \overline{\Omega}$. Der Hamiltonoperator ist von der Form

$$H := \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V, \quad \mathcal{D}(H) = C_0^\infty(\Omega) \subset L^2(\Omega),$$

mit $\Delta = \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ dem Laplace-Operator und $V: \mathbb{R}^n \supset M \rightarrow \mathbb{K}$ einem Potential, das als Multiplikationsoperator fungiert. Weiter bezeichnet $m > 0$ eine Masse und \hbar das Planck'sche Wirkungsquantum. Der Einfachheit halber setzen wir im Folgenden immer $\hbar = 1$ und $m = \frac{1}{2}$.

Der Hamiltonoperator ist der Observablen zugehörig, die die Energie eines Zustands misst, daher müssen wir sicherstellen, dass H oder eine seiner Erweiterungen selbstadjungiert ist. Es wird unser erstes Objektiv sein, zwei selbstadjungierte Erweiterungen von H zu bestimmen, die uns dann durch die nächsten Kapitel begleiten werden.

Abhängig von der Wahl von V gestalten sich unsere Überlegungen und Resultate sehr verschieden; wir möchten es uns einfach machen und verlangen, dass V reell, nichtnegativ und f. ü. beschränkt ist. Auch alle anderen Funktionen seien im Folgenden reell. Wir beginnen damit, die Symmetrie von H auf $C_0^\infty(\Omega)$ nachzuweisen.

Anmerkung 4.1.1. Um die Lesbarkeit zu erhöhen, schreiben wir $|x|$ statt $\|x\|_{\mathbb{R}^n}$ und $x \cdot y$ statt $\langle x, y \rangle_{\mathbb{R}^n}$ für $x, y \in \mathbb{R}^n$.

Nach dem Satz von Gauß-Green gilt für $\psi, \varphi \in C_0^\infty(\Omega)$

$$\begin{aligned} \langle H\psi, \varphi \rangle &= \int_{\Omega} (-\Delta\psi)\varphi + V\psi\varphi \, dx \\ &= \int_{\Omega} \nabla\psi \cdot \nabla\varphi \, dx - \int_{\partial\Omega} \psi(\nabla\varphi \cdot \nu) \, d\sigma + \int_{\Omega} V\psi\varphi \, dx \\ &= \int_{\Omega} \nabla\psi \cdot \nabla\varphi + V\psi\varphi \, dx, \end{aligned} \tag{4.1}$$

wobei $\nabla\varphi \cdot \nu$ die Ableitung von φ in Richtung der Normalen ν von $\partial\Omega$ bezeichnet [MK22, Satz B.7.]. Das Integral über $\partial\Omega$ entfällt, da Funktionen aus $C_0^\infty(\Omega)$ auf $\partial\Omega$ immer verschwinden. Eine ähnliche Kalkulation zeigt

$$\langle \psi, H\varphi \rangle = \int_M \nabla\psi \cdot \nabla\varphi + V\psi\varphi \, dx, \quad \psi, \varphi \in C_0^\infty(\Omega), \tag{4.2}$$

demnach ist H auf $C_0^\infty(\Omega)$ symmetrisch. H ist aber nicht selbstadjungiert, denn (4.1) und (4.2) sind ebenso gültig, wenn $\psi \in C_0^\infty(\Omega)$ und $\varphi \in H^2(\Omega)$, d.h. $H^2(\Omega) \subset \mathcal{D}(H^*)$. Mit etwas mehr Aufwand lässt sich zeigen, dass $\mathcal{D}(H^*) = H^2(\Omega)$ [Tes09, §7.1-§7.3]. Da

$$\langle H\psi, \psi \rangle = \int_{\Omega} |\nabla\psi|^2 + V\psi^2 \, dx \geq 0, \quad \forall \psi \in C_0^\infty(\Omega),$$

ist H ein nichtnegativer Operator (siehe Definition 3.1.4) und besitzt glücklicherweise selbstadjungierte Erweiterungen [RSS7a, S.137/141]. Unter diesen gibt es eine Besondere, die sogenannte *Friedrichs Erweiterung*. Sei

$$q(\psi, \varphi) = \langle H\psi, \varphi \rangle = \int_{\Omega} \nabla\psi \cdot \nabla\varphi + V\psi\varphi \, dx, \quad \psi, \varphi \in C_0^\infty(\Omega)$$

die quadratische Form von H und \tilde{q} ihr Abschluss. Dann ist die Friedrichs Erweiterung \tilde{H} die eindeutige selbstadjungierte Erweiterung, deren quadratische Form \tilde{q} entspricht. Wir können den Definitionsbereich $\mathfrak{D}(H)$ von \tilde{q} , den wir auch *Formdefinitionsbereich* von H nennen, explizit angeben (was die Abschließbarkeit von q beweist). Er entspricht der

Vervollständigung von $\mathcal{D}(H) = C_0^\infty(\Omega)$ bzgl. des Skalarprodukts $\langle \cdot, \cdot \rangle_H := \langle \cdot, \cdot \rangle + q(\cdot, \cdot)$, und ist, wie sich zeigen lässt, eine Teilmenge von \mathcal{H} [RS87a, Satz X.23]. Man beachte, dass $\langle \cdot, \cdot \rangle_H$ nur dann ein Skalarprodukt ist, wenn q die quadratische Form eines nichtnegativen, symmetrischen Operators ist.

Folgender Satz liefert uns den Definitionsbereich von \tilde{H} .

Satz 4.1.2 (Friedrichs Erweiterung, für $\gamma = 0$) [Tes09, Satz 2.13]. *Sei H ein symmetrischer, nichtnegativer Operator. Dann gibt es eine selbstadjungierte Erweiterung*

$$\tilde{H}\psi = H^*\psi, \quad \mathcal{D}(\tilde{H}) = \mathcal{D}(H^*) \cap \mathfrak{Q}(H),$$

die ebenfalls nichtnegativ ist. Außerdem ist \tilde{H} die einzige selbstadjungierte Erweiterung mit $\mathcal{D}(\tilde{H}) \subset \mathfrak{Q}(H)$.

Um $\mathcal{D}(\tilde{H})$ zu bestimmen, müssen wir demnach $\mathfrak{Q}(H)$ berechnen. Das ist schnell getan, denn wegen

$$\|\psi\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \int_{\Omega} |\nabla\psi|^2 + (V+1)\psi^2 dx \leq (\|V\|_\infty + 1)\|\psi\|_{H^1(\Omega)}$$

sind die Normen $\|\cdot\|_H$ und $\|\cdot\|_{H^1(M)}$ äquivalent auf $L^2(\Omega)$ und folglich $\mathfrak{Q}(H) = H_0^1(\Omega)$. Also $\mathcal{D}(\tilde{H}) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$.

Wenn $V = 0$, dann schreiben wir $\tilde{H} = -\Delta_D$ und nennen $-\Delta_D$ den Dirichlet Laplace Operator. Der Name kommt daher, dass $-\Delta_D$ der Abschluss des Operators $-\Delta$ mit

$$\mathcal{D}(-\Delta) = \{f \in C^\infty(M) \mid f|_{\partial\Omega} = 0\}$$

ist (vorausgesetzt $\partial\Omega$ ist regulär genug) und das sind gerade alle Funktionen in $C^\infty(M)$, die einer Dirichlet-Randbedingung genügen. Wenn $V \neq 0$, schreiben wir $\tilde{H} = -\Delta_D + V$.

Die Erweiterung $-\Delta_D + V$ ist nicht die einzige selbstadjungierte Erweiterung von H , wohl ist sie aber die einzige Erweiterung, dessen quadratische Form auf $H_0^1(\Omega)$ definiert ist. In diesem Sinne möchten wir noch eine weitere selbstadjungierte Erweiterung von H einführen: Es sei $H_N = -\Delta_N + V$ der eindeutige, selbstadjungierte Operator auf $L^2(\Omega)$ mit der quadratischen Form

$$q_N(\psi, \varphi) = \int_{\Omega} \nabla\psi \cdot \nabla\varphi + V\psi\varphi dx,$$

definiert auf $H^1(\Omega)$. Diese Definition verlangt zweierlei von $\mathcal{D}(H_N)$. Einmal muss für alle $\psi \in \mathcal{D}(H_N)$ gelten

$$\int_{\partial\Omega} \psi(\nabla\psi \cdot \nu) d\sigma = 0.$$

Zugleich muss der Abschluss von $\mathcal{D}(H_N)$ bzgl. der H^1 Norm dem Raum $H^1(\Omega)$ entsprechen. In diesem Fall ist $-\Delta_N$ der Abschluss des Operators $-\Delta$ auf

$$\mathcal{D}(-\Delta) = \{f \in C^\infty(M) \mid \nabla f \cdot \nu = 0 \text{ auf } \partial\Omega\}.$$

Auch hier muss der Rand $\partial\Omega$ hinreichend regulär sein. Wenn wir keine Forderung an den Rand stellen, dann wird es schwierig, überhaupt eine Neumann-Randbedingung zu formulieren (oder den Satz von Gauß-Green anzuwenden). Das ist der Grund, warum

$-\Delta_N + V$ über die quadratische Form definiert wird, das sichert uns Unabhängigkeit von $\partial\Omega$ [Für Neumann und Dirichlet Laplace Operator siehe [RS87b](#), S. 263f].

Den Definitionsbereich von H_N werden wir diesmal nicht explizit berechnen, er spielt für uns auch gar keine Rolle, denn alle wichtigen Eigenschaften lassen sich aus dem Formdefinitionsbereich ableiten. Das gleiche gilt im übrigen auch für H_D .

4.1.1 Positivität des kleinsten Eigenwerts

Es sei $H = -\Delta_N + V$. Wir möchten nachweisen, dass der kleinste Eigenwert von H echt größer Null ist, wenn V nicht das Nullpotential ist. Dafür zeigen wir zunächst, dass das Spektrum von H diskret ist. Dabei hilft uns das *Min-Max Prinzip*, das Eigenwerte unterhalb des essentiellen Spektrums charakterisiert. Unsere ersten Überlegungen gelten für alle nichtnegativen und beschränkten Potentiale V ; die Forderung, dass $V \neq 0$ f. ü., wird erst zum Schluss von Bedeutung sein.

Satz 4.1.3 (Min-Max Prinzip) [[RS87b](#), Satz XIII.1]. *Sei A selbstadjungiert und von unten beschränkt. Wir setzen*

$$E_n(A) = \sup_{\psi_1, \dots, \psi_{n-1}} \inf_{\psi \in U(\psi_1, \dots, \psi_{n-1})} \langle A\psi, \psi \rangle,$$

wobei $\psi_1, \dots, \psi_{n-1} \in L^2(\Omega)$ und

$$U(\psi_1, \dots, \psi_m) = \{\psi \in \mathcal{D}(A) \mid \|\psi\| = 1, \psi \in \text{Span}\{\psi_1, \dots, \psi_m\}^\perp\}.$$

Für festes n gilt entweder:

1. Es gibt n Eigenwerte (entsprechend ihrer Vielfachheit gezählt) unter dem essentiellen Spektrum und $E_n(A)$ ist der n te Eigenwert (Vielfachheit mitgezählt) oder
2. $E_n(A)$ ist die kleinste obere Schranke des essentiellen Spektrums, d.h. $E_n(A) = \inf\{\lambda \mid \lambda \in \sigma_{ess}(A)\}$. In diesem Fall gilt $E_n = E_{n+1} = E_{n+2} = \dots$ und es gibt maximal $n - 1$ Eigenwerte (entsprechend ihrer Vielfachheit gezählt) unter dem essentiellen Spektrum.

Das Min-Max Prinzip behält seine Gültigkeit, wenn wir den Definitionsbereich $\mathcal{D}(A)$ durch den Formdefinitionsbereich $\mathfrak{Q}(A)$ und entsprechend den Ausdruck $\langle A\psi, \psi \rangle$ durch die quadratische Form von A ersetzen [[RS87b](#), Satz XIII.2]. Das bedeutet für H im speziellen

$$E_n(H) = \sup_{\psi_1, \dots, \psi_{n-1}} \inf_{\substack{\psi \in \mathfrak{Q}(H): \|\psi\|=1, \\ \psi \in \text{Span}\{\psi_1, \dots, \psi_{n-1}\}^\perp}} \int_{\Omega} |\nabla\psi|^2 + V\psi^2 dx.$$

Wir verwenden das Sandwich Lemma, um nachzuweisen, dass $E_n(H) \rightarrow \infty$. Wir machen uns dafür zunutze, dass das Spektrum des Neumann Laplace Operators $-\Delta_N$ auf dem Hyperwürfel $(-a, a)^n \subset \mathbb{R}^n$ für $a \in \mathbb{R}$ explizit berechenbar ist; es besteht in diesem Fall aus einer Folge von Eigenwerten, die gegen $+\infty$ konvergiert [[RS87b](#), S. 266]. Wählen wir $x, y \in \mathbb{R}^n$ so, dass $X := (-x, x)^n \subset M \subset (-y, y)^n =: Y$ und setzen

$$V_\Lambda(\psi_1, \dots, \psi_m) = \{\psi \in H^1(\Lambda) \mid \|\psi\| = 1, \psi \in \text{Span}\{\psi_1, \dots, \psi_m\}^\perp\},$$

dann gilt

$$\begin{aligned}
E_n^\Omega(H) &= \sup_{\psi_1, \dots, \psi_{n-1}} \inf_{\psi \in V_\Omega(\psi_1, \dots, \psi_{n-1})} \int_\Omega |\nabla \psi|^2 + V \psi^2 dx \\
&\geq \sup_{\psi_1, \dots, \psi_{n-1}} \inf_{\psi \in V_Y(\psi_1, \dots, \psi_{n-1})} \int_\Omega |\nabla \psi|^2 dx \\
&= E_n^Y(-\Delta_N).
\end{aligned}$$

Zugleich

$$\begin{aligned}
E_n^\Omega(H) &\leq \sup_{\psi_1, \dots, \psi_{n-1}} \inf_{\psi \in V_X(\psi_1, \dots, \psi_{n-1})} \int_\Omega |\nabla \psi|^2 + \|V\|_\infty \psi^2 dx \\
&= E_n^X(-\Delta_N + \|V\|_\infty).
\end{aligned}$$

Wegen

$$\sigma(-\Delta_N + \|V\|_\infty) = \{\mu + \|V\|_\infty \mid \mu \in \sigma(-\Delta_N)\}$$

konvergieren beide $E_n^Y(-\Delta_N)$ und $E_n^X(-\Delta_N + \|V\|_\infty)$ (uneigentlich) gegen $+\infty$ für $n \rightarrow \infty$. Folglich $E_n^\Omega(H) \rightarrow \infty$ und das Spektrum von H besteht aus abzählbar vielen Eigenwerten $\mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots$. Nach [RS87b, Satz XIII.64] bilden die zugehörigen Eigenvektoren dann eine Orthonormalbasis von $L^2(\Omega)$.

Es lassen sich also alle Eigenwerte von H (entsprechend ihrer Vielfachheit gezählt) mit Hilfe des Min-Max Prinzips charakterisieren, insbesondere gilt für den kleinsten Eigenwert

$$E_1(H) = \inf \sigma(H) = \inf_{\psi \in H^1(\Omega), \|\psi\|=1} \int_\Omega |\nabla \psi|^2 + V \psi^2 dx. \quad (4.3)$$

Es gibt eine besondere Eigenschaft des Eigenraums $\mathfrak{E}_1(H)$ von $E_1(H)$, die wir ohne Beweis verwenden werden: Es gibt einen positiven Vektor φ , sodass $H\varphi = E_1(H)\varphi$ und $\mathfrak{E}_1(H) = \{t\varphi \mid t \in \mathbb{R}\}$. D.h. $E_1(H)$ ist ein einfacher Eigenwert und der zugehörige normierte und positive Eigenvektor ist eindeutig [RS87b, Satz XIII.49; Problem 99]. Diese Eigenschaft, zusammen mit Identität (4.3), erlaubt eine explizite Berechnung von $E_1(-\Delta_N)$ und $\mathfrak{E}_1(-\Delta_N)$. Es gilt $\int_\Omega |\nabla \psi|^2 dx \geq 0$ für alle $\psi \in H^1(\Omega)$ und $\int_\Omega |\nabla \psi|^2 dx = 0$, wenn ψ eine f. ü. konstante Funktion ist. Daher $E_1(-\Delta_N) = 0$. Da der zugehörige Eigenraum eindimensional ist, können in ihm einzig f. ü. konstante Funktionen liegen. Für die positive, normierte Funktion φ , die in diesem Eigenraum liegt, muss gelten

$$\int_M |\varphi|^2 dx = \varphi^2 \mu(M) = 1,$$

d.h. $\varphi^2 = \frac{1}{\mu(M)}$. Somit $\mathfrak{E}_1(-\Delta_N) = \{t/\sqrt{\mu(M)} \mid t \in \mathbb{R}\}$.

Um nun zu zeigen, dass $E_1(H) = \inf \sigma(H) > 0$, wenn $V \neq 0$, betrachten wir die Abbildung

$$[0, 1] \ni t \rightarrow \inf \sigma(-\Delta_N + tV). \quad (4.4)$$

All unsere vorherigen Aussagen treffen offensichtlich auch auf den Operator $H_t = -\Delta_N + tV, t \in [0, 1]$, zu. Folglich entspricht $\inf \sigma(H_t)$ dem kleinsten Eigenwert $E_1(H_t)$ von H_t . Die Abbildung (4.4) ist Lipschitzstetig, denn

$$\begin{aligned}
&|\inf \sigma(-\Delta_n + t_2V) - \inf \sigma(-\Delta_n + t_1V)| \\
&\leq \left| \inf_{\psi \in H^1(\Omega): \|\psi\|=1} \int_\Omega |\nabla \psi|^2 + t_2V \psi^2 - (|\nabla \psi|^2 + t_1V \psi^2) dx \right| \\
&\leq \|V\|_\infty |t_2 - t_1|.
\end{aligned}$$

Nach dem Satz von Rademacher ist sie damit f. ü. differenzierbar. Sie ist dazu monoton wachsend, wie sich mit (4.3) schnell einsehen lässt und da $\inf \sigma(H_0) = 0$, reicht es nachzuweisen, dass die Ableitung von (4.4) für ein $t \in [0, 1]$ strikt positiv ist. Dazu verwenden wir den Satz von Feynman [Fey39], der eigentlich physikalischer Natur ist und in etwa Folgendes besagt: Es sei λ ein Parameter, der den Zustand eines (quantenmechanischen) Systems beeinflusst und es bezeichne $\psi(\lambda)$ den Zustand zu gegebenem λ . Entsprechend bezeichne H_λ den Hamiltonoperator und $E(\lambda)$ das Energieniveau des Systems in Abhängigkeit von λ . Wenn nun, egal welches λ wir wählen, $\psi(\lambda)$ immer Eigenfunktion von H_λ zum Eigenwert $E(\lambda)$ ist (d.h. die Energie des Systems ändert sich zwar mit λ , nicht jedoch mit der Zeit), so gilt die Beziehung

$$\frac{dE(\lambda)}{d\lambda} = \int \overline{\psi(\lambda)} \frac{dH_\lambda}{d\lambda} \psi(\lambda) dx.$$

Sei nun $\psi(t)$ der (eindeutige) normierte und positive Eigenvektor zum Eigenwert $\inf \sigma(H_t)$ - $\psi(t)$ ist also ein Zustand - dann haben wir genau diesen Fall vorliegen, denn $H_t \psi(t) = \inf \sigma(H_t) \psi(t)$ für alle $t \in [0, 1]$. Daher

$$\frac{d \inf \sigma(H_t)}{dt} = \int_{\Omega} \overline{\psi(t)} \frac{dH_t}{dt} \psi(t) dx.$$

Nun ist

$$\frac{dH_t}{dt} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(-\Delta_n + (t + \varepsilon)V) - (-\Delta_n + tV)}{\varepsilon} = V$$

und wir können schließen, dass im Punkt $t = 0$

$$\begin{aligned} \left. \frac{d \inf \sigma(H_t)}{dt} \right|_{t=0} &= \int_{\Omega} \overline{\varphi(0)} V \varphi(0) dx \\ &= \frac{1}{\mu(M)} \int_{\Omega} V dx. \end{aligned}$$

Ist V nicht das Nullpotential, dann gibt es eine Menge positiven Maßes auf der $V > 0$, folglich $\int_{\Omega} V dx > 0$ und damit ist in $t = 0$ die Ableitung von (4.4) strikt positiv.

Die Positivität des kleinsten Eigenwertes lässt sich auch für $H = -\Delta_D + V$ herleiten. Da in diesem Fall der kleinste Eigenwert von $H_0 = -\Delta_D$ schon echt größer Null ist, reicht es nachzuweisen, dass $E_1(H) \geq E_1(H_0)$, was sofort mit (4.3) folgt.

4.1.2 Existenz und Eindeutigkeit von schwachen Lösungen

Dieser Abschnitt orientiert sich an [Eva10, 6.1.2.& 6.2.1.].

Wir betrachten die partielle Differentialgleichung

$$\begin{aligned} H\psi &= f & \text{auf } \Omega, & & f \in C(\Omega), V \neq 0 \text{ f. ü.} \\ \psi &= 0 & \text{auf } \partial\Omega. & & \end{aligned} \tag{4.5}$$

Wir haben in den letzten beiden Abschnitten viel mit dem Hamiltonoperator auf Sobolev-Räumen hantiert, was erlaubt war, weil wir mit seiner quadratischen Form gerechnet haben. Wenn wir den Hamiltonoperator aber direkt auf eine Funktion anwenden wollen, so muss diese mindestens in $C^2(\Omega)$ liegen, sonst können wir ihre partiellen Ableitungen nicht bestimmen. Egal, wie wir den Operator also definieren, klassische Lösungen von

(4.5) müssen immer in $C_0^2(\Omega)$ liegen. Um uns von dieser Einschränkung zu befreien, führen wir einen verallgemeinerten Lösungsbegriff ein, den der *schwachen Lösungen*. Die Idee besteht darin, nicht mehr Gleichheit von Funktionen, sondern von Funktionalen zu fordern. Ist $f \in L^2(\Omega)$ und $\psi \in C_0^\infty(\Omega)$, dann sind $\langle H\psi, \cdot \rangle$ und $\langle f, \cdot \rangle$ zwei beschränkte Funktionale auf $L^2(\Omega)$ und sie sind äquivalent, wenn auf einem dichten Teilraum $D \subset L^2(\Omega)$ gilt

$$\langle H\psi, \xi \rangle = \langle f, \xi \rangle, \quad \forall \xi \in D. \quad (4.6)$$

Die Funktionen in D nennen wir *Testfunktionen*. Wählen wir $D = C_0^\infty(\Omega)$, dann wissen wir bereits

$$\langle H\psi, \xi \rangle = \int_M \nabla\psi \cdot \nabla\xi + V\psi\xi \, dx, \quad \forall \xi \in D.$$

Dieser Ausdruck ist auf ganz $\psi \in H^1(\Omega)$ definiert. Wenn wir also Gleichheit von $H\psi$ und f im Sinne von (4.6) fordern, dann sind alle Funktionen aus $H_0^1(\Omega)$ (hier wurde die Dirichlet-Randbedingung beachtet) mögliche Lösungen von (4.5); eine erhebliche Verbesserung zu vorher.

Definition 4.1.4 (schwache Lösung). Wir nennen $\psi \in H_0^1(M)$ schwache Lösung von (4.5), wenn $f \in L^2(M)$ und

$$\int_M \nabla\psi \cdot \nabla\xi + V\psi\xi \, dx = \int_M f\xi \, dx, \quad \forall \xi \in C_0^\infty(M). \quad (4.7)$$

Wie letztendlich die schwache Lösung definiert wird, hängt von der gegebenen Differenzialgleichung und dem zugrunde liegenden Raum ab. Würden wir z.B. $L^2(\Omega)$ durch $L^2(\mathbb{R}^n)$ ersetzen, so bräuchten wir keine Randbedingung mehr und würden alle $\psi \in H^1(\mathbb{R}^n)$, die (4.7) erfüllen, schwache Lösungen nennen.

Wir wenden uns der Eindeutigkeit schwacher Lösungen zu. Die quadratische Form $q(f, g) = \int_\Omega \nabla f \cdot \nabla g + Vfg \, dx$ ist ein Skalarprodukt auf $H_0^1(\Omega)$. Da zum einen

$$q(f, g) \leq \max(1, \|V\|_\infty) \langle f, g \rangle_{H^1(\Omega)} \leq \max(1, \|V\|_\infty) \|f\|_{H^1(\Omega)} \|g\|_{H^1(\Omega)}, \quad f, g \in H_0^1(\Omega),$$

und zum anderen $\inf \sigma(H) > 0$, d.h. (siehe (4.3)) es gibt ein $\beta > 0$, sodass

$$q(f, f) \geq \beta \|f\|_{H^1(\Omega)}, \quad \forall f \in H_0^1(\Omega),$$

ist die Norm $\|\cdot\|_q$ induziert durch q äquivalent zu $\|\cdot\|_{H^1(\Omega)}$. Demnach ist $(H_0^1(\Omega), \|\cdot\|_q)$ ein Hilbertraum und nach dem Darstellungssatz von Fréchet-Riesz existiert zu jedem $f \in L^2(\Omega)$ ein eindeutiges $\eta \in L^2(\Omega)$, sodass

$$\langle f, \xi \rangle = q(\eta, \xi), \quad \forall \xi \in H_0^1(\Omega).$$

Damit gilt die Aussage erst recht für alle $\xi \in C_0^\infty(\Omega)$ und wir haben die Eindeutigkeit der schwachen Lösungen von (4.5) gezeigt.

Im letzten Abschnitt haben wir gesehen, dass die Eigenvektoren von $H_D = -\Delta_D + V$ (bzw. $H_N = -\Delta_N + V$) eine Orthonormalbasis von $L^2(\Omega)$ bilden. Da der Definitionsbereich von H_D (bzw. H_N) auch Funktionen enthält, die nicht differenzierbar (im klassischen Sinne) sind, ist die Gleichung $H_D\psi = E\psi$ (bzw. $H_N\psi = E\psi$) im schwachen Sinne zu verstehen.

4.2 Zeitentwicklung

Die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Teilchens wird beschrieben durch die Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(t,x) + V(x)\psi(t,x) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t,x), \quad (4.8)$$

wobei $\psi(t,x) \in \mathcal{H}$ den Zustand des Systems zum Zeitpunkt $t \in \mathbb{R}_+$ bezeichnet [Son20, S. 23]. Wir können (4.8) mit Hilfe des Hamiltonoperators umformulieren zu

$$H\psi(t) = i\frac{d}{dt}\psi(t). \quad (4.9)$$

Diesmal ist $\psi: \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathcal{H}$ als Funktion aufzufassen, die jedem Zeitpunkt t einen Zustand $\psi(t) \in \mathcal{H}$ zuordnet. Bevor wir das Lösen der Gleichung angehen, wollen wir vorerst überlegen, welchen Gesetzen die Zeitentwicklung eines quantenmechanischen Systems unterliegen sollte. Dazu dient wieder [Tes09, Abschnitt 2.1] als Vorlage.

Der Zustand eines Systems sollte zu jedem Zeitpunkt t eindeutig sein, vorausgesetzt wir kennen den Anfangszustand $\psi(0)$. Es gibt also einen injektiven Operator $U(t)$, sodass

$$\psi(t) = U(t)\psi(0).$$

Aus der Eindeutigkeit folgt außerdem

$$U(0) = \mathbb{I} \quad \text{und} \quad U(t+s) = U(t)U(s).$$

Überlagern wir verschiedene Anfangszustände, z.B. $\psi(0) = \alpha_1\psi_1(0) + \alpha_2\psi_2(0)$, so haben Experimente gezeigt, dass diese sich gegenseitig in ihrer Zeitentwicklung nicht beeinflussen - das nennt man auch Superpositionsprinzip - d.h. $\psi(t) = \alpha_1\psi_1(t) + \alpha_2\psi_2(t)$. $U(t)$ ist folglich linear. Wegen

$$\|U(t)\psi(0)\| = \|\psi(t)\| = 1 \quad \psi(0) \in \mathcal{H}$$

sind die $U(t)$ sogar unitär. Eine Familie $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}_+}$ unitärer Operatoren mit den aufgelisteten Eigenschaften nennt sich *Ein-Parameter-unitäre Gruppe*. Da sich Systeme immer kontinuierlich mit der Zeit verändern, fordern wir noch

$$\lim_{t \rightarrow t_0} U(t)\psi = U(t_0)\psi, \quad \psi \in \mathcal{H},$$

d.h. die Ein-Parameter-unitäre Gruppe ist stark stetig. Ohne groß auf die Hintergründe einzugehen, wollen wir erwähnen, dass solche Gruppen einen *infinitesimalen Erzeuger* besitzen. Der infinitesimale Erzeuger wird definiert durch

$$H\psi = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\varepsilon}(U(\varepsilon) - \mathbb{I})\psi, \quad \mathcal{D}(H) := \{\psi \in \mathcal{H} \mid \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\varepsilon}(U(\varepsilon) - \mathbb{I})\psi \text{ existiert}\}.$$

Das wir den Erzeuger mit H bezeichnen, ist kein Zufall. Der Erzeuger der stark stetigen Ein-Parameter-unitären Gruppe $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}_+}$ ist der Hamiltonoperator H !

Wir kommen nun zurück auf die Schrödinger-Gleichung (4.9). Nehmen wir einmal an, H wäre eine reelle Zahl, dann läge eine gewöhnliche Differenzialgleichung getrennter Variablen vor und wir erhielten die Lösung

$$\psi(t) = \psi(0)e^{-iHt}$$

zu beliebigem Anfangswert $\psi(0) \in \mathbb{R}$. Tatsächlich können wir genau denselben Lösungsansatz verwenden, wenn H ein dicht definierter, selbstadjungierter (unbeschränkter) Operator ist. Das Funktionalkalkül dazu haben wir in Abschnitt 3.4 eingeführt. Demnach haben wir

$$e^{-iHt} = \int_{\mathbb{R}} e^{-i\lambda t} dP(\lambda).$$

Folgender Satz schlägt einen Bogen zu unseren vorangegangenen Gedanken:

Satz 4.2.1 [Tes09, Satz 5.1]. *Sei H selbstadjungiert und $U(t) = e^{-iHt}$. Dann ist $U(t)$ eine stark stetige Ein-Parameter-unitäre Gruppe und H ihr infinitesimaler Erzeuger. Des Weiteren sind $U(t)$ und H unitär äquivalent.*

Die unitäre Äquivalenz stellt u.a. sicher, dass $U(t)\psi(0) \in \mathcal{D}(H)$ für jedes $t \in \mathbb{R}_+$. Demnach ist die Funktion $\psi(t) = e^{-iHt}\psi(0)$ eine Lösung der Schrödinger-Gleichung zu beliebigem Anfangswert $\psi(0) \in \mathcal{H}$. Man kann sogar zeigen, dass dies die einzige Lösung ist [Tes09, Lemma 5.2].

Wir untersuchen die Funktion $U(t)\psi(0)$ in Abhängigkeit von der Wahl von $\psi(0)$. Ist $\psi(0)$ Eigenvektor von H zum Eigenwert λ_0 , dann gilt

$$\begin{aligned} \langle \psi(0), e^{-iHt}\psi(0) \rangle &= \int_{\mathbb{R}} e^{-i\lambda t} d\mu_{\psi(0)}(\lambda) \\ &= e^{-i\lambda_0 t} \\ &= \langle \psi(0), e^{-i\lambda_0 t}\psi(0) \rangle, \end{aligned}$$

d.h. $e^{-iHt}\psi(0) = e^{-i\lambda_0 t}\psi(0)$. In diesem Fall gilt offensichtlich

$$\mathbb{E}_t(A) = \langle \psi(t), A\psi(t) \rangle = \langle \psi(0), A\psi(0) \rangle$$

für jede beliebige Observable A , d.h. die Wahrscheinlichkeit, dass ein bestimmter Messwert vorliegt, ist für Zustände, die Eigenfunktionen von H sind, zu jedem Zeitpunkt dieselbe. Analog kann man zeigen

$$e^{-iHt}\psi(0) = \sum_{i=1}^n \alpha_i e^{-i\lambda_i t} \psi_i,$$

wenn $\psi_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i \psi_i$ endliche Linearkombination von Eigenfunktionen ψ_i mit $H\psi_i = \lambda_i \psi_i$ ist. Wir erinnern daran, dass solche Vektoren sowie Vektoren, die unendliche Linearkombination von Eigenvektoren sind, den Raum \mathcal{H}_{pp} bilden. Alle Vektoren, die nicht als Linearkombination von Eigenfunktionen darstellbar sind, liegen in \mathcal{H}_c . Insgesamt können wir über die Zeitentwicklung eines Systems mit Anfangswert $\psi(0) \in \mathcal{H}_{pp}$ oder $\psi(0) \in \mathcal{H}_c$ folgende Aussage tätigen:

Satz 4.2.2 (RAGE-Theorem, angewandt auf die Folge $K_n = \chi_{B(0,n)}$) [Tes09, Satz 5.8]. *Sei H selbstadjungiert. Dann ist $K_n = \chi_{B(0,n)}$ eine Folge relativkompakter (Multiplikations-)Operatoren, die stark gegen die Identität \mathbb{I} konvergiert und es gilt*

$$\mathcal{H}_c = \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \sup_{n \in \mathbb{N}} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \|\chi_{B(0,n)} e^{-itH} \psi\| dt = 0 \right\}, \quad (4.10)$$

$$\mathcal{H}_{pp} = \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{t \geq 0} \|(\mathbb{I} - \chi_{B(0,n)}) e^{-itH} \psi\| = 0 \right\}. \quad (4.11)$$

Anmerkung 4.2.3. Ein Operator K heißt *relativ kompakt bezüglich A* , wenn $KR_A(z)$ kompakt ist für alle $z \in \rho(A)$. Für $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ beschränkt ist der Multiplikationsoperator χ_Ω relativ kompakt bezüglich $-\Delta$ [RS87b, Problem 41]. Mit Hilfe der zweiten Resolventenidentität $R_{A_1}(z) - R_{A_2}(z) = R_{A_2}(z)(A_2 - A_1)R_{A_1}(z)$ können wir schreiben

$$\chi_\Omega R_H(z) = \chi_\Omega R_{-\Delta}(z) - \chi_\Omega R_{-\Delta}(z) V R_H(z).$$

Die Verkettung eines kompakten und beschränkten Operators liefert wieder einen kompakten Operator. Da außerdem die Menge der kompakten Operatoren abgeschlossen unter Addition ist, ist somit auch $\chi_\Omega R_H(z)$ für alle $z \in \rho(H)$ kompakt.

Aussage (4.10) besagt, egal wie groß n gewählt wird, für T hinreichend groß ist die Norm $\|\chi_{B(0,n)}\psi(t)\|$ im Durchschnitt über $t \leq T$ kleiner als ε . Der Hauptteil der Funktion $\psi(t)$ muss sich also außerhalb von $B(0, n)$ aufhalten, n kann ja aber beliebig groß sein, d.h. $\psi(t)$ ist delokalisiert. In einem delokalisierten Zustand ist die Wahrscheinlichkeit, einen Partikel an einem bestimmten Ort vorzufinden, überall ungefähr gleich groß, da \mathbb{R}^3 sich aber ins Unendliche erstreckt, geht diese Wahrscheinlichkeit für jedes beliebige Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ gegen 0. Von einer lokalisierten Funktion spricht man dagegen, wenn eine Funktion auf kleinen Gebieten konzentriert ist und außerhalb dieser schnell abfällt. Dieser Fall liegt nach Aussage (4.11) dann vor, wenn $\psi \in \mathcal{H}_{pp}$: Zu $\varepsilon > 0$ finden wir ein $N_0 \in \mathbb{N}$, sodass für alle $n \geq N_0$

$$\|\psi(t) - \chi_{B(0,n)}\psi(t)\| < \varepsilon$$

und zwar gleichmäßig für alle Zeiten $t \in \mathbb{R}_+$. Die Funktion ist also hauptsächlich auf dem Gebiet $B(0, n)$ konzentriert.

Der Fokus der Arbeiten, die hier vorgestellt werden, liegt auf lokalisierten Funktionen. Wir beschränken uns im Folgenden also auf Anfangszustände $\psi(0) \in \mathcal{H}_{pp}$. Da diese Funktionen immer Linearkombinationen von Eigenfunktionen sind, werden diese unser Hauptbetrachtungsgegenstand.

5. Das effektive Potential des Hamiltonoperators

Wir möchten einige der Arbeiten vorstellen, deren Ergebnisse notwendig und zuweilen auch hinreichend für die Resultate des Artikels „The effective potential of an M -matrix“ [MFT21] sind. So kommt die Idee des effektiven Potentials nicht von irgendwoher, sondern wurde durch den Artikel „Localization via an effective potential“ [ADFJM19] inspiriert, verfasst von denselben Autoren (u. a.), die darin erhebliche Verbesserungen der Abschätzungen von S. Agmon mit Hilfe der sogenannten *Landschaftsfunktion* für den exponentiellen Abfall von Eigenfunktionen erzielen konnten. Wir werden noch einen Schritt vorher beginnen, bei den Resultaten von Agmon.

5.1 Agmons Methode

Wie haben im letzten Abschnitt gesehen, dass Eigenfunktionen des Hamilton-Operators H lokalisiert sind. Agmon hat eine Methode entwickelt den exponentiellen Abfall der Eigenfunktionen elliptischer Operatoren der Form

$$-\sum_{i,j} \partial_j a^{i,j}(x) \partial_i + V(x)^1$$

(wozu H gehört), mit Eigenwerten unter dem essentiellen Spektrum, nachzuweisen. Exponentieller Abfall ist im L^2 -Sinne gemeint. Wir sagen: $\varphi \in L^2$ besitzt eine L^2 obere Schranke, wenn $e^f \varphi \in L^2$, für irgendeine Funktion $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}_+$. Das bedeutet, $\varphi \rightarrow 0$ schneller als e^{-f} für $\|x\| \rightarrow \infty$ und in diesem Sinne sprechen wir von (L^2) exponentiellem Abfall [HS96, S.29].

Schon vor Agmon gab es Resultate, z.B. [O’C73, Sim74], die den exponentiellen Abfall für $\|x\| \rightarrow \infty$ von Eigenfunktionen φ von H nachweisen konnten. Die Abschätzungen waren im Groben von der Art

$$\int_{\mathbb{R}^n} \varphi(x) \cdot e^{\alpha \|x\|} dx < \infty,$$

für eine Konstante α^2 , allerdings nur für Potentiale V die für $\|x\| \rightarrow \infty$ sehr schnell abfallen. Die Kernidee in Agmons Abschätzungen ist, die Normfunktion $\|x\|$ durch eine Funktion $\rho(x)$ zu ersetzen, die das Verhalten von V in die verschiedenen Achsenrichtungen widerspiegelt. So gelten seine Resultate für alle Potentiale $V \in L^\infty$, die im Negativen hinreichend schnell abfallen, was eine große Verbesserung bringt. Seine Resultate sind in aller Ausführlichkeit in [Agm82] nachzulesen.

Wir formulieren eines seiner Resultate, übernommen aus [HS96, Satz 3.4], das zwar so nicht direkt in [Agm82] vorkommt, aber mit seiner Methode bewiesen werden kann. Sei

¹Unter der Bedingung, dass die $a^{i,j}(x)$ stetig, reell und beschränkt sind, sowie die Matrix $A = (a^{i,j}(x))$ positiv definit für alle $x \in \mathbb{R}^n$ ist.

² $e^{\alpha \|x\|}$ ist hier eine L^1 obere Schranke und man spricht von isotropem Abfall, da φ in alle Richtungen des Raumes gleichmäßig abfällt.

$H = -\Delta_D + V$ der in 4.1 eingeführte Hamilton-Operator mit V stetig, beschränkt und nichtnegativ. Sei $\varphi \in H^1(\mathbb{R}^n)$ eine Eigenfunktion von H zum Eigenwert E im schwachen Sinne, d.h.

$$\int_{\mathbb{R}^n} \nabla \varphi \cdot \nabla \psi + V \varphi \psi \, dx = E \int_{\mathbb{R}^n} \varphi \psi \, dx, \quad V \varphi \in L^2(\mathbb{R}^n) \quad \forall \psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n),$$

und $\rho_E(x) := \rho_E(x, 0)$ die Riemannsche Abstandsfunktion auf \mathbb{R}^n mit Gewicht

$$\mu_E(x) = (V(x) - E)_+ = \max(0, V(x) - E).$$

Ist der *Potentialtopf*

$$T(E) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid V(x) \leq E\}$$

kompakt, dann gilt für beliebiges $\varepsilon > 0$

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\varphi|^2 e^{2(1-\varepsilon)\rho_E} \, dx < \infty. \quad (5.1)$$

φ besitzt also die L^2 obere Schranke $e^{(1-\varepsilon)\rho_E}$. Der Beweis fußt auf der Beobachtung, dass für niedrige Energiewerte E die quadratische Form $\langle (H - E)\psi, \psi \rangle$ für bestimmte Testfunktionen ψ echt positiv ist. Dies wird ersichtlich, wenn man die Identität von Persson [Per60, Satz 2.1] für die größte untere Schranke des essentiellen Spektrums von H betrachtet:

$$\Sigma := \inf \sigma_{\text{ess}} = \sup_R \inf \{ \langle H\psi, \psi \rangle \mid \psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n \setminus \Omega_R), \|\psi\| = 1 \}$$

mit $\Omega_R = \{x \in \mathbb{R}^n \mid |x| > R\}$. Folglich gibt es zu $\varepsilon > 0$ ein $R = R_\varepsilon > 0$, sodass

$$\langle H\psi, \psi \rangle \geq (\Sigma - \varepsilon) \int_{|x|>R} |\psi|^2 \, dx, \quad \forall \psi \in C_0^\infty(\Omega_R)$$

Für alle Eigenwerte E mit $E < \Sigma$ und alle $\varepsilon < \Sigma - E$ haben wir somit die gewünschte Eigenschaft

$$\langle (H - E)\psi, \psi \rangle \geq (\Sigma - E - \varepsilon) \int_{|x|>R} |\psi|^2 \, dx > 0, \quad \forall \psi \in C_0^\infty(\Omega_R).$$

Die Forderung nach der Positivität der quadratischen Form findet sich in der sog. *λ -Bedingung* wieder:

Definition 5.1.1 (*λ -Bedingung*). Sei H der Hamiltonoperator. Gibt es eine zusammenhängende, offene Menge $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ und eine positive, stetige Funktion $\lambda: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, sodass

$$\langle H\psi, \psi \rangle \geq \langle \lambda\psi, \psi \rangle, \quad \forall \psi \in C_0^\infty(\Omega),$$

so sagen wir H erfüllt eine *λ -Bedingung* auf Ω .

Die Vielzahl der Abschätzungen von Agmon rührt daher, dass mehrere Funktionen neben $\Sigma - E - \varepsilon$ existieren, die als λ -Funktion in Frage kommen und die für verschiedene Varianten des Hamiltonoperators eingesetzt werden können. Wir stellen nun eine vereinfachte Version von Satz 1.5 aus [Agm82] vor, aus dessen Ergebnissen wir schließlich (5.1) herleiten können. ³

³Agmon hat diesen Satz ursprünglich für elliptische Operatoren der Form $E := -\sum_{i,j} \partial_j a^{i,j}(x) \partial_i + V(x)$ mit $V \in L_{loc}^1(\Omega)$, $V^- \in M_{loc}(\Omega)$ komplexwertig hergeleitet und sich nicht auf Eigenfunktionen beschränkt, sondern das Integral für schwache Lösungen φ von $Eu = f$ für eine beliebige Funktion $f \in L_{loc}^2(\Omega)$ abgeschätzt. Auch verlangt er nur $\varphi \in H_{loc}^1(\Omega)$.

Satz 5.1.2. *Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ eine zusammenhängende, offene und unbeschränkte Menge sowie $H = -\Delta_D + V$ der selbstadjungierte Hamiltonoperator mit V einem nichtnegativen, reellen Potential in $L^\infty(\Omega)$.*

Es sei $\varphi \in H^1(\Omega)$ schwache Lösung von $Hf = Ef$ auf Ω . Weiter erfülle $H - E$ die λ -Bedingung auf Ω für eine positive, stetige Funktion λ .

Es bezeichne ρ_λ die Riemannsche Abstandsfunktion mit Gewicht λ . Ist h eine reelle lokal lipschitzstetige Funktion auf Ω , sodass

$$|\nabla h(x)|^2 < \lambda(x) \quad \text{fast überall,}$$

dann gilt für $\Omega_d := \{x \in \Omega \mid \rho_\lambda(x, \partial\Omega) > d\}$ die Abschätzung

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_d} (\lambda - |\nabla h|^2) |\varphi e^h|^2 dx \\ \leq \frac{1+2d}{d^2} \int_{\Omega \setminus \Omega_d} \lambda |\varphi e^h|^2 dx. \end{aligned}$$

Beweisskizze. Da $\varphi \in H^1(\Omega)$ schwache Lösung von $Hf = Ef$ auf Ω ist, gilt für alle Testfunktionen $\psi \in C_0^\infty(\Omega)$

$$\int_{\Omega} \nabla \varphi \cdot \nabla \psi + V \varphi \psi \, dx = E \int_{\Omega} \varphi \psi \, dx. \quad (5.2)$$

Da $C_0^\infty(\Omega)$ dicht in $H_0^1(\Omega)$ liegt, wird die Identität ebenso für alle $\psi \in H_0^1(\Omega)$ erfüllt. Es sei g eine reelle, lokal lipschitzstetige Funktion mit kompakten Träger in Ω , dann ist $g^2 \varphi \in H_0^1(\Omega)$ (die Argumentation verläuft analog zu Lemma 3.1.7) und damit geeignete Testfunktion, sodass also

$$\int_{\Omega} \nabla \varphi \cdot \nabla (g^2 \varphi) + V \varphi^2 g^2 \, dx = E \int_{\Omega} \varphi^2 g^2 \, dx. \quad (5.3)$$

Die Forderung, dass g kompakten Träger habe, verkompliziert den Beweis um einiges, denn später soll g durch die Funktion χe^h ersetzt werden, die keinen kompakten Träger besitzt. Agmon hat das Problem gelöst, indem er eine Funktionenfolge $(g_n)_{n \in \mathbb{N}}$ konstruiert hat, sodass $\text{Tr}(g_n)$ kompakt in Ω ist und $g_n \rightarrow \chi e^h$. Dann hat er alle Abschätzungen für g_n durchgeführt und schließlich Konvergenz der resultierenden Integrale gezeigt. Da dies eine Beweisskizze ist, sparen wir uns die Mühe und führen gleich alle Überlegungen für g ohne kompakten Träger durch.

Wir haben (da g und φ reell sind)

$$|\nabla(\varphi g)|^2 = \varphi^2 |\nabla g|^2 + 2\varphi g \nabla \varphi \cdot \nabla g + g^2 |\nabla \varphi|^2$$

und somit

$$\nabla \varphi \cdot \nabla (g^2 \varphi) = g^2 |\nabla \varphi|^2 + 2\varphi g \nabla \varphi \cdot \nabla g = |\nabla(\varphi g)|^2 - \varphi^2 |\nabla g|^2.$$

Einsetzen in (5.3) liefert

$$\int_{\Omega} |\nabla(\varphi g)|^2 - \varphi^2 |\nabla g|^2 + V \varphi^2 g^2 \, dx = E \int_{\Omega} \varphi^2 g^2 \, dx,$$

ergo

$$\int_{\Omega} \varphi^2 |\nabla g|^2 dx = \int_{\Omega} |\nabla(g\varphi)|^2 + (V - E)g^2\varphi^2 dx \geq \int_{\Omega} \lambda g^2 \varphi^2. \quad (5.4)$$

Wie angekündigt werden wir nun g durch $\chi_d e^h$ ersetzen, mit h und χ_d reellen, lokal lipschitzstetigen Funktionen. Die Funktionen χ_d definieren wir für $d \in \mathbb{N}$ durch $\chi_d(x) := \eta_d(\rho_\lambda(x, \partial\Omega))$, wobei

$$\eta_d(x) = \begin{cases} \frac{x}{d} & \text{wenn } x < d \\ 1 & \text{wenn } x \geq d. \end{cases}$$

Offensichtlich gilt

$$|\eta_d(x) - \eta_d(y)| \leq \frac{1}{d}|x - y|$$

und somit aufgrund der (umgekehrten) Dreiecksungleichung

$$|\chi_d(x) - \chi_d(y)| \leq \frac{1}{d}|\rho_\lambda(x, \partial\Omega) - \rho_\lambda(y, \partial\Omega)| \leq \frac{1}{d}\rho_\lambda(x, y).$$

Nach Lemma 3.3.1 sind die χ_d damit lokal lipschitzstetig und mit dem gleichen Lemma folgt

$$|\nabla \chi_d(x)|^2 \leq \frac{1}{d^2}\lambda(x).$$

Da h nach Voraussetzung $|\nabla h(x)|^2 \leq \lambda(x)$ erfüllt, können wir mit der Cauchy-Schwarz-Ungleichung weiter abschätzen

$$|\nabla \chi_d(x) \nabla h(x)| \leq \sqrt{|\nabla \chi_d(x)|^2} \sqrt{|\nabla h(x)|^2} \leq \frac{1}{d}\lambda(x).$$

Für $g = \chi_d e^h$ haben wir

$$|\nabla g|^2 = e^{2h} |\nabla \chi_d|^2 + 2\chi_d e^{2h} \nabla \chi_d \nabla h + e^{2h} \chi_d^2 |\nabla h|^2.$$

Einsetzen in (5.4) ergibt

$$\int_{\Omega} (\lambda - |\nabla h|^2) |\varphi e^h \chi_d|^2 dx \leq \int_{\Omega} |\varphi e^h|^2 (|\nabla \chi_d|^2 + 2\chi_d \nabla \chi_d \nabla h) dx$$

Wir sehen, dass auf der rechten Seite nur Ableitungen von χ_d vorkommen, die immer dann verschwinden, wenn $\rho_\lambda(x, \partial\Omega) \geq d$ oder $\rho_\lambda(x, \partial\Omega) = 0$. Da Ω offen ist und ρ_λ aufgrund der Positivität von λ eine Metrik (und keine Pseudometrik!) ist, kann letzterer Fall nicht eintreten. Setzen wir $\Omega_d := \{x \in \Omega \mid \rho_\lambda(x, \partial\Omega) \geq d\}$, dann haben wir

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} |\varphi e^h|^2 (|\nabla \chi_d|^2 + 2\chi_d \nabla \chi_d \nabla h) dx \\ &= \int_{\Omega \setminus \Omega_d} |\varphi e^h|^2 (|\nabla \chi_d|^2 + 2\chi_d \nabla \chi_d \nabla h) dx \\ &\leq \left(\frac{1}{d^2} + \frac{2}{d}\right) \int_{\Omega \setminus \Omega_d} |\varphi e^h|^2 \lambda dx. \end{aligned}$$

Des weiteren ist die Funktion

$$(\lambda - |\nabla h|^2) |\varphi e^h \chi_d|^2$$

auf ganz Ω positiv, d.h.

$$\int_{\Omega_d} (\lambda - |\nabla h|^2) |\varphi e^h \chi_d|^2 dx \leq \int_{\Omega} (\lambda - |\nabla h|^2) |\varphi e^h \chi_d|^2 dx.$$

Da $\chi_d(x) = 1$ auf Ω_d , erhalten wir schließlich die zu zeigende Aussage

$$\int_{\Omega_d} (\lambda - |\nabla h|^2) |\varphi e^h|^2 dx \leq \frac{1+2d}{d^2} \int_{\Omega \setminus \Omega_d} \lambda |\varphi e^h|^2 dx.$$

□

Von hier aus ist es kein weiter Weg mehr bis zu (5.1). Sei V stetig und $T(E) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid V(x) \leq E\}$ kompakt. Dann gibt es $\delta > 0$, sodass $T(E + \delta) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid V(x) \leq E + \delta\}$ ebenfalls kompakt ist. Wir wählen $\lambda(x) = (V(x) - E)_+$, diese Funktion ist stetig und positiv auf $\Omega := \mathbb{R}^n \setminus T(E + \delta)$. Trivialerweise gilt

$$\langle (H - E)\psi, \psi \rangle \geq \langle \lambda\psi, \psi \rangle \quad \psi \in C_0^\infty(\Omega).$$

Die Kompaktheit von $T(E)$ impliziert im Übrigen auch $E < \Sigma$, wie sich aus der Identität für Σ von Persson herleiten lässt. Für die lokal lipschitzstetige Funktion $h(x) := (1 - \varepsilon)\rho_\lambda(x)$ gilt nach Lemma 3.3.1 $|\nabla h(x)|^2 \leq (1 - \varepsilon)^2 \lambda(x) < \lambda(x)$. Nach Satz 5.1.2 folgt für beliebiges $d \in \mathbb{N}$

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_d} (1 - (1 - \varepsilon)^2) (V - E)_+ |\varphi e^{(1-\varepsilon)\rho_\lambda}|^2 dx \\ & \leq \int_{\Omega_d} \left((V - E)_+ - |(1 - \varepsilon)\nabla \rho_\lambda|^2 \right) |\varphi e^{(1-\varepsilon)\rho_\lambda}|^2 dx \\ & \leq \frac{1+2d}{d^2} \int_{\Omega \setminus \Omega_d} (V - E)_+ |\varphi e^{(1-\varepsilon)\rho_\lambda}|^2 dx. \end{aligned}$$

Da $T(E + \delta)$ Kompakt ist, gibt es ein $R > 0$, sodass $T(E + \delta) \subset B(0, R)$. Für $x \in \Omega \setminus \Omega_d$ gilt $\rho_\lambda(x, \partial T(E + \delta)) \leq d$. Mit (3.1) folgt

$$\inf_{y \in \partial T(E + \delta)} \|x - y\| \leq 1/\delta \rho_\lambda(x, \partial T(E + \delta)) \leq d/\delta,$$

d.h. $\|x - 0\| \leq \inf_{y \in \partial T(E + \delta)} \|x - y\| + \inf_{y \in \partial T(E + \delta)} \|y - 0\| \leq d/\delta + R =: \bar{R}$, folglich ist $\Omega \setminus \Omega_d$ in der kompakten Kugel $B(0, \bar{R})$ enthalten. Wegen $V(x) - E > \delta$ auf Ω_d haben wir demnach

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_d} |\varphi e^{2(1-\varepsilon)\rho_\lambda}|^2 dx \\ & \leq \frac{1+2d}{d^2} \cdot \frac{1}{(1 - (1 - \varepsilon)^2)\delta} \cdot \sup_{x \in B(0, \bar{R})} \lambda(x) \int_{\Omega \setminus \Omega_d} |\varphi e^{2(1-\varepsilon)\rho_\lambda}|^2 dx \\ & < \infty, \end{aligned}$$

Da $\mathbb{R}^n \setminus \Omega_d$ kompakt ist, ist (5.1) bewiesen.

5.2 Nachweis von Lokalisierung mit Hilfe der Landschaftsfunktion

Nach der Einführung in die Abschätzungen von Agmon, können wir auf Artikel [ADFJM19] zu sprechen kommen. Die Autoren machten die Entdeckung, dass die Funktion u , die $Hu = 1$ erfüllt, sehr gut die Gebiete vorhersagt, in denen Lokalisierung auftritt. Genauer konnten sie zeigen, dass die Eigenfunktionen von H sich auf solche Gebiete konzentrieren, in denen ihr zugehöriger Eigenwert kleiner ist als $\frac{1}{u}$ und außerhalb dieser Gebiete exponentiell abfallen (im L^2 -Sinne). Die Funktion u wird *Landschaftsfunktion* genannt und das Reziprok $\frac{1}{u}$ *effektives Potential*.

Es stellt sich die Frage, warum wir V ersetzen wollen. Wir erinnern daran, dass wir von dem Potential V nur verlangt haben, dass es reell, nichtnegativ und fast überall beschränkt sei. Es kann durchaus ungeordnet sein und viele Sprünge enthalten, sodass der Potentialtopf $\{x \in \mathbb{R}^n \mid V(x) \leq E + \delta\}$ vollkommen durchlöchert ist und keine eindeutigen Gebiete mehr identifiziert, auf denen die Eigenfunktionen konzentriert sind. Dagegen liefert der *effektive Potentialtopf* $\{x \in \mathbb{R}^n \mid \frac{1}{u(x)} \leq E + \delta\}$ auch für ungeordnete Potentiale klar abgegrenzte Gebiete, in denen die Eigenfunktionen sich aufhalten und außerhalb derer sie exponentiell abfallen - sofern dies erwartet wird. D.h. die Funktion u kann als zuverlässiger (und einfach berechenbarer) Prädiktor für Lokalisierung genutzt werden.

Bevor wir zeigen, wie Agmons Methode mit Hilfe der Landschaftsfunktion u verbessert werden kann, formulieren wir ein paar der Voraussetzungen neu. Ω sei von nun an eine zusammenhängende, beschränkte und offene Menge in \mathbb{R}^n mit hinreichend glattem bi-Lipschitz-Rand (formal wird Ω als Bild eines C^∞ -Gebiets unter einer bi-Lipschitz-Funktion eingeführt) und wir setzen $M = \bar{\Omega}$. Es sei $H = -\Delta_N + V$ und entsprechend nennen wir $\varphi \in H^1(M) = H^1(\Omega)$ schwache Lösung von $H\varphi = f$ für $f \in L^2(M) = L^2(\Omega)$, wenn

$$\int_M \nabla \varphi \cdot \nabla \psi + V \varphi \psi \, dx = \int_M f \psi \, dx, \quad \forall \psi \in H^1(M).$$

(Ist φ eine Funktion deren Gradient existiert, dann verlangt diese Definition, dass

$$\nu(x) \cdot \nabla \varphi(x) = 0, \quad \text{f. ü. auf } \partial\Omega,$$

siehe Abschnitt 4.1.) Wir betrachten hier wieder ausschließlich reelle Funktionen. Das Potential V ist nichtnegativ und beschränkt ($0 \leq V(x) \leq \bar{V}$) und wir fordern $V(x) > 0$ fast überall. Um das Potential V durch $\frac{1}{u}$ ersetzen zu können, muss die Landschaftsfunktion einigen Forderungen genügen. Ihre Existenz und Eindeutigkeit haben wir bereits in Abschnitt 4.1.2 gezeigt. Es bleiben Stetigkeit und Nichtnegativität nachzuweisen, nur dann darf $(\frac{1}{u} - E)_+$ als Gewichtsfunktion in der Riemannschen Abstandsfunktion zum Einsatz kommen. Ohne Beweis verwenden wir, dass jede Funktion v , die schwach $Hv = f$ für eine beschränkte messbare Funktion f erfüllt, hölderstetig zum Exponenten α für ein $\alpha > 0$ ist. Insbesondere ist u also stetig [ADFJM19, Proposition 2.2]. Wir geben nun einen Beweis dafür an, dass $v \geq 0$, vorausgesetzt $Hv = f \geq 0$ für eine beschränkte, messbare Funktion f [auch ADFJM19, Proposition 2.2]. Wir wissen, dass v in diesem Fall stetig und somit die Menge $\Omega_- = \{x \in \Omega \mid v(x) < 0\}$ offen ist. Die Abbildung

$$\varphi \mapsto \int_{\Omega} |\nabla \varphi - \nabla v|^2 + V(\varphi - v)^2 - f v \, dx$$

nimmt ihr Minimum in v an. Damit ist der Wert des Integrals

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} |\nabla\varphi - \nabla v|^2 + V(\varphi - v)^2 - f v \, dx &= \int_{\Omega} |\nabla\varphi - \nabla v|^2 + V(\varphi - v)^2 - (|\nabla v|^2 + V v^2) \, dx \\ &= \int_{\Omega} |\nabla\varphi|^2 - 2\nabla\varphi \cdot \nabla v + V\varphi^2 - 2V\varphi v \, dx \\ &= \int_{\Omega} |\nabla\varphi|^2 + V\varphi^2 - 2f\varphi \, dx. \end{aligned}$$

für v kleiner, als für $v_+ = \max(v(x), 0)$. Die beiden Funktionen stimmen überall außerhalb von Ω_- überein, d.h. es muss gelten

$$\int_{\Omega_-} |\nabla v|^2 + V v^2 - 2f v \, dx \leq \int_{\Omega_-} |\nabla v_+|^2 + V v_+^2 - 2f v_+ \, dx = 0.$$

Wegen $V \geq 0$ und $f \geq 0$ ist $V v^2 - 2f v \geq 0$ auf Ω_- und daher

$$\int_{\Omega_-} |\nabla v|^2 \, dx \leq 0.$$

Die schwache Ableitung ∇v von v ist demnach fast überall 0 und v stimmt auf jeder zusammenhängenden Komponente von Ω_- f. ü. mit einer strikt negativen Konstante überein. Wäre Ω_- eine echte Teilmenge von Ω , dann wäre v auf $\partial\Omega_- \cap \Omega$ nicht stetig, ein Widerspruch. Es kann aber auch nicht $\Omega_- = \Omega$ gelten, denn dann wäre $v(x) \equiv -a$ für eine Konstante $a > 0$ und $Hv = -aV$, und das ist keine nichtnegative Funktion. Also $\Omega_- = \emptyset$. Die Landschaftsfunktion u ist somit nichtnegativ, zusätzlich gilt $u \geq \frac{1}{V}$, denn $w = u - \frac{1}{V}$ erfüllt $Hw = 1 - \frac{V}{V} \geq 0$ und nach dem gerade gezeigten ist dann $u - \frac{1}{V} \geq 0$.

Wir möchten die Beziehung zwischen V und $\frac{1}{u}$ mathematisch begründen. Erfüllt u schwach $Hu = 1$ und ist M_u der Multiplikationsoperator mit $M_u f := uf$, dann gilt für den konjugierten Operator $\overline{H} := M_u^{-1} \circ H \circ M_u$

$$\begin{aligned} \overline{H}(g) &= \frac{1}{u} H(gu) = \frac{1}{u} (-\Delta(gu) + Vgu) = \frac{1}{u} (-g\Delta(u) - 2\nabla u \cdot \nabla g - u\Delta(g) + Vgu) \\ &= \frac{1}{u} (-2\nabla u \cdot \nabla g - u\Delta(g) + g) = -\frac{1}{u^2} \operatorname{div}(u^2 \nabla g) + \frac{1}{u} \cdot g. \end{aligned}$$

D.h. das Potential V wurde in \overline{H} durch das effektive Potential $\frac{1}{u}$ ersetzt! Die beiden Operatoren lassen sich mit Hilfe des Skalarproduktes in Beziehung setzen, und zwar gilt für $f = gu$

$$\langle Hf, f \rangle = \langle u^2 \overline{H}g, g \rangle,$$

was ausgeschrieben

$$\int |\nabla f|^2 + V f^2 \, dx = \int u^2 |\nabla(\frac{f}{u})|^2 + \frac{1}{u} f^2 \, dx \quad (5.5)$$

ergibt. Da $\int u^2 |\nabla(f/u)|^2 \, dx \geq 0$ ist $\langle Hf, f \rangle \geq \langle \frac{1}{u} f, f \rangle$ und für $\delta > 0$ erhalten wir auf dem Gebiet $\Lambda := \{x \in M \mid \frac{1}{u} - E > \delta\}$ die λ -Bedingung

$$\langle (H - E)\psi, \psi \rangle \geq \langle (\frac{1}{u} - E)\psi, \psi \rangle \quad \forall \psi \in H^1(\Lambda).$$

Wegen (5.5) spielt die λ -Bedingung jedoch keine Bedeutung für unsere Abschätzungen und statt (5.4) erhalten wir die Identität

$$\int_M \varphi^2 |\nabla g|^2 dx = \int_M u^2 |\nabla(\frac{g\varphi}{u})|^2 + (\frac{1}{u} - E)(g\varphi)^2 dx.$$

Wir ersetzen g durch $\chi_d e^{\alpha h}$ für $0 < \alpha < 1$, wobei wieder $\chi_d(x) := \eta_d(\rho_\lambda(x, M \setminus \Lambda))$ und

$$\eta_d(x) = \begin{cases} \frac{x}{d} & \text{wenn } x < d \\ 1 & \text{wenn } x \geq d. \end{cases}$$

Führen wir alle weiteren Schritte wie in dem Beweis zu Satz 5.1.2 durch, dann erhalten wir

$$\begin{aligned} \int_\Lambda u^2 |\nabla(\frac{\chi_d e^{\alpha h} \varphi}{u})|^2 dx + \int_\Lambda ((\frac{1}{u} - E) - \alpha |\nabla h|^2) |\varphi \chi_d e^{\alpha h}|^2 dx \\ \leq \frac{1 + 2\alpha d}{d^2} \int_{\Lambda \setminus \Lambda_d} (\varphi e^{\alpha h})^2 \lambda dx. \end{aligned}$$

Die Menge $M \setminus \Lambda$ entspricht gerade dem Potentialtopf $T(E + \delta) := \{x \in M \mid \frac{1}{u(x)} \leq E + \delta\}$. Setzen wir nun $h(x) = \rho_E(x, T(E + \delta))$ mit ρ_E der Riemannschen Abstandsfunktion mit Gewicht $\mu_E := (\frac{1}{u} - E)_+$ und bedenken, dass $\chi = 0$ auf $M \setminus \Lambda$ sowie $|\nabla h|^2 \leq \mu_E$, dann ist insgesamt

$$\begin{aligned} \int_M u^2 |\nabla(\frac{\chi_d e^{\alpha h} \varphi}{u})|^2 dx + (1 - \alpha^2) \int_M (\frac{1}{u} - E)_+ (\chi_d e^{\alpha h} \varphi)^2 dx \\ \leq \frac{1 + 2\alpha d}{d^2} \int_{0 < h < d} (\frac{1}{u} - E)_+ (\varphi e^{\alpha h})^2 dx \\ \leq \frac{1 + 2\alpha d}{d^2} e^{2\alpha d} (\bar{V} - E) \int_{\{x \in M \mid 0 < h(x) < d\}} \varphi^2 dx. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Dies entspricht Theorem 3.4 in [ADFJM19], wobei dort $d = 1$ gesetzt wurde. Je größer δ ist, desto kleiner wird $e^{\alpha h}$, die Abschätzung wird mit großem δ also schwächer. Die Bedingung $\frac{1}{u} - E > \delta$ für $x \in \Omega$ ermöglicht andererseits die Abschätzung

$$\int_M (\chi_d e^{\alpha h} \varphi)^2 dx < \frac{1}{\delta} \frac{1 + 2\alpha d}{d^2} e^{2\alpha d} (\bar{V} - E) \int_{0 < h < d} \varphi^2 dx,$$

deswegen ist es dennoch sinnvoll die (variierbare) Konstante δ einzuführen.

Die Autoren gehen in dem Artikel noch einen Schritt weiter: Wenn der effektive Potentialtopf $T(E + \delta)$ aus mehreren disjunkten Gebieten K_l besteht, sodass man um jede dieser Gebiete eine Umgebung Ω_l finden kann, deren Rand mindestens Abstand S (gemessen in der Riemannschen Abstandsfunktion) zu K_l hat, sodass insgesamt $M = \bigcup_l \Omega_l$ und $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset$ gilt; wird dann der Operator H durch die Ω_l reduziert? Dabei ist insbesondere von Interesse, ob $\sigma_p(H) = \bigcup_l \sigma_p(H|_{\Omega_l})$. Die Autoren liefern hier Abschätzungen in Abhängigkeit der Konstanten S , deren Herleitung u. a. auf dem neuen Term $\int_M u^2 |\nabla(\frac{\chi_d e^{\alpha h} \varphi}{u})|^2 dx$ beruht. Weiter wollen wir an dieser Stelle aber nicht darauf eingehen, wir werden später ausführlich im Kontext von M -Matrizen darauf zu sprechen kommen.

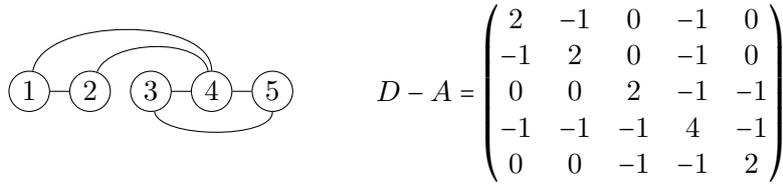


Abbildung 5.1: Graph mit zugehöriger Laplace Matrix

5.3 Vom Hamiltonoperator zu M -Matrizen

Wir wenden uns dem diskreten Hamiltonoperator auf endlichen Graphen zu. Es sei $G := \{V, E\}$ ein endlicher, ungerichteter Graph mit N Knoten ohne Mehrfachkanten. Wir legen den Hilbertraum $l^2([N])$ zugrunde, wobei Index i dem Knoten i entspricht. Ein Element $\phi \in l^2([N])$ können wir als Funktion $\phi: [N] \rightarrow \mathbb{R}$ auffassen, die jedem Knoten $i \in [N]$ den Wert ϕ_i zuordnet. Analog gilt für jeden Zustand ϕ , $\|\phi\| = 1$, dass $\sum_{i \in D} \phi_i^2$ die Wahrscheinlichkeit beschreibt, dass sich das Partikel an einer der Knoten der Menge $D \subset V$ aufhält. Der diskrete Hamiltonoperator ist von der gleichen Form

$$H := -\Delta + V,$$

wobei Δ der diskrete Laplace Operator und V eine $N \times N$ Diagonalmatrix ist [siehe z.B. SS92]. Der diskrete Laplace Operator auf Graphen ist gegeben durch

$$(-\Delta\phi)_i := \sum_{j \sim i} (\phi_i - \phi_j), \tag{5.7}$$

hier bedeutet $j \sim i$, dass j und i nächste Nachbarn sind [Dod84, (0.1)]. Ist $D := \text{diag}(D_1, \dots, D_N)$ eine Diagonalmatrix, die an der Stelle D_i den Grad des Knotens i eingetragen hat und ist A die Adjazenzmatrix des Graphen, so gilt

$$(-\Delta\phi)_i = D_i\phi_i - \sum_{j \sim i} \phi_j = ((D - A)\phi)_i.$$

Wir nennen $D - A$ die zugehörige Laplace Matrix. Sie ist symmetrisch, da wir von ungerichteten Graphen ausgehen, und hat die besondere Eigenschaft, dass ihre Zeilen- und Spaltensumme immer 0 ist, siehe Abb. 5.1 (eine genaue Untersuchung findet sich in [Mer94]).

Insgesamt ergibt sich

$$H = D - A + V,$$

d.h. der Hamiltonoperator auf endlichen Graphen lässt sich als Matrix darstellen. Diese Matrix ist eine Z -Matrix, denn alle Einträge außerhalb der Diagonalen sind kleiner gleich Null. Fordern wir, dass $V > 0$, dann gilt $H z > 0$ für den Vektor $z = (1, \dots, 1) \in l^2([N])$ und nach Satz 3.2.3 ist H eine nichtsinguläre symmetrische M -Matrix. Als diese besitzt sie N reelle, positive Eigenwerte, deren zugehörige Eigenvektoren eine Basis von $l^2([N])$ bilden (Satz 3.2.2).

Es stellt sich die Frage, ob auch Eigenvektoren des diskreten Hamiltonoperators, oder noch allgemeiner von symmetrischen M -Matrizen, Lokalisierung erfahren und ob die Landschaftsfunktion u wieder als Prädiktor eingesetzt werden kann. Die Autoren M. Filoche, S. Mayboroda und T. Tao konnten mit [MFT21] diese Frage positiv beantworten.

6. Das effektive Potential von M -Matrizen

Im ersten Teil dieses Kapitels leiten wir eine Ungleichung der Form (5.6) für Eigenvektoren symmetrischer M -Matrizen her, dabei orientiert sich unser Vorgehen an den Methoden, die wir im letzten Kapitel kennen gelernt haben.

Im zweiten Teil gehen wir der Frage nach, ob sich mit Hilfe des Potentialtopfes eine Partitionierung $P = \{\Omega_1, \dots, \Omega_n\}$ von $[N]$ finden lässt, sodass H durch die Unterräume $l^2(\Omega_l)$, $l = 1, \dots, n$, reduziert wird. Unser Ziel ist es, abzuschätzen, wie „nah beieinander“ die Mengen $\sigma(H)$ und $\bigcup_{l=1}^n \sigma(H|_{\Omega_l})$ bzw. $\{\varphi \mid H\varphi = \mu\varphi\}$ und $\bigoplus_{l=1}^n \{\varphi \mid \exists \lambda \in (\mu - \delta, \mu + \delta): H|_{\Omega_l}\varphi = \lambda\varphi\}$ liegen.

Bevor wir uns den Resultaten zuwenden, müssen wir noch die Abstandsfunktion sowie eine Reihe weiterer Begriffe für den diskreten Fall einführen.

Falls nicht anders gekennzeichnet sind alle Resultate und Beweise den Abschnitten 4 und 5 von [MFT21] entnommen.

6.1 Definitionen

In diesem Kapitel sind, wenn nicht anders angegeben, alle betrachteten Matrizen und Vektoren reell. Wenn wir von M -Matrizen sprechen, meinen wir immer nichtsinguläre M -Matrizen.

Definition 6.1.1 (effektives Potential, Abstandsfunktion). Sei $A = (a_{ij})_{i,j \in [N]}$ eine symmetrische $N \times N$ Matrix, $u = (u_i)_{i \in [N]}$ ein nichtnegativer Vektor und E eine reelle Zahl. Wir definieren das effektive Potential $\bar{V} = (\bar{v}_i)_{i \in [N]}$ durch

$$\bar{v}_i := \frac{(Au)_i}{u_i},$$

das verschobene effektive Potential $V = (v_i)_{i \in [N]}$ durch

$$v_i := (\bar{v}_i - E)_+$$

und den Potentialtopf durch

$$K_E := \{i \in [N]: v_i = 0\} = \left\{ i \in [N]: \frac{(Au)_i}{u_i} \leq E \right\}.$$

Wir definieren auf $[N] \times [N]$ eine Abstandsfunktion $\rho = \rho_{A,u,E}$ durch

$$\rho_\mu(i, j) := \inf_{L \geq 0} \inf_{\substack{i_0, \dots, i_L \in [N]: \\ i_0 = i, i_L = j}} \left\{ \sum_{l=0}^{L-1} \ln \left(1 + \sqrt{\frac{v_{i_l} v_{i_{l+1}}}{|a_{i_l i_{l+1}}|}} \right) \right\},$$

wobei nur solche Wege i_0, \dots, i_L in Betracht gezogen werden, für die $a_{i_l i_{l+1}} \neq 0$ für alle $l \in \{0, \dots, L-1\}$ gilt.

Wie wir sehen, existiert nicht mehr nur ein effektives Potential $1/u$ für $u = H^{-1}1$, vielmehr korrespondiert zu jedem nichtnegativen Vektor $u \in l^2([N])$ ein mögliches (jedoch nicht immer sinnvolles) effektives Potential. Auf die Gründe gehen wir im nächsten Abschnitt ein.

Die Abstandsfunktion lässt sich anschaulich auf Graphen erklären: Denkt man sich einen Graphen mit N Knoten, der eine Kante von Knoten i zu j enthält, sofern $a_{ij} \neq 0$ und $i \neq j$, und in dem jeder vorhandenen Kante das Gewicht $\mu_{ij} = \ln\left(1 + \sqrt{\frac{\sqrt{v_i v_j}}{|a_{ij}|}}\right)$ zugeordnet ist, so ist ρ die *shortest path metric* dieses Graphen. Verbindet die Knoten i und j eine Kante, also $a_{ij} \neq 0$, dann ist $i_0 = i, i_1 = j$ ein möglicher Weg und somit

$$\rho(i, j) \leq \ln\left(1 + \sqrt{\frac{\sqrt{v_i v_j}}{|a_{ij}|}}\right).$$

Liegt nun i oder j im Potentialtopf K_E , dann ist $\rho(i, j) = 0$, daher haben wir es wieder mit einer Pseudometrik zu tun (Symmetrie und Dreiecksungleichung werden offensichtlich erfüllt).

Wir führen für Matrizen den Begriff der *Konnektivität* ein. Wir sagen, die Matrix A besitzt höchstens Konnektivität W_c , wenn es in A höchstens W_c Einträge pro Spalte und Zeile außerhalb der Diagonalen gibt, die ungleich Null sind. Stellen wir uns den beschriebenen Graphen zu A vor, dann entspricht W_c dem maximalen Grad seiner Knoten, wobei Schleifen nicht mitgezählt werden.

Eine Begrifflichkeit fehlt uns noch.

Definition 6.1.2 (lokale Eigenvektoren). Sei $M \subset [N]$ und \mathbb{I}_M die $N \times N$ Diagonalmatrix mit $(\mathbb{I}_M)_{ii} = 1$, wenn $i \in M$, und 0 sonst. Für einen Vektor $\varphi \in l^2([N])$ ist $\varphi|_M = \mathbb{I}_M \varphi$ die Einschränkung von φ auf M (durch Nullen auf $l^2([N])$ erweitert). Genauso ist $A|_M = \mathbb{I}_M A \mathbb{I}_M$ die Einschränkung einer $N \times N$ Matrix A auf M (wieder durch Nullen erweitert). Wir nennen $\varphi \in l^2([N])$ lokalen Eigenvektor von A auf M mit Eigenwert E , wenn $\varphi = \varphi|_M$ Eigenvektor von $A = A|_M$ mit Eigenwert E ist, d.h. $\varphi = \mathbb{I}_M \varphi$ und $\mathbb{I}_M A \mathbb{I}_M \varphi = E \varphi$.

Wenn A symmetrisch ist, dann ist auch $A|_M$ für jede Teilmenge $M \subset [N]$ symmetrisch. Demnach besitzt $A|_M$ m lokale Eigenvektoren, wobei $m := \#M$, die den Unterraum $l^2(M)$ aufspannen und deren zugehörige Eigenwerte reell sind. Wenn φ Eigenvektor von A im ursprünglichen Sinne ist, d.h. $\varphi|_M$ ist lokaler Eigenvektor von A auf $M = [N]$, dann nennen wir φ einen globalen Eigenvektor.

6.2 Lokalisierung der Eigenvektoren symmetrischer M -Matrizen

Zunächst werden wir, wie in Agmons Methode, die Summe $\sum_{i \in [N]} \lambda_i \varphi_i^2 G_i^2$ für einen nichtnegativen Vektor λ und eine beliebige Diagonalmatrix G abschätzen. Erst später werden wir dann G durch eine geeignete Exponentialfunktion ersetzen. Dazu benötigen wir ausnahmsweise keine λ -Bedingung, sondern nutzen das nachfolgende Lemma.

Im Folgenden bezeichnet $[A, B] = AB - BA$ den *Kommutator* zweier Operatoren A und B .

Lemma 6.2.1. *Seien A, Ψ und G beschränkte selbstadjungierte Operatoren auf dem komplexen Hilbertraum $l^2([N])$, $N \in \mathbb{N}$, oder $l^2(\mathbb{N})$. Kommutieren die Operatoren G und Ψ ,*

d.h. $[G, \Psi] = 0$ und ist u ein Vektor in $l^2([N])$ (oder $l^2(\mathbb{N})$), dann gilt

$$\operatorname{Re}\langle G[\Psi, A]u, G\Psi u \rangle = \frac{1}{2}\langle [[A, G\Psi], G\Psi]u, u \rangle - \frac{1}{2}\langle [[A, G], G]\Psi u, \Psi u \rangle.$$

Beweis. Ausgeschrieben ist

$$[[A, G], G] = (AG - GA)G - G(AG - GA) = AGG + GGA - 2GAG$$

und damit

$$\begin{aligned} \langle [[A, G], G]\Psi u, \Psi u \rangle &= \langle AGG\Psi u, \Psi u \rangle + \langle GGA\Psi u, \Psi u \rangle - 2\langle GAG\Psi u, \Psi u \rangle \\ &= \langle AGG\Psi u, \Psi u \rangle + \langle GA\Psi u, G\Psi u \rangle - 2\langle AG\Psi u, G\Psi u \rangle. \end{aligned}$$

Das erste Skalarprodukt können wir weiter umformen zu

$$\langle AGG\Psi u, \Psi u \rangle = \langle G\Psi u, (AG)^*\Psi u \rangle = \langle G\Psi u, GA\Psi u \rangle = \overline{\langle GA\Psi u, G\Psi u \rangle}.$$

Insgesamt erhalten wir

$$\langle [[A, G], G]\Psi u, \Psi u \rangle = 2\operatorname{Re}\langle GA\Psi u, G\Psi u \rangle - 2\langle AG\Psi u, G\Psi u \rangle.$$

Analog folgt wegen $G\Psi = \Psi G$

$$\langle [[A, G\Psi], G\Psi]u, u \rangle = 2\operatorname{Re}\langle G\Psi Au, G\Psi u \rangle - 2\langle AG\Psi u, G\Psi u \rangle,$$

und damit die Aussage. □

Das Skalarprodukt $\langle [[A, D], D]u, u \rangle$ nimmt eine schöne Form an, wenn $D = \operatorname{diag}(D_1, \dots, D_N)$ eine Diagonalmatrix ist. Seien

$$\begin{aligned} V &= (v_{ij})_{i,j \in [N]} := ADD, & W &= (w_{ij})_{i,j \in [N]} := DDA \\ \text{und } Z &= (z_{ij})_{i,j \in [N]} := DAD. \end{aligned}$$

Durch Nachrechnen überzeugen wir uns, dass $v_{ij} = D_j^2 a_{ij}$, $w_{ij} = D_i^2 a_{ij}$ und $z_{ij} = D_i D_j a_{ij}$ für alle $i, j \in [N]$, d.h.,

$$\left([[A, D], D] \right)_{ij} = v_{ij} + w_{ij} - 2z_{ij} = a_{ij}(D_i^2 - 2D_i D_j + D_j^2) = a_{ij}(D_i - D_j)^2.$$

Damit ergibt sich insgesamt

$$\langle [[A, D], D]u, u \rangle = \sum_{i,j \in [N]} a_{ij} u_i u_j (D_i - D_j)^2 = \sum_{i,j \in [N], i \neq j} a_{ij} u_i u_j (D_i - D_j)^2. \quad (6.1)$$

Ist A eine M -Matrix und u ein nichtnegativer Vektor, so ist (6.1) offensichtlich negativ. Diese Aussage ist immer noch gültig, wenn A eine Z -Matrix ist, wir können unser Resultat also auf diesen Fall erweitern!

Zusammen mit Lemma 6.2.1 haben wir bewiesen, dass

$$\begin{aligned} \langle G[\Psi, A]u, G\Psi u \rangle &\leq 0 - \frac{1}{2}\langle [[A, G], G]\Psi u, \Psi u \rangle \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j \in [N], i \neq j} a_{ij} \Psi_i u_i \Psi_j u_j (G_i - G_j)^2, \end{aligned} \quad (6.2)$$

wenn $G = \operatorname{diag}(G_1, \dots, G_N)$ und $\Psi = \operatorname{diag}(\Psi_1, \dots, \Psi_N)$ $N \times N$ Diagonalmatrizen, A eine symmetrische $N \times N$ Z -Matrix und u ein nichtnegativer $N \times 1$ Vektor ist.

Korollar 6.2.2. Sei A eine $N \times N$ symmetrische Z -Matrix und $D \subseteq [N]$ eine Teilmenge von $[N]$. Ist φ ein lokaler Eigenvektor von A auf $D^C = [N] \setminus D$ zum Eigenwert E , sowie $G = \text{diag}(G_1, \dots, G_N)$ eine reelle Diagonalmatrix und u ein $N \times 1$ Vektor mit nur positiven Einträgen, so gilt

$$\sum_{k \in [N]} \varphi_k^2 G_k^2 \left(\frac{(Au)_k}{u_k} - E \right) \leq -\frac{1}{2} \sum_{i,j \in [N], i \neq j} a_{ij} \varphi_i \varphi_j (G_i - G_j)^2. \quad (6.3)$$

Beweis. Wählen wir $\Psi = \text{diag}(\frac{\varphi_1}{u_1}, \dots, \frac{\varphi_N}{u_N})$ und schreiben $[\Psi, A] = \Psi(A - E\mathbb{I}) - (A - E\mathbb{I})\Psi$, so liefert (6.2)

$$\begin{aligned} \langle G[\Psi, A]u, G\Psi u \rangle &= \langle G\Psi(A - E\mathbb{I})u, G\Psi u \rangle - \langle G(A - E\mathbb{I})\Psi u, G\Psi u \rangle \\ &\leq -\frac{1}{2} \sum_{i,j \in [N], i \neq j} a_{ij} \varphi_i \varphi_j (G_i - G_j)^2. \end{aligned}$$

Da $\varphi = \Psi u$ lokaler Eigenvektor auf D^C ist, gilt $(\Psi u)_k = (G\Psi u)_k = 0$ für alle $k \in D$. Aus den gleichen Gründen gilt $((A - E\mathbb{I})\Psi u)_k = (G(A - E\mathbb{I})\Psi u)_k = 0$ für $k \in D^C$, sodass insgesamt $\langle G(A - E\mathbb{I})\Psi u, G\Psi u \rangle = 0$ folgt. Das verbleibende Skalarprodukt ergibt als Summe ausgeschrieben

$$\begin{aligned} \langle G\Psi(A - E\mathbb{I})u, G\Psi u \rangle &= \sum_{k \in [N]} G_k \Psi_k ((Au)_k - Eu_k) \cdot G_k \varphi_k \\ &= \sum_{k \in [N]} G_k^2 \varphi_k^2 \left(\frac{(Au)_k}{u_k} - E \right). \end{aligned}$$

□

Ungleichung (6.3) ist eine diskrete Version der Ungleichung (5.4)

$$\int_{\Omega} \lambda g^2 \varphi^2 dx \leq \int_{\Omega} \varphi^2 |\nabla g|^2, \quad \Omega \subset \mathbb{R}^n.$$

Und tatsächlich gilt auch in $L^2(\Omega)$

$$-\frac{1}{2} \langle [[-\Delta + V, g], g] \varphi, \varphi \rangle = \int_{\Omega} \varphi^2 |\nabla g|^2 dx.$$

Die diskrete λ -Funktion ist demnach $\lambda_k = \frac{(Au)_k}{u_k} - E$. Wählen wir u so, dass $Au = 1$, dann erhalten wir die altbekannte Form $\lambda_k = \frac{1}{u_k} - E$. Wir können daher aus den Erkenntnissen des letzten Kapitels schließen, dass $k \mapsto \frac{(Au)_k}{u_k}$ das effektive Potential symmetrischer M -Matrizen ist und dass mit Hilfe von $v_i = \left(\frac{(Au)_k}{u_k} - E \right)_+$ eine Abstandsfunktion auf $[N]$ definiert werden kann, die das Verhalten der Einträge auf der Diagonalen widerspiegelt.

Es ist durchaus möglich, dass für nichtnegatives u der Vektor Au nichtpositive Einträge besitzt. Nach Satz 3.2.3 impliziert $Au \geq 0$ zwar $u \geq 0$, die andere Richtung ist im Allgemeinen jedoch nicht wahr.

Um den Kreis zu schließen, wollen wir noch kurz zeigen, dass $A - E$ die λ -Bedingung erfüllt. Nach (6.2) und Lemma 6.2.1 haben wir

$$\begin{aligned} \langle G\Psi Au, G\Psi u \rangle &- \langle GA\Psi u, G\Psi u \rangle \\ &\leq -\frac{1}{2} \langle [[A, G], G] \Psi u, \Psi u \rangle \\ &= -\langle GA\Psi u, G\Psi u \rangle + \langle AG\Psi u, G\Psi u \rangle. \end{aligned}$$

Wählen wir Ψ so, dass $\Psi u = \varphi$ und setzen $G = \mathbb{I}$, dann folgt

$$\begin{aligned} \langle (A - E)\varphi, \varphi \rangle &\geq \langle \Psi Au - E\varphi, \varphi \rangle \\ &= \sum_{i \in [N]} \varphi_i^2 \left(\frac{(Au)_i}{u_i} - E \right). \end{aligned} \quad (6.4)$$

Demnach erfüllt $A - E$ auf $[N] \setminus K_E$ die λ -Bedingung für $\lambda = V$ (vergleiche Definition 6.1.1).

Wir kommen nun zu dem Hauptresultat dieses Abschnitts.

Satz 6.2.3 (Exponentielle Lokalisierung). *Sei A eine symmetrische $N \times N$ Z -Matrix die höchstens Konnektivität W_c mit $W_c \geq 2$ besitzt und sei u ein nicht-negativer $N \times 1$ Vektor. Weiter seien $\bar{E} > 0$ und ρ, v_i und $K_{\bar{E}}$ wie in 6.1.1 definiert. Dann gilt für jede Teilmenge $D \subseteq [N]$ und für jeden beliebigen lokalen Eigenvektor φ von A auf D^c mit Eigenwert $E \leq \bar{E}$ die Ungleichung*

$$\begin{aligned} (\bar{E} - E) \sum_{k \notin K_{\bar{E}}} |\varphi_k|^2 e^{2\alpha\rho(k, K_{\bar{E}} \setminus D)} \\ + \left(1 - \frac{\alpha^2 W_c}{2}\right) \sum_{k \notin K_{\bar{E}}} |\varphi_k|^2 e^{2\alpha\rho(k, K_{\bar{E}} \setminus D)} v_k \\ \leq \frac{W_c}{2} \|\varphi\|^2 \max_{i \in K_{\bar{E}} \setminus D, j \notin K_{\bar{E}} \setminus D} |a_{ij}|, \end{aligned}$$

für beliebiges $0 < \alpha \leq \sqrt{2/W_c}$.

Anmerkung 6.2.4. (i) Sei A der diskrete Hamiltonoperator in Matrix Form. Setzen wir $E = \bar{E}$, $\alpha = \sqrt{1/W_c}$, $D = \emptyset$, und wählen u so, dass $Au = 1$, dann erhalten wir eine typische Abschätzung „à la Agmon“ :

$$\sum_{k \in [N]} |\varphi_k|^2 e^{\frac{2\rho(k, K_{\bar{E}})}{\sqrt{W_c}}} \left(\frac{1}{u_k} - E \right)_+ \leq W_c \|\varphi\|^2 \max_{i \in K_{\bar{E}}, j \notin K_{\bar{E}}} |a_{ij}|.$$

(ii) Setzen wir dagegen $\alpha = \sqrt{2/W_c}$, dann fällt der zweite Summand auf der linken Seite vollständig weg. Können wir zusätzlich sicherstellen, dass $\bar{E} - E \geq \delta$ für ein $\delta > 0$ und dass $\rho(k, K_{\bar{E}} \setminus D) \geq S$ für eine Konstante $S > 0$ für alle $k \in \Omega \subset (K_{\bar{E}} \setminus D)^c$, dann können wir $\|\varphi\|_{l^2(\Omega)}$ abschätzen, was uns ein nützliches Werkzeug im nächsten Abschnitt sein wird.

Beweis. Wir schreiben $K = K_{\bar{E}}$ und $\rho = \rho_\mu$. Da φ ein Eigenvektor von $A|_{D^c}$ ist, ist φ nicht der Nullvektor. Angenommen es wäre $K \setminus D = \emptyset$, d.h. $K \subset D$, dann würde Korollar 6.2.2 mit $G = \mathbb{I}_N$ ergeben, dass

$$\sum_{k \in D^c} \varphi_k^2 \underbrace{\left(\frac{(Au)_k}{u_k} - E \right)}_{> 0 \text{ für } k \notin K} \leq 0,$$

ein Widerspruch. Folglich ist immer $K \setminus D \neq \emptyset$.

Wir wenden Korollar 6.2.2 an mit

$$G_i = 1_{i \notin K \setminus D} e^{\alpha\rho(i, K \setminus D)}, \quad 1_{i \notin K \setminus D} = \begin{cases} 0 & \text{wenn } i \in K \setminus D \\ 1 & \text{sonst} \end{cases}$$

für $i \in [N]$. Zuerst schätzen wir die Differenzen $(G_i - G_j)^2$ ab, die nur dann in die Summe auf der rechten Seite von (6.3) eingehen, wenn $a_{ij} \neq 0$. D.h. wir brauchen nur diesen Fall beachten.

(i) $i, j \in K \setminus D$: Offensichtlich ist $(G_i - G_j)^2 = 0$.

(ii) $i \in K \setminus D, j \notin K \setminus D$ oder $i \notin K \setminus D, j \in K \setminus D$: Im ersten Fall ist $G_i = 0$ und wegen

$$\rho(j, K \setminus D) \leq \rho(j, i) \leq \ln\left(1 + \sqrt{\frac{\sqrt{v_j v_i}}{|a_{ji}|}}\right) = 0$$

ist $G_j = 1$. Folglich $(G_i - G_j)^2 = 1$. Der zweite Fall folgt analog.

(iii) $i, j \notin K \setminus D$: Mit der Dreiecksungleichung und der Bernoullischen Ungleichung für reelle Exponenten gilt

$$\begin{aligned} |e^{\alpha\rho(i, K \setminus D)} - e^{\alpha\rho(j, K \setminus D)}| &\leq |e^{\alpha\rho(i, j) + \alpha\rho(j, K \setminus D)} - e^{\alpha\rho(j, K \setminus D)}| \\ &= e^{\alpha\rho(j, K \setminus D)} \left(e^{\alpha\rho(i, j)} - 1 \right) \\ &\leq e^{\alpha\rho(j, K \setminus D)} \left(\left(1 + \sqrt{\frac{\sqrt{v_i v_j}}{|a_{ij}|}} \right)^\alpha - 1 \right) \end{aligned} \quad (6.5)$$

$$\leq e^{\alpha\rho(j, K \setminus D)} \alpha \sqrt{\frac{\sqrt{v_i v_j}}{|a_{ij}|}}. \quad (6.6)$$

Die gleiche Abschätzung liefert

$$|e^{\alpha\rho(j, K \setminus D)} - e^{\alpha\rho(i, K \setminus D)}| \leq e^{\alpha\rho(i, K \setminus D)} \alpha \sqrt{\frac{\sqrt{v_j v_i}}{|a_{ji}|}}$$

und es folgt

$$(G_i - G_j)^2 \leq \alpha^2 e^{\alpha\rho(j, K \setminus D)} e^{\alpha\rho(i, K \setminus D)} \frac{\sqrt{v_i v_j}}{|a_{ij}|}. \quad (6.7)$$

Insgesamt haben wir für die rechte Seite von (6.3)

$$\begin{aligned} &-\frac{1}{2} \sum_{i, j \in [N], i \neq j} a_{ij} \varphi_i \varphi_j (G_i - G_j)^2 \\ &\leq \frac{\alpha^2}{2} \sum_{i, j \notin K \setminus D: i \neq j; a_{ij} \neq 0} |\varphi_i| |\varphi_j| e^{\alpha\rho(j, K \setminus D)} e^{\alpha\rho(i, K \setminus D)} \sqrt{v_i v_j} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i \in K \setminus D, j \notin K \setminus D \text{ oder } i \notin K \setminus D, j \in K \setminus D; a_{ij} \neq 0} |a_{ij}| |\varphi_i| |\varphi_j|. \end{aligned}$$

Mit der Youngschen Ungleichung ($ab \leq \frac{1}{2}a^2 + \frac{1}{2}b^2$) können wir weiter abschätzen

$$\begin{aligned}
& \sum_{i,j \notin K \setminus D; i \neq j; a_{ij} \neq 0} |\varphi_i| |\varphi_j| e^{\alpha\rho(i, K \setminus D)} e^{\alpha\rho(j, K \setminus D)} \sqrt{v_i v_j} \\
& \leq \sum_{i,j \notin K \setminus D; i \neq j; a_{ij} \neq 0} \left(\frac{1}{2} |\varphi_i|^2 e^{2\alpha\rho(i, K \setminus D)} v_i + \frac{1}{2} |\varphi_j|^2 e^{2\alpha\rho(j, K \setminus D)} v_j \right) \\
& = \sum_{i \notin K \setminus D} \sum_{j \notin K \setminus D; j > i; a_{ij} \neq 0} |\varphi_i|^2 e^{2\alpha\rho(i, K \setminus D)} v_i \\
& = \sum_{i \notin K \setminus D} \#\{j \notin K \setminus D \mid j > i, a_{ij} \neq 0\} |\varphi_i|^2 e^{2\alpha\rho(i, K \setminus D)} v_i \\
& \leq W_c \sum_{i \notin K \setminus D} |\varphi_i|^2 e^{2\alpha\rho(i, K \setminus D)} v_i.
\end{aligned}$$

Analog ergibt sich

$$\sum_{i \in K \setminus D, j \notin K \setminus D \text{ oder } i \notin K \setminus D, j \in K \setminus D; a_{ij} \neq 0} |a_{ij}| |\varphi_i| |\varphi_j| \leq W_c \sup_{i \in K \setminus D, j \notin K \setminus D} |a_{ij}| \sum_{i \in [N]} |\varphi_i|^2.$$

und damit nach Korollar 6.2.2

$$\sum_{k \in [N]} \varphi_k^2 G_k^2 \left(\frac{(Au)_k}{u_k} - E \right) \leq \frac{\alpha^2}{2} W_c \sum_{i \notin K \setminus D} |\varphi_i|^2 e^{2\alpha\rho(i, K \setminus D)} v_i + \frac{1}{2} W_c \max_{i \in K \setminus D, j \notin K \setminus D} |a_{ij}| \|\varphi\|^2.$$

Da φ auf D verschwindet und G_k für $k \in K \setminus D$ verschwindet, ist $G_k \varphi_k = 0$ für $k \in K$. Es folgt

$$\begin{aligned}
\sum_{k \in [N]} \varphi_k^2 G_k^2 \left(\frac{(Au)_k}{u_k} - E \right) &= \sum_{k \notin K} \varphi_k^2 G_k^2 \left(\frac{(Au)_k}{u_k} - E \right) \\
&= \sum_{k \notin K} \varphi_k^2 G_k^2 \left(\bar{E} - E \right) + \sum_{k \notin K} \varphi_k^2 G_k^2 \underbrace{\left(\frac{(Au)_k}{u_k} - \bar{E} \right)}_{> 0 \text{ für } k \notin K} \\
&= (\bar{E} - E) \sum_{k \notin K} \varphi_k^2 e^{2\alpha\rho(k, K \setminus D)} + \sum_{k \notin K} \varphi_k^2 e^{2\alpha\rho(k, K \setminus D)} v_k
\end{aligned}$$

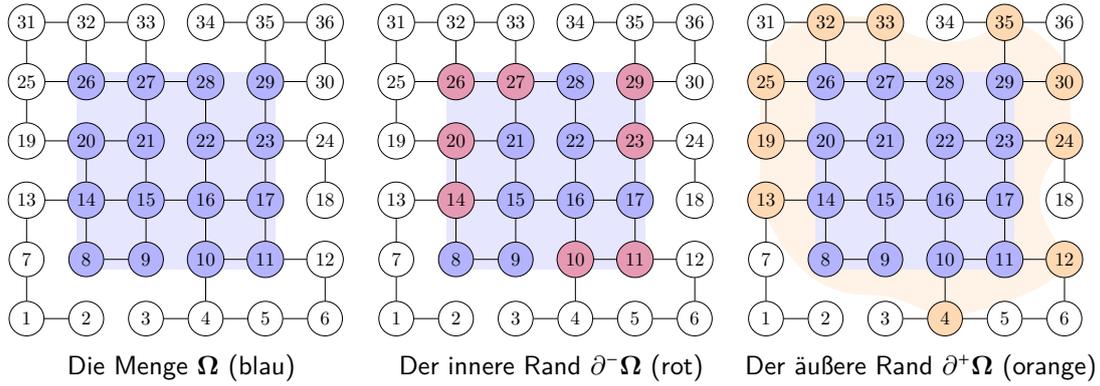
und wir sind fertig. \square

6.3 Diagonalisierung

In den meisten Fällen ist der Potentialtopf $K = K_E$ nicht zusammenhängend, sondern besteht aus mehreren Komponenten K_l . Liegen diese weit genug auseinander (das kann unter anderem dadurch erreicht werden, dass Komponenten, die sehr dicht zusammen liegen, verschmolzen werden), dann können disjunkte Umgebungen Ω_l gefunden werden, sodass $K_l \subset \Omega_l$ und $[N] = \cup_l \Omega_l$. Ist A eine symmetrische M -Matrix, dann fallen ihre Eigenvektoren außerhalb der K_l exponentiell ab. Sei ψ so ein Eigenvektor. Kennen wir $S = \min_l \rho(\Omega_l^c, K_l)$, dann können wir die Norm von ψ auf $\Omega_l \setminus K_l$ (für jedes l) mit Hilfe von Satz 6.2.3 abschätzen (siehe Anmerkung 6.2.4 (ii)). Ist S so groß, dass die Norm von ψ auf dem Rand von Ω_l für jedes l gegen Null geht, dann können wir ψ zerlegen in $\psi = \sum_l \psi|_{\Omega_l}$ und es gilt $A\psi = \sum_l A\psi|_{\Omega_l}$.

Um den Gedankengang weiter zu elaborieren, müssen wir den Rand einer Menge $\Omega \subset [N]$ im Kontext von Matrizen definieren. Wir unterscheiden dabei zwischen einem inneren Rand $\partial^- \Omega$ und einem äußeren Rand $\partial^+ \Omega$. Auf Graphen sind die beiden Mengen leicht zu identifizieren, wie folgendes Beispiel demonstriert.

Beispiel 6.3.1 (innerer/äußerer Rand). *Wir betrachten einen Graphen G (siehe unten) mit 36 Knoten. Es sei $\Omega = \{8, 9, 10, 11, 14, 15, 16, 17, 20, 21, 22, 23, 26, 27, 28, 29\} \subset [36]$. Der innere Rand $\partial^- \Omega$ enthält alle Knoten aus Ω , die mindestens einen Nachbarn besitzen, die nicht in Ω liegt. Also $\partial^- \Omega = \{10, 11, 14, 20, 23, 26, 27, 29\}$. Den äußeren Rand $\partial^+ \Omega$ bilden dann alle Knoten aus Ω^c , die mindestens einen Nachbarn in Ω besitzen, d.h. $\partial^+ \Omega = \{4, 12, 13, 19, 24, 25, 30, 32, 33, 35\}$.*



Wir können jeder symmetrischen M -Matrix einen Graphen zuordnen, dessen Knoten i und j genau dann benachbart sind, wenn $i \neq j$ und $a_{ij} \neq 0$. D.h. in $\partial^- \Omega$ liegen alle $i \in \Omega$, für die es mindestens ein $j \in \Omega^c$ gibt, sodass $a_{ij} \neq 0$. Genauso lässt sich die Definition des äußeren Randes von Ω für die Matrix A formulieren und formal ergibt sich:

$$\begin{aligned} \partial^- \Omega &:= \{k \in \Omega \mid \exists j \notin \Omega : a_{kj} \neq 0\}, \\ \partial^+ \Omega &:= \{j \in \Omega^c \mid \exists k \in \Omega : a_{kj} \neq 0\}. \end{aligned}$$

Die Vereinigung $\partial \Omega = \partial^- \Omega \cup \partial^+ \Omega$ ist der *Rand* von Ω .

Sind die Matrizen $A|_{\Omega_l}$ voneinander entkoppelt, dann ist jeder globale Eigenvektor schon Linearkombination von lokalen Eigenvektoren, die jeweils auf Ω_l leben. Sei also $\varphi = \varphi|_{\Omega_l}$ lokaler Eigenvektor von A zum Eigenwert E auf Ω_l , d.h. $A|_{\Omega_l} \varphi = E\varphi$. Was können wir über den Vektor $A\varphi$ deduzieren? Es gilt $(A\varphi)_i = \sum_{j \in \Omega_l} a_{ij} \varphi_j$ und im Fall $i \in \Omega_l$ wissen wir $(A\varphi)_i = E\varphi_i$. Ist nun $i \notin \Omega_l$, dann gibt es zwei Möglichkeiten:

1. $i \notin \partial^+ \Omega_l$: $(A\varphi)_i = \sum_{j \in \Omega_l} a_{ij} \varphi_j = 0$.
2. $i \in \partial^+ \Omega_l$: $(A\varphi)_i = \sum_{j \in \partial^- \Omega_l} a_{ij} \varphi_j$.

Im Fall $\partial^+ \Omega_l = \partial^- \Omega_l = \emptyset$, ist $A\varphi = E\varphi$, d.h. φ ist bereits globaler Eigenvektor von A und es gilt $A = A|_{\Omega_l} \oplus A|_{\Omega_l^c}$. Dieser Fall ist trivial, aber er zeigt, dass der Betrag der Summe $\sum_{j \in \partial^- \Omega_l} a_{ij} \varphi_j$ für $i \in \partial^+ \Omega_l$ ein Maß für die Entkopplung von $A|_{\Omega_l}$ bietet: Je kleiner die Summe (über alle Ω_l betrachtet), desto besser lässt sich A diagonalisieren. Es wird das Unterfangen des Beweises zu Satz (6.3.3) sein, eine obere Schranke für diese Summe zu finden.

Wir haben im Verlauf unserer Überlegungen einige Bedingungen an die Umgebungen Ω_l gestellt, die wir noch einmal kurz und bündig zusammen fassen wollen.

Hypothese 6.3.2. [Umgebungshypothese] Es gibt ein $S > 0$, eine Partition $K = \cup_l K_l$ von K in disjunkte Töpfe K_l und Umgebungen $\Omega_l \supset K_l$ zu jedem K_l , die folgende Eigenschaften erfüllen:

(i) Die Umgebungen Ω_l sind alle disjunkt.

(ii) Die Umgebungen Ω_l enthalten die S -Umgebung von K_l , somit gilt $\rho(\Omega_l^C, K_l) \geq S$.

(iii) Für jedes l gilt $\rho(\partial^- \Omega_l, K_l) \geq S$.

Eigenschaft (ii) und (iii) zusammengenommen fordern, dass $\rho(\partial \Omega_l, K_l) \geq S$.

Zuletzt müssen wir noch etwas Notation einführen. Es sei A eine symmetrische (reelle) M -Matrix und ψ^j ein vollständiges System orthonormaler (globaler) Eigenvektoren von A auf $[N]$ mit zugehörigen Eigenwerten λ_j . Es sei $\Psi_{(a,b)}$ die orthogonale Projektion in $l^2([N])$ mit $\text{Ran}(\Psi_{(a,b)}) = \text{Span}\left\{\psi^j \mid \lambda_j \in (a,b)\right\}$. Analog dazu sei $\varphi^{l,j}$ für festes l ein vollständiges System orthonormaler lokaler Eigenvektoren von A auf Ω_l mit zugehörigen Eigenwerten $\mu_{l,j}$. Hier ist $\Phi_{(a,b)}$ die orthogonale Projektion mit $\text{Ran}(\Phi_{(a,b)}) = \text{Span}\left\{\varphi^{l,j} \mid \mu_{l,j} \in (a,b)\right\}$.

Satz 6.3.3. [Entkopplung der $A|_{\Omega_l}$] Angenommen Hypothese 6.3.2 sei erfüllt. Wählen wir $\delta > 0$ beliebig und ist $\varphi = \varphi^{l,j}$ einer der lokalen Eigenvektoren zum Eigenwert $\mu = \mu_{l,j}$ mit $\mu \leq \bar{E} - \delta$, so gilt

$$\|\varphi - \Psi_{(\mu-\delta, \mu+\delta)}\varphi\|^2 \leq \frac{W_c^2}{\delta^3} \max_{i,j \in [N]} |a_{ij}|^3 e^{-\frac{2S}{\sqrt{W_c}}} \|\varphi\|^2. \quad (6.8)$$

Analog gilt, wenn $\psi = \psi^j$ einer der globalen Eigenvektoren mit Eigenwert $\lambda = \lambda_j \leq \bar{E} - \delta$ ist

$$\|\psi - \Phi_{(\lambda-\delta, \lambda+\delta)}\psi\|^2 \leq \frac{W_c^2}{\delta^3} \max_{i,j \in [N]} |a_{ij}|^3 e^{-\frac{2S}{\sqrt{W_c}}} \|\psi\|^2. \quad (6.9)$$

Beweis. Die linke bzw. rechte Seite von (6.8) bilden jeweils eine untere bzw. obere Schranke für die Norm des residualen Vektors

$$r := A\varphi - \mu\varphi = (A - A|_{\Omega_l})\varphi.$$

Wir wissen, dass der Eintrag $(A - A|_{\Omega_l})_{ij}$ immer dann gleich Null ist, wenn i und j in Ω_l liegen. Damit ergibt sich für die Einträge von r

$$\begin{aligned} ((A - A|_{\Omega_l})\varphi)_i &= \begin{cases} \sum_{j \in [N]} a_{ij}\varphi_j & \text{für } i \notin \Omega_l \\ \sum_{j \notin \Omega_l} a_{ij}\varphi_j & \text{für } i \in \Omega_l \end{cases} \stackrel{*}{=} \begin{cases} \sum_{j \in \Omega_l} a_{ij}\varphi_j & \text{für } i \notin \Omega_l \\ 0 & \text{für } i \in \Omega_l. \end{cases} \\ &\stackrel{**}{=} \begin{cases} \sum_{j \in \partial^- \Omega_l} a_{ij}\varphi_j & \text{für } i \in \partial^+ \Omega_l \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \end{aligned}$$

Bei (*) haben wir verwendet, dass $\varphi_j = 0$ für $j \notin \Omega_l$; (**) ergibt sich aus der Definition des äußeren und inneren Randes von Ω_l . Damit gilt

$$\|r\|_{l^2([N])} = \|r\|_{l^2(\partial \Omega_l)} \leq \|A'\|_{\mathcal{L}(l^2(\partial \Omega_l))} \|\varphi\|_{l^2(\partial \Omega_l)}$$

mit $A' := A - A|_{\Omega_l}$. Wegen

$$\sum_{j \in \partial\Omega_l} \left| \sum_{i \in \partial\Omega_l} a'_{lp} a'_{lj} \right| \leq \max_{i,j \in [N]} |a_{ij}|^2 \sum_{j \in \partial\Omega_l} 1 \leq W_c \max_{i,j \in [N]} |a_{ij}|^2,$$

wissen wir mit Lemma 3.1.8, dass

$$\|A'\|_{\mathcal{L}(l^2(\partial\Omega_l))} \leq \sqrt{W_c} \max_{i,j \in [N]} |a_{ij}|.$$

$\|\varphi\|_{l^2(\partial\Omega_l)}$ können wir mit Hilfe von Satz 6.2.3 abschätzen: setzen wir dort $\alpha = \sqrt{\frac{2}{W_c}}$, $E = \mu$, $D = \Omega_l^C$, sodass $K \setminus D = K \cap \Omega_l = K_l$ und $\rho(k, K \setminus D) = \rho(k, K_l) \geq S$ für alle $k \in \partial\Omega_l$ (nach Annahme), so folgt

$$\sum_{k \in \partial\Omega_l} |\varphi_k|^2 \leq e^{-\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{W_c}} \rho(k, K_l)} \frac{1}{E - \mu} \frac{W_c}{2} \|\varphi\| \max_{i \in K_l, j \notin K_l} |a_{ij}| \leq e^{-\frac{2}{\sqrt{W_c}} S} \frac{1}{\delta} \frac{W_c}{2} \|\varphi\| \max_{i,k \in [N]} |a_{ij}|$$

und damit insgesamt

$$\|r\|^2 \leq \frac{1}{\delta} \frac{W_c^2}{2} \max_{i,k \in [N]} |a_{ij}|^3 e^{-\frac{2}{\sqrt{W_c}} S} \|\varphi\|^2.$$

Nun suchen wir eine untere Schranke für $\|r\|^2$. Da $\Psi = \Psi_{(\mu-\delta, \mu+\delta)}$ eine orthogonale Projektion ist, lässt sich jedes Element $k \in l^2([N])$ in die eindeutige Summe $k = k_1 + k_2$ mit $k_1 = \Psi k \in \text{Ran}(\Psi)$ und $k_2 = (I - \Psi)k \in \text{Ker}(\Psi)$ zerlegen. Schreiben wir $\varphi = \varphi_1 + \varphi_2$, dann ergibt sich zusammen mit dem Spektralsatz für symmetrische Matrizen

$$\begin{aligned} \|r\|^2 &= \|(A - \mu)\varphi_1 + (A - \mu)\varphi_2\|^2 \\ &= \left\| \sum_{\lambda_i \in (\mu+\delta, \mu-\delta)} (\lambda_i - \mu) \langle \varphi_1, \psi_i \rangle \psi_i + \sum_{\lambda_i \notin (\mu+\delta, \mu-\delta)} (\lambda_i - \mu) \langle \varphi_2, \psi_i \rangle \psi_i \right\|^2 \\ &= \left\| \sum_{\lambda_i \in (\mu+\delta, \mu-\delta)} (\lambda_i - \mu) \langle \varphi_1, \psi_i \rangle \psi_i \right\|^2 + \left\| \sum_{\lambda_i \notin (\mu+\delta, \mu-\delta)} (\lambda_i - \mu) \langle \varphi_2, \psi_i \rangle \psi_i \right\|^2 \\ &\geq \left\| \sum_{\lambda_i \notin (\mu+\delta, \mu-\delta)} (\lambda_i - \mu) \langle \varphi_2, \psi_i \rangle \psi_i \right\|^2 \\ &= \sum_{\lambda_i \notin (\mu+\delta, \mu-\delta)} (\lambda_i - \mu)^2 |\langle \varphi_2, \psi_i \rangle|^2 \\ &\geq \delta^2 \sum_{\lambda_i \notin (\mu+\delta, \mu-\delta)} |\langle \varphi_2, \psi_i \rangle|^2 \\ &= \delta^2 \|\varphi_2\|^2 \\ &= \delta^2 \|(I - \Psi)\varphi\|^2. \end{aligned}$$

Um (6.9) zu zeigen gehen wir analog vor. Hier definieren wir den residualen Vektor durch

$$\tilde{r} := \sum_l (A|_{\Omega_l} - \lambda \mathbb{I}) \psi|_{\Omega_l} = \sum_l (A|_{\Omega_l} - \mathbb{I}|_{\Omega_l} A) \psi.$$

Die beiden Matrizen $A|_{\Omega_l}$ und $\mathbb{I}|_{\Omega_l} A$ unterscheiden sich nur für solche Einträge, deren zugehöriger Zeilenindex in Ω_l und Spaltenindex nicht in Ω_l liegt. D.h. die Differenz dieser beiden Matrizen enthält nur auf $\partial\Omega_l$ Einträge verschieden von Null und es reicht, wenn wir die Norm von \tilde{r} auf $l^2(\partial\Omega_l)$ betrachten. Die Abschätzung geschieht wie vorher, diesmal setzen wir in Satz 6.2.3 $E = \lambda$, $D = \emptyset$ und nutzen, dass $\rho(k, K) \geq S$ für $k \in \partial\Omega_l$. Für

$\|\sum_l (A|_{\Omega_l} - \mathbb{I}|_{\Omega_l} A)\| = \|(\sum_l A|_{\Omega_l}) - A\|$ erhalten wir mit Lemma 3.1.8 dieselbe obere Schranke wie für $\|A'\|$, sodass insgesamt folgt

$$\|\tilde{r}\|^2 \leq \frac{1}{\delta} \frac{W_c^2}{2} \max_{i,k \in [N]} |a_{ij}|^3 e^{-\frac{2}{\sqrt{W_c}} S} \|\psi\|^2.$$

Die untere Schranke

$$\|\tilde{r}\|^2 \geq \delta^2 \|(\mathbb{I} - \Phi)\psi\|^2$$

folgt wieder mit Hilfe der Zerlegung von $\psi = \psi_1 + \psi_2$ in zueinander komplementäre Vektoren und dem Spektralsatz symmetrischer Matrizen. \square

Wie nah beieinander das Spektrum der Matrix A und das Spektrum der Teilmatrizen $A|_{\Omega_l}$ liegen, bemisst folgender Satz.

Satz 6.3.4. *Wieder setzen wir Hypothese 6.3.2 als gegeben voraus. Sei $\delta > 0$ beliebig aber fest und seien*

$$N(\lambda) := \#\{\lambda_j : \lambda_j \leq \lambda\}; \quad N_0(\mu) := \#\{\mu_{l,j} : \mu_{l,j} \leq \mu\}$$

Eigenwert-Zählfunktionen. Ist $\mu \leq \bar{E}$ und \bar{N} eine natürliche Zahl, sodass

$$\frac{W_c^2}{\delta^3} \max_{i,j \in [N]} |a_{ij}|^3 \bar{N} < e^{\frac{2S}{\sqrt{W_c}}},$$

dann gilt

$$\min(\bar{N}, N_0(\mu - \delta)) \leq N(\mu) \quad \text{und} \quad \min(\bar{N}, N(\mu - \delta)) \leq N_0(\mu) \quad (6.10)$$

Wir erinnern daran, dass die Eigenwerte einer nichtsingulären M -Matrix alle positiv sind (Satz 3.2.2).

Beweis. Der Rang der orthogonalen Projektion $\Phi_{(0,\mu)}$,

$$\Phi_{(0,\mu)}\psi = \sum_{\mu_{l,j} < \mu} \langle \psi, \varphi^{l,j} \rangle \varphi^{l,j},$$

entspricht der Anzahl an Eigenwerten $\mu_{l,j}$, die kleiner als μ sind, denn die zugehörigen lokalen Eigenvektoren sind alle linear unabhängig. D.h. $\text{rg}(\Phi_{(0,\mu)}) = N_0(\mu)$, falls μ selbst kein lokaler Eigenwert ist bzw. $\text{rg}(\Phi_{(0,\mu)}) = N_0(\mu) - 1$ falls μ lokaler Eigenwert ist. Sei nun $p := \min(\bar{N}, N(\mu - \delta))$. Können wir zeigen, dass $\Phi_{(0,\mu)}$ injektiv auf einem p -dimensionalen Unterraum von $l^2([N])$ ist, so folgt $N_0(\mu) \geq \text{rg}(\Phi_{(0,\mu)}) \geq p$ und damit die zweite Aussage von (6.10). Wegen $p \leq N(\mu - \delta)$ finden wir p (globale) Eigenvektoren ψ^1, \dots, ψ^p von A mit zugehörigen Eigenwerten $\lambda_1 \leq \mu - \delta, \dots, \lambda_p \leq \mu - \delta$. Demnach gilt $(\lambda_k - \delta, \lambda_k + \delta) \subset (0, \mu)$ für $1 \leq k \leq p$ und wir können mit (6.9) abschätzen

$$\begin{aligned} \|\psi^k - \Phi_{(0,\mu)}\psi^k\|^2 &= \sum_{\mu_{l,j} \notin (0,\mu)} |\langle \psi^k, \varphi^{l,j} \rangle|^2 \\ &\leq \sum_{\mu_{l,j} \notin (\lambda_k - \delta, \lambda_k + \delta)} |\langle \psi^k, \varphi^{l,j} \rangle|^2 \\ &= \|\psi^k - \Phi_{(\lambda_k - \delta, \lambda_k + \delta)}\psi^k\|^2 \\ &\leq \frac{W_c^2}{\delta^3} \max_{i,j \in [N]} |a_{ij}|^3 e^{-\frac{2S}{\sqrt{W_c}}}. \end{aligned}$$

Damit gilt für jede nicht-triviale Linearkombination $\psi = \sum_{j=1}^p \alpha_j \psi^j$

$$\|\psi - \Phi_{(0,\mu)}\psi\| \leq \sum_{j=1}^p |\alpha_j| \|\psi^j - \Phi_{(0,\mu)}\psi^j\| \leq \left(\frac{W_c^2}{\delta^3} \max_{i,j \in [N]} |a_{ij}|^3 e^{-\frac{2S}{\sqrt{W_c}}} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{j=1}^p |\alpha_j|.$$

Mit der Youngschen Ungleichung folgt

$$\begin{aligned} \left(\sum_{j=1}^p |\alpha_j| \right)^2 &= \sum_{j,i=1}^p |\alpha_j| |\alpha_i| \leq \sum_{j,i=1}^p \frac{1}{2} |\alpha_j|^2 + \frac{1}{2} |\alpha_i|^2 = \frac{p}{2} \sum_{j=1}^p |\alpha_j|^2 + \frac{p}{2} \sum_{i=1}^p |\alpha_i|^2 = p \sum_{j=1}^p |\alpha_j|^2 \\ &= p \|\psi\|^2 \end{aligned}$$

und somit

$$\begin{aligned} \|\psi - \Phi_{(0,\mu)}\psi\| &\leq \left(\frac{W_c^2}{\delta^3} \max_{i,j \in [N]} |a_{ij}|^3 e^{-\frac{2S}{\sqrt{W_c}}} \right)^{\frac{1}{2}} p^{\frac{1}{2}} \|\psi\| \\ &\leq \left(\frac{W_c^2}{\delta^3} \max_{i,j \in [N]} |a_{ij}|^3 e^{-\frac{2S}{\sqrt{W_c}}} \bar{N} \right)^{\frac{1}{2}} \|\psi\| \\ &< \|\psi\|. \end{aligned}$$

Gäbe es ein $\psi \in \text{Span}(\psi^1, \dots, \psi^p)$, $\psi \neq 0$ mit $\Phi_{(0,\mu)}\psi = 0$, so müsste $\|\psi\| < \|\psi\|$ gelten, ein Widerspruch. Also ist $\Phi_{(0,\mu)}$ auf dem p -dimensionalen Aufspann der Eigenvektoren ψ^1, \dots, ψ^p injektiv und folglich $N_0(\mu) \geq p$.

Für die erste Aussage von (6.10) betrachten wir den Operator $\Psi_{(0,\mu)}$, dessen Rang $N(\mu)$ bzw. $N(\mu) - 1$ entspricht und können ganz analog seine Injektivität auf dem Aufspann von $p := \min(\bar{N}, N_0(\mu - \delta))$ lokalen Eigenvektoren $\varphi^{l,j}$ mit zugehörigen Eigenwerten $\mu_{l,j} \leq \mu$ zeigen. \square

6.4 Ausblick

Ein spannender nächster Schritt wäre, die Resultate auf unendliche Graphen zu erweitern. Die Hauptschwierigkeit bestünde darin, sicherzustellen, dass der Hamiltonoperator selbstadjungiert und das Spektrum diskret wäre. Natürlich müsste auch die Positivität der Eigenwerte und die Monotonie geprüft werden. Es würde sich anbieten, unendliche, symmetrische M -Matrizen zu betrachten und durch sie einen Operator auf $l^2(\mathbb{N})$ zu definieren. Sei M so eine Matrix mit $\sum_{i=1}^{\infty} |m_{ik}|^2 < \infty$ für jedes $k \in \mathbb{N}$, dann können wir einen linearen Operator M auf den Basisvektoren e_k definieren durch

$$M e_k = (m_{ik})_{i \in \mathbb{N}} \in l^2(\mathbb{N}), \quad k \in \mathbb{N}.$$

Die Linearität erlaubt, dass wir diesen Operator auf $\text{Span}\{e_k \mid k \in \mathbb{N}\}$ erweitern. Damit ist M ein symmetrischer, dicht definierter Operator auf $l^2(\mathbb{N})$ und man kann ihn nun auf selbstadjungierte Erweiterungen untersuchen (dieses Vorgehen ist inspiriert durch [Moh82, Abschnitt 2]). Diese Überlegungen haben eine direkte Konsequenz: Ist M die Laplace Matrix eines unendlichen Graphen G ohne gewichtete Kanten, dann kann $\sum_{i=1}^{\infty} |m_{ik}|^2 < \infty$ nur dann erfüllt werden, wenn alle Knoten von G endlichen Grad haben.

Eine weitere Frage ist, ob sich die Abschätzung in Satz 6.2.3 für Eigenvektoren des Hamiltonoperators auf endlichen Graphen noch verbessern ließe, wenn man diesen nicht als

Matrix formulierte, denn durch die Modellierung in $l^2([N])$ gehen einige schöne Eigenschaften des diskreten Laplace Operators verloren. Mit Hilfe der Graphentheorie können wir Identität (5.5) auch für den diskreten Hamiltonoperator herleiten, was wir hier abschließend demonstrieren möchten. Alle nachfolgenden Definitionen stammen aus [Dod84, Abschnitt 1] und [SRV05, S. 27].

Sei G ein endlicher, gerichteter Graph mit Knotenmenge V und Kantenmenge E . Sei $C^0(G)$ der Raum aller Funktionen, die V nach \mathbb{R} abbilden und $C^1(G)$ der Raum aller Funktionen φ , die E nach \mathbb{R} abbilden und die

$$\varphi([v, w]) = -\varphi([w, v])$$

erfüllen, wobei $[v, w]$ die gerichtete Kante mit Startknoten v und Endknoten w bezeichnet. Für $f_1, f_2 \in C^0(G)$ und $\varphi_1, \varphi_2 \in C^1(G)$ definieren wir das Skalarprodukt durch

$$\langle f_1, f_2 \rangle = \sum_{v \in V} f_1(v) f_2(v) \quad \text{und} \quad \langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle = \sum_{e \in E} \varphi_1(e) \varphi_2(e).$$

Im Fall eines ungerichteten Graphen G legen wir zu Beginn für jede Kante eine Richtung fest und können dann alle Überlegungen übertragen.

Der Operator

$$d(f)([v, w]) = f(w) - f(v)$$

bildet $C^0(G)$ auf $C^1(G)$ ab und

$$d^*(\varphi)(v) = \sum_{w \sim v} \varphi([w, v])$$

ist die zugehörige Adjungierte, d.h. $\langle df, \varphi \rangle_{C^1(G)} = \langle f, d^* \varphi \rangle_{C^0(G)}$. Zur Erinnerung: Es gilt $w \sim v$, wenn entweder $[v, w] \in E$ oder $[w, v] \in E$. Es ist

$$-\Delta f = d^* df,$$

wie ein Vergleich mit (5.7) schnell zeigt. Also $\langle -\Delta f, g \rangle = \langle df, dg \rangle$. Nun lässt sich eine Art Leibniz Regel für d formulieren. Durch

$$(f * \varphi)([v, w]) = \frac{f(v) + f(w)}{2} \varphi([v, w])$$

definieren wir eine Verknüpfung $*$: $C^0(G) \times C^1(G) \rightarrow C^1(G)$ und es gilt

$$d(fg)([v, w]) = (f * dg)([v, w]) + (g * df)([v, w]).$$

Wir können damit Identität (5.5) nachstellen. Nach der eingeführten Leibniz Regel ist

$$df \cdot d(g^2 f) = df(g^2 * df + f * d(g^2)) = df(g^2 * df + f * 2(g * dg))$$

und

$$d(fg)^2 = (f * dg + g * df)^2 = (f * dg)^2 + 2(f * dg)(g * df) + (g * df)^2.$$

Eine kurze Rechnung zeigt

$$df(f * 2(g * dg)) = 2(f * dg)(g * df),$$

also

$$df \cdot d(g^2 f) = d(fg)^2 - (f * dg)^2 - (g * df)^2 + df(g^2 * df).$$

Die rechte Seite lässt sich durch elementare Rechenumformungen und mit Hilfe der binomischen Formel weiter vereinfachen - die Zwischenschritte ersparen wir uns hier - sodass wir schließlich

$$df \cdot d(g^2 f)([v, w]) = d(fg)^2([v, w]) - dg^2([v, w])f(w)f(v)$$

erhalten. Nun ist es kein weiter Weg mehr bis zu (5.5). Sei $u \in C^0(G)$ Lösung von $-\Delta u + Vu = 1$ (die Existenz setzen wir als gegeben voraus), dann gilt für $\nu \in C^0(G)$

$$\langle -\Delta u + Vu, \frac{\nu^2}{u} \rangle = \langle du, d(\frac{\nu^2}{u}) \rangle + \langle Vu, \frac{\nu^2}{u} \rangle = \langle 1, \frac{\nu^2}{u} \rangle.$$

Setzen wir in unseren obigen Überlegungen $g = \nu/u$ und $f = u$, dann ergibt sich

$$\sum_{x \in V} \left(\sum_{y: [x, y] \in E} d\nu^2([x, y]) - d\left(\frac{\nu}{u}\right)^2([x, y])u(y)u(x) \right) + V(x)\nu^2(x) = \sum_{x \in V} \frac{\nu^2(x)}{u(x)},$$

demnach

$$\langle (-\Delta + V)\nu, \nu \rangle = \sum_{x \in V} \left(\frac{\nu^2(x)}{u(x)} + u(x) \sum_{y: [x, y] \in E} d\left(\frac{\nu}{u}\right)^2([x, y])u(y) \right).$$

Von hier aus könnte man versuchen, Satz 6.2.3 für endliche Graphen mit einer besseren oberen Schranke herzuleiten.

Literaturverzeichnis

- [ADFJM19] D. N. Arnold, G. David, M. Filoche, D. Jerison and S. Mayboroda. Localization of eigenfunctions via an effective potential. *Comm. Part. Diff. Eq.*, vol. 44, S. 1186-1216, 2019.
- [Agm82] S. Agmon. *Lectures on exponential decay of solutions of second-order elliptic equations: bounds on eigenfunctions on N-body Schrödinger operators*. Princeton University Press, Princeton, NJ, University of Tokyo Press, Tokyo, 1982.
- [Dod84] J. Dodziuk. Difference equations, isoperimetric inequality and transience of certain random walks. *Trans. of the Am. Math. Soc.*, vol. 284, S. 787-794, 1984.
- [Eva10] L. C. Evans. *Partial Differential Equations (Second Edition)*. American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 2010.
- [Fey39] R. P. Feynman. Forces in molecules. *Physical Review*, vol. 56, S. 340-343, 1939.
- [FM12] M. Filoche and S. Mayboroda. Universal mechanisms for anderson and weak localization. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, issue 109, S.14761-14766., 2012.
- [FP62] M. Fiedler and V. Ptak. On matrices with non-positiv off-diagonal elements and positive principal minors. *Czech. Math. J.*, vol. 12, S. 382-400, 1962.
- [Fro12] G. Frobenius. Über Matrizen aus nicht negativen Elementen. *Sitz.-ber. d. Königl. Preuß. Akad. d. Wiss., Berlin*, S. 456-477, 1912.
- [HS96] P. D. Hislop and I. M. Sigal. *Introduction to Spectral Theory: With applications to Schrödinger Operators*. Springer New York, NY, 1996.
- [MAT22] MATLAB. *version 9.12.0.188430 (R2022a)*. The MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, 2022.
- [Mer94] R. Merris. Laplacian matrices of graphs: A survey. *Lin. Alg. and its Appl.*, vol. 198, S. 143-176, 1994.
- [MFT21] S. Mayboroda, M. Filoche and T. Tao. The effective potential of an M-matrix. *J. Math. Phys.*, vol. 62, issue 4, 2021.
- [MK22] D. Mugnolo and J. Kerner. *Partielle Differentialgleichungen*. FernUniversität in Hagen, Kurstextversion SS2022.
- [MKL22] D. Mugnolo, J. Kerner and H. Laasri. *Funktionalanalysis (Skript)*. FernUniversität in Hagen, Kurstextversion WS2021/22.
- [Moh82] B. Mohar. The spectrum of an infinite graph. *Lin. Alg. and its Appl.*, Vol. 48, S. 245-256, 1982.

- [O’C73] A. J. O’Conner. Exponential decay of bound state wave functions. *Commun. Math. Phys.*, vol. 32, S.319-340, 1973.
- [Per60] A. Persson. Bounds for the discrete part of the spectrum of a semi-bounded schrödinger operator. *Mathematica Scandinavica*, vol. 8, S. 142-153, 1960.
- [Ple77] R. J. Plemmons. M-matrix Characterizations. I - nonsingular M-matrices. *Lin. Alg. and its Appl.*, vol. 18, S.175-188, 1977.
- [RS87a] M. Reed and B. Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics, vol. II: Fourier Analysis, Self-Adjointness*. Academic Press Inc., 1987.
- [RS87b] M. Reed and B. Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics, vol. IV: Analysis of Operators*. Academic Press Inc., 1987.
- [Rud91] W. Rudin. *Functional Analysis (Second Edition)*. McGraw-Hill, Inc., 1991.
- [Sch11] I. Schur. Bemerkung zur Theorie der beschränkten Bilinearformen mit unendlich vielen Veränderlichen. *J. für die reine und angew. Math.*, Band 140, S. 1-28, 1911.
- [Sch61] J. Schröder. Lineare Operatoren mit positiver Inversen. *Arch. Rational Mech. Anal.* 8, S. 408-434, 1961.
- [Sim74] B. Simon. Pointwise bounds on eigenfunctions and wave packets in n -body quantum systems. I. *Proc. of the Amer. Math. Soc.*, vol. 42, S.395-401, 1974.
- [Son20] S. B. Sontz. *An Introductory Path to Quantum Theory: Using Mathematics to Understand the Ideas of Physics*. Springer, 2020.
- [SRV05] M. Salvatori, M. Rigoli and M. Vignati. Strongly subharmonic functions, graphs, and their asymptotic growth. *Math. Ann.*, vol. 331, S. 21-39, 2005.
- [SS92] P. W. Sy and T. Sunada. Discrete schrödinger operators on a graph. *Nagoya Math. J.*, vol. 125, S. 141-150, 1992.
- [Tay85] A. E. Taylor. *Introduction to Functional Analysis*. John Wiley & Sons., Inc., New York, Chapman & Hall, Ltd., London, 1985.
- [Tes09] G. Teschl. *Mathematical Methods in Quantum Mechanics: With applications to Schrödinger Operators (Second Edition)*. American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 2009.
- [vD21] P. van Dongen. *Klassische Mechanik: Von der Newton’schen Mechanik zur Relativitätstheorie in drei Postulaten*. Springer Spektrum, 2021.

Selbstständigkeitserklärung

Name: Anna Liza Schonlau

Matrikel-Nr.: 9794247

Fach: Bachelorstudiengang Mathematik

Modul: Bachelorarbeit

Thema: Das effektive Potential von M -Matrizen.

Ich erkläre, dass ich die Bachelorarbeit selbstständig und ohne unzulässige Inanspruchnahme Dritter verfasst habe. Ich habe dabei nur die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet und die aus diesen wörtlich oder sinngemäß entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht. Die Versicherung selbstständiger Arbeit gilt auch für enthaltene Zeichnungen, Skizzen oder graphische Darstellungen. Die Arbeit wurde bisher in gleicher oder ähnlicher Form weder derselben noch einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt und auch noch nicht veröffentlicht. Mit der Abgabe der elektronischen Fassung der endgültigen Version der Arbeit nehme ich zur Kenntnis, dass diese mit Hilfe eines Plagiatserkennungsdienstes auf enthaltene Plagiate geprüft werden kann und ausschließlich für Prüfungszwecke gespeichert wird.

Datum:

Unterschrift: