Renormierungstransformationen

Prof. Dr. Volker Bach

Technische Universität Braunschweig
Sommersemester 2021

19.07.2021

Inhaltsverzeichnis

Überblick über die Vorlesung

Die hier ausgearbeitete Vorlesung (4 SWS VL + 2 Uebg, 10 LP) über Renormierungstransformationen wird als Vertiefung der Funktionalanalysis angeboten.

Mit Renormierungstransformationen kann man gewisse mathematische *Gleichungen in vielen Variablen* durch geeignet gewählte Projektionen in eine sogenannte *effektive Gleichung* in wenigen Variablen umwandeln. Dies hat typischerweise den Preis, dass die effektive Gleichung eine komplizierte Struktur besitzt und insbesondere nichtlinear ist, selbst wenn die Ausgangsgleichung (in vielen Variablen) linear ist. Eine typische solche Projektion stellt die Feshbach-Schur-Abbildung aus der Vorlesung zur Linearen Algebra 2 dar.

Eine solche Modellreduktion ist freilich zentrales Element vieler Methoden, aber Renormierungstransformationen sind so aufgebaut, dass die effektive Gleichung als vereinfachte Form der Ausgangsgleichung betrachtet und die Renormierungstransformation nochmals darauf angewandt werden kann, was zu einer weiteren Vereinfachung führt. In einigen Fällen kann diese Anwendung der Renormierungstransformation beliebig oft iteriert werden, was im Idealfall am Ende auf eine trivial lösbare effektive Gleichung führt. In der theoretischen Physik ist die sogenannte Renormierungsgruppe *die* Methode zur Analyse wechselwirkender Vielteilchensysteme.

Hier nun ein grober Überblick über die Kapitel des kommenden Semesters:

1. Selbstadjungiertheit und Spektralsatz: Selbstadjungierte lineare Operatoren sind die zentralen mathematischen Objekte der Quantenphysik. Hier werden einige wesentliche Tatsachen über sie gesammelt. Auch die in späteren Kapiteln wichtige *zweite Quantisierung* wird hier in Grundzügen vorgestellt.

2. Diskretes und essenzielles Spektrum: Die in diesem Kapitel diskutierten komplementären Begriffe des diskreten und des essenziellen Spektrums sind für diese Vorlesung von großer Bedeutung. Das *diskrete Spektrum* eines linearen Operators besteht aus seinen isolierten Eigenwerten endlicher Multiplizität. Für diese wurde eine sehr effektive Störungstheorie entwickelt, s.u. Renormierungstransformationen erlauben die Analyse von (wichtigen!) Teilen des essenziellen Spektrums, das aus alles spektralen Punkten außerhalb des diskreten Spektrums liegt, also Häufungspunkte des Spektrums oder Eigenwerte unendlicher Multiplizität.

3. Kato-Störungstheorie: T. Kato hat als erster vor siebzig Jahren die Bedeutung des Begriffs der *relativen Beschränkheit* erkannt. Die daraufs entwickelte Störungstheorie ist die wichtigste Methode zum Beweis von Halbbeschränktheit und Selbstadjungiertheit physikalischer Hamiltonoperatoren.

4. Dunford-Cauchy-Integral und die Störungstheorie isolierter Eigenwerte: Eine der schlagkräftigsten Methoden zur Entwicklung von gestörten *isolierten* Eigenwerten von Operatoren in Potenzreihen der Kopplungskonstanten resultiert aus der Übertragung von

Resultaten der Funktionentheorie über holomorphe komplexwertige Funktionen $\mathbb{C} \to \mathbb{C}$ auf holomorphe Funktionen $\mathbb{C} \to X$ mit Werten in einem komplexen Banachraum X. Diese Methode wird hier skizziert.

5. Feshbach-Schur-Abbildung und Störungstheorie isolierter Eigenwerte: In diesem Kapitel führen wir die Feshbach-Schur-Abbildung ein und gewinnen aus ihr eine weitere Methode zur Entwicklung von gestörten *isolierten* Eigenwerten von Operatoren in Potenzreihen der Kopplungskonstanten.
6. Fockraum und zweite Quantisierung: Für die moderne theoretische Physik ist die Formulierung der Dynamik auf dem Fockraum mit Hilfe der sogenannten *zweiten Quantisierung* unentbehrlich. Leider liegen diese Konstruktionen nach wie vor außerhalb des Standardcurriculums der Mathematikstudiengänge, und wir holen sie hier nach.
7. Pauli-Fierz-Modelle und Spin-Boson-Modell: Hier werden Pauli-Fierz-Modelle vorgestellt, und ihre Bedeutung in der Quantenphysik wird gewürdigt. Der Spezialfall des Spin-Boson-Modells wird besonders diskutiert, weil er in den folgenden Kapiteln genau analysiert wird. Zur Vorbereitung der eigentlichen Renormierungstransformation werden die Freiheitsgrade hoher Energie durch Anwendung der Feshbach-Schur-Abbildung eliminiert.
8. Die Renormierungsgruppe auf Basis der Feshbach-Schur-Abbildung: In diesem Kapitel wird die Renormierungstransformation auf der Basis der Feshbach-Schur-Abbildung definiert und die zentrale mit ihr verbundene Aussage, die Kontraktivität, bewiesen. Weiterhin wird gezeigt, welche Schlüsse sich daraus mit Hilfe der Isospektralität auf die Spektralanalyse des Spin-Boson-Modells ziehen lassen.
9. Fermionische Vielteilchenmodelle: In der zweiten Hälfte des Semesters wird eine andere Renormierungstransformation diskutiert, die vor allem für die Analyse der physikalischen Eigenschaften von Systemen der Festkörperphysik von großer Bedeutung ist. Wir folgen dabei der mathematisch präzisen Formulierung Manfred Salmhofers [**?**, **?**].

I. Selbstadjungiertheit und Spektralsatz

Wir beginnen ganz am Anfang und rufen einige uns aus der Anfängervorlesung zur linearen Algebra bekannten Fakten in Erinnerung:
Seien $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$ der mit dem unitären Skalarprodukt $\langle\varphi|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N \overline{\varphi_n}\psi_n$ ausgestattete N-dimensionale komplexe Hilbert-Raum und $H = (H_{k,\ell})_{k,\ell=}^N = H^* \in \mathfrak{M}_{N\times N}(\mathbb{C})$ eine selbstadjungierte komplexe $N \times N$-Matrix, also $H_{\ell,k} = \overline{H_{k,\ell}}$. Dann gibt es eine Orthonormalbasis $\{\varphi_j\}_{j=1}^N \subseteq \mathbb{C}^N$ aus Eigenvektoren von H mit zugehörigen Eigenwerten λ_j, die alle reell sind, also

$$\forall\, k,j \in \mathbb{Z}_1^N : \quad \langle\varphi_k|\varphi_j\rangle \;=\; \delta_{k,j}\;, \quad [H\varphi]_j \;=\; \lambda_j\varphi_j\;, \quad \lambda_j \in \mathbb{R}\,. \tag{I.1}$$

Damit wird

$$H \;=\; \sum_{j=1}^N \lambda_j\, |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|\,, \tag{I.2}$$

wobei $|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|$ die orthogonale Projektion auf φ_j notiert.
Ist $p \in \mathbb{C}[x]$ ein komplexes Polynom der Form $p(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2 + \ldots + \alpha_M x^M$, so ist $p(H) \in \mathfrak{M}_{N\times N}(\mathbb{C})$ definiert durch

$$p(H) \;=\; \alpha_0 + \alpha_1 H + \alpha_2 H^2 + \ldots + \alpha_M H^M\,. \tag{I.3}$$

Ein *Funktionalkalkül* ist eine Vorschrift, mit der sich (I.3) für bestimmte Klassen von linearen Operatoren auf allgemeinere Funktionen, die eine geringere Regularität als Polynome besitzen, fortsetzen lässt. Die große Bedeutung selbstadjungierter Matrizen und allgemeiner selbstadjungierter Operatoren liegt in dem für sie gültigen *Spektralsatz*, der eine sinnvolle Definition von $f(H)$ erlaubt, wenn $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ auch nur (Lebesgue-)messbar und beschränkt ist. Im Falle, dass H die obige selbstadjungierte $N \times N$-Matrix ist, ist dieser Funktionalkalkül durch

$$f(H) \;:=\; \sum_{j=1}^N f(\lambda_j)\, |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j| \tag{I.4}$$

definiert. Wählen wir beispielsweise $f(\lambda) := e^{-it\lambda}$, so erhalten wir die Matrixexponentialfunktion,

$$\exp(-itH) \;=\; \sum_{j=1}^N e^{-it\lambda_j}\, |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|\,, \tag{I.5}$$

und es ist eine sinnvolle Übungsaufgabe zu zeigen, dass (I.5) mit der uns aus der Theorie der gewöhnlichen Differenzialgleichungen bekannte Definition $e^{-itH} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-it)^k}{k!} H^k$ übereinstimmt.

Tatsächlich ist (I.1)-(I.3) eine Form des Spektralsatzes, den wir nun in einer anderen Form präsentieren. Wir setzen $\Lambda_{k,j} := \langle e_k | \varphi_j \rangle = [\varphi_j]_k$, wobei $[e_k]_\ell := \delta_{k,\ell}$ der k. kanonische Basisvektor in $\mathbb{C}^N$ ist. Wir beobachten, dass $\Lambda \in \mathfrak{M}_{N\times N}(\mathbb{C})$ unitär ist, denn für alle $i, j, k, \ell \in \mathbb{Z}_1^N$ sind

$$\big(\Lambda^*\Lambda\big)_{i,j} \;=\; \sum_{k=1}^N \overline{\Lambda_{k,i}}\Lambda_{k,j} \;=\; \sum_{n=1}^N \overline{[\varphi_i]_n}\,[\varphi_j]_n \;=\; \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle \;=\; \delta_{i,j}\;, \tag{I.6}$$

$$\big(\Lambda\Lambda^*\big)_{k,\ell} \;=\; \sum_{j=1}^N \Lambda_{k,j}\overline{\Lambda_{\ell,j}} \;=\; \sum_{j=1}^N [\varphi_j]_k\,\overline{[\varphi_j]_\ell} \;=\; \left(\sum_{j=1}^N |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|\right)_{k,\ell} \;=\; \delta_{k,\ell}\,. \tag{I.7}$$

Nach unitärer Transformation $\Lambda : \mathbb{C}^N \to \mathbb{C}^N$ wird dann also

$$\big(\Lambda^* H \Lambda\big)_{k,\ell} \;=\; \delta_{k,\ell}\,\lambda_\ell\;, \tag{I.8}$$

für alle $k, \ell \in \mathbb{Z}_1^N$.

I.1. Selbstadjungierte lineare Operatoren

Die obigen Beobachtungen lassen sich auf selbstadjungierte Operatoren H, die auf (dichten Unterräumen von) separablen komplexen Hilberträumen $\big(\mathfrak{H}, \langle\cdot|\cdot\rangle\big)$ definiert sind, verallgemeinern. Um dies präzise zu formulieren, brauchen wir noch einige zusätzliche Definitionen.

Definition I.1. Sei $\big(\mathfrak{H}, \langle\cdot|\cdot\rangle\big)$ ein separabler komplexer Hilbert-Raum.

(i) Ein Paar $(A, \mathcal{D})$ heißt **linearer Operator auf $\mathfrak{H}$** :⇔

$$\mathcal{D} \subseteq \mathfrak{H} \text{ ist ein Unterraum, und } A : \mathcal{D} \to \mathfrak{H} \text{ ist linear.} \tag{I.9}$$

In diesem Fall schreiben wir $\boldsymbol{(A, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]}$ und $\mathbf{dom}\boldsymbol{(A) := \mathcal{D}}$.

(ii) Ein linearer Operator $\big(A, \mathrm{dom}(A)\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ heißt **dicht definiert** :⇔

$$\mathrm{dom}(A) \;\subseteq\; \mathfrak{H} \text{ ist dicht (bezüglich } \langle\cdot|\cdot\rangle)\,. \tag{I.10}$$

(iii) Seien $\big(A, \mathrm{dom}(A)\big)$, $\big(B, \mathrm{dom}(B)\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ lineare Operatoren. Der Operator $\big(B, \mathrm{dom}(B)\big)$ heißt **Fortsetzung von $\boldsymbol{\big(A, \mathrm{dom}(A)\big)}$** :⇔

$$\mathrm{dom}(A) \subseteq \mathrm{dom}(B) \quad \text{und} \quad A \;=\; B\big|_{\mathrm{dom}(A)}\,, \tag{I.11}$$

und in diesem Fall schreiben wir $\boldsymbol{\big(A, \mathrm{dom}(A)\big) \subseteq \big(B, \mathrm{dom}(B)\big)}$.

Bemerkungen und Beispiele.

- Sind $\mathfrak{H} := L^2(\mathbb{R})$, $A := \frac{d^k}{dx^k}$, und $\mathrm{dom}(A) := C_0^\infty(\mathbb{R})$, so ist $\mathrm{dom}(A) \subseteq L^2(\mathbb{R})$ ein dichter Teilraum und $\frac{d^k}{dx^k} : C_0^\infty(\mathbb{R}) \to C_0^\infty(\mathbb{R})$. Also ist $\big(\frac{d^k}{dx^k},\, C_0^\infty(\mathbb{R})\big) \in \mathfrak{L}\big[L^2(\mathbb{R}))\big]$ dicht definiert.

- Ist $\big(\mathfrak{H}, \langle\cdot|\cdot\rangle_{\mathfrak{H}}\big)$ ein komplexer Hilbert-Raum, so ist auch $\big(\mathfrak{H} \oplus \mathfrak{H}, \langle\cdot|\cdot\rangle_{\mathfrak{H}\oplus\mathfrak{H}}\big)$ ein komplexer Hilbert-Raum, wobei

$$\big\langle \psi_1 \oplus \psi_2 \,\big|\, \varphi_1 \oplus \varphi_2 \big\rangle_{\mathfrak{H}\oplus\mathfrak{H}} \;:=\; \langle \psi_1|\varphi_1\rangle_{\mathfrak{H}} \;+\; \langle \psi_2|\varphi_2\rangle_{\mathfrak{H}}\,. \tag{I.12}$$

Definition I.2. Seien $\big(\mathfrak{H}, \langle\cdot|\cdot\rangle\big)$ ein separabler komplexer Hilbert-Raum und $(A, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ein linearer Operator auf $\mathfrak{H}$.

(i) Als **Graph von $(A, \mathcal{D})$** bezeichnen wir die Menge

$$\mathcal{G}(A, \mathcal{D}) \;:=\; \Big\{ \psi \oplus A\psi \;\Big|\; \psi \in \mathcal{D} \Big\} \;\subseteq\; \mathfrak{H} \oplus \mathfrak{H}\,. \tag{I.13}$$

(ii) Ist $\mathcal{G}(A, \mathcal{D}) \subseteq \mathfrak{H} \oplus \mathfrak{H}$ abgeschlossen, so nennt man $(A, \mathcal{D})$ **abgeschlossen**.

(iii) Gibt es eine Fortsetzung $(A', \mathcal{D}') \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ von $(A, \mathcal{D})$, so dass

$$\mathcal{G}(A', \mathcal{G}') \;=\; \overline{\mathcal{G}(A, \mathcal{D})}, \tag{I.14}$$

so heißen $(A, \mathcal{D})$ **abschließbar** und $(A', \mathcal{D}')$ **Abschluss von $(A, \mathcal{D})$**.

Definition I.3. Seien $(\mathfrak{H}, \langle\cdot|\cdot\rangle)$ ein separabler komplexer Hilbert-Raum und $(A, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ein dicht definierter linearer Operator auf $\mathfrak{H}$. Wir definieren

$$\mathcal{D}^* \;\equiv\; \mathrm{dom}(A^*) \;:=\; \big\{ \psi \in \mathfrak{H} \;\big|\; \exists \tilde{\psi} \in \mathfrak{H}\ \forall \varphi \in \mathcal{D}:\ \langle \psi | A\varphi \rangle \;=\; \langle \tilde{\psi} | \varphi \rangle \big\}\,, \tag{I.15}$$

und für $\psi \in \mathcal{D}^*$ und $\tilde{\psi} \in \mathfrak{H}$ mit $\langle \psi | A\varphi \rangle = \langle \tilde{\psi} | \varphi \rangle$, für alle $\varphi \in \mathcal{D}$, definieren wir $A^* : \mathcal{D}^* \to \mathfrak{H}$ durch

$$A^*\psi \;:=\; \tilde{\psi}\,. \tag{I.16}$$

$(A^*, \mathcal{D}^*) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ heißt der zu $(A, \mathcal{D})$ **adjungierte Operator**.

Bemerkungen und Beispiele.

- Die Abbildung $\psi \mapsto A^*\psi = \tilde{\psi}$ ist wohldefiniert, d.h. $\tilde{\psi}$ ist durch

$$\forall \varphi \in \mathcal{D}: \qquad \langle \psi | A\varphi \rangle \;=\; \langle \tilde{\psi} | \varphi \rangle \tag{I.17}$$

  eindeutig bestimmt. Gilt nämlich (I.17) auch für ψ', so ist

$$\forall \varphi \in \mathcal{D}: \qquad \big\langle \tilde{\psi} - \psi' \big| \varphi \big\rangle \;=\; \langle \psi | A\varphi \rangle - \langle \psi | A\varphi \rangle \;=\; 0, \tag{I.18}$$

  und aus der Dichtheit von $\mathcal{D} \subseteq \mathfrak{H}$ folgt dann $\tilde{\psi} = \psi'$.

- Offensichtlich folgt aus der Eindeutigkeit auch die Linearität von A^*. Sind nämlich $\psi, \psi' \in \mathcal{D}^*$ und $\lambda \in \mathbb{C}$, so gilt für alle $\varphi \in \mathcal{D}$:

$$\langle \psi + \lambda\psi' | A\varphi \rangle \;=\; \langle \psi | A\varphi \rangle + \bar{\lambda} \langle \psi' | A\varphi \rangle \;=\; \langle A^*\psi | \varphi \rangle + \bar{\lambda} \langle A^*\psi' | \varphi \rangle \;=\; \langle A^*\psi + \lambda A^*\psi' | \varphi \rangle. \tag{I.19}$$

  Also ist $\psi + \lambda\psi' \in \mathcal{D}^*$ und $A^*(\psi + \lambda\psi') = A^*\psi + \lambda A^*\psi'$.

Definition I.4. Seien $(\mathfrak{H}, \langle\cdot|\cdot\rangle)$ ein Hilbert-Raum und $(A, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ein dicht definierter linearer Operator.

(i) $(A, \mathcal{D})$ heißt **symmetrisch**

$$:\Leftrightarrow \quad \mathcal{D}^* \supseteq \mathcal{D}, \qquad \forall \varphi, \psi \in \mathcal{D}: \quad \langle \varphi | A\psi \rangle = \langle A\varphi | \psi \rangle \tag{I.20}$$

$$\Leftrightarrow \qquad (A^*, \mathcal{D}^*) \supseteq (A, \mathcal{D}), \tag{I.21}$$

d.h. $(A^*, \mathcal{D}^*)$ ist eine Fortsetzung von $(A, \mathcal{D})$.

(ii) $(A, \mathcal{D})$ heißt **selbstadjungiert**

$$:\Leftrightarrow \qquad (A^*, \mathcal{D}^*) = (A, \mathcal{D}). \tag{I.22}$$

(iii) $(A, \mathcal{D})$ heißt **wesentlich selbstadjungiert** $:\Leftrightarrow$

$$(A, \mathcal{D}) \text{ ist abschließbar, und der Abschluss von } (A, \mathcal{D}) \text{ ist selbstadjungiert.} \tag{I.23}$$

In diesem Fall nennt man $\mathcal{D}$ einen **determinierenden Bereich für $(A, \mathcal{D})$**.

Lemma I.5. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum und $(A, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ dicht definiert. Dann gelten folgende Aussagen:*

(i) $(A^*, \mathcal{D}^*) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ist abgeschlossen;

(ii) $(A, \mathcal{D})$ ist abschließbar $\Leftrightarrow$ $\mathcal{D}^* \subseteq \mathfrak{H}$ ist dicht;

(iii) Ist $(A, \mathcal{D})$ abschließbar, so ist sein Abschluss gleich $(A^{**}, \mathcal{D}^{**})$.

(iv) Es gelten

$$\mathrm{Ker}(A^*) = \mathrm{Ran}(A)^\perp \quad \textit{und} \quad \mathrm{Ker}(A^*)^\perp = \overline{\mathrm{Ran}(A)}\,; \tag{I.24}$$

(v) Ist $(A, \mathcal{D})$ symmetrisch, so ist $(A, \mathcal{D})$ abschließbar und

$$\forall\, \lambda \in \mathbb{C},\ \varphi \in \mathcal{D}: \quad \|(A - \lambda)\varphi\| \geq |\mathrm{Im}(\lambda)| \cdot \|\varphi\|\,. \tag{I.25}$$

Definition I.6. Sei $\big(\mathfrak{H}, \langle\cdot|\cdot\rangle\big)$ ein separabler komplexer Hilbert-Raum. Eine Familie $\big\{T(t)\big\}_{t\in\mathbb{R}} \subseteq \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ beschränkter Operatoren auf $\mathfrak{H}$ heißt **C_0-Gruppe** $\Leftrightarrow$:

$$\forall\, t, s \in \mathbb{R}: \quad T(t)T(s) = T(t+s)\,; \tag{I.26}$$

$$T(0) = \mathbb{1}_{\mathfrak{H}}\,; \tag{I.27}$$

$$t \mapsto T(t) \text{ ist stark stetig auf } \mathfrak{H}. \tag{I.28}$$

Dabei bedeutet (I.28), dass $\big(t \mapsto T(t)\varphi\big) \in C(\mathbb{R}; \mathfrak{H})$, für jedes $\varphi \in \mathfrak{H}$.

Satz I.7 (Stone für selbstadjungierte Operatoren)**.** *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum und $(A, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ein dicht definierter abgeschlossener Operator auf $\mathfrak{H}$. Dann sind folgende Aussagen äquivalent:*

(i) $(A, \mathcal{D})$ ist selbstadjungiert;

(ii) $(A, \mathcal{D})$ *ist symmetrisch und für alle* $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ *ist* $\mathrm{Ran}(A - \lambda) = \mathfrak{H}$*;*

(iii) $(A, \mathcal{D})$ *ist symmetrisch und es existieren* $\lambda_\pm \in \mathbb{R} \pm i\mathbb{R}^+$ *so, dass* $\mathrm{Ran}(A - \lambda_\pm) = \mathfrak{H}$*;*

(iv) $(A, \mathcal{D})$ *erzeugt eine* C_0*-Gruppe* $\{e^{-itA}\}_{t \in \mathbb{R}}$ *unitärer Operatoren.*

Satz I.8 (Stone für wesentlich selbstadjungierte Operatoren)**.** *Seien* $\mathfrak{H}$ *ein Hilbert-Raum und* $(A, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ *ein dicht definierter abschließbarer Operator auf* $\mathfrak{H}$*. Dann sind folgende Aussagen äquivalent:*

(i) $(A, \mathcal{D})$ *ist wesentlich selbstadjungiert;*

(ii) $(A, \mathcal{D})$ *ist symmetrisch und für alle* $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ *ist* $\overline{\mathrm{Ran}(A - \lambda)} = \mathfrak{H}$*;*

(iii) $(A, \mathcal{D})$ *ist symmetrisch und es existieren* $\lambda_\pm \in \mathbb{R} \pm i\mathbb{R}^+$ *so, dass* $\overline{\mathrm{Ran}(A - \lambda_\pm)} = \mathfrak{H}$*;*

(iv) Der Abschluss $(\overline{A}, \overline{\mathcal{D}})$ *erzeugt eine* C_0*-Gruppe* $\{e^{-it\overline{A}}\}_{t \in \mathbb{R}}$ *unitärer Operatoren.*

Selbstadjungiertheit ist also eine zentrale Eigenschaft für die Konzeption der Quantenphysik. Es stellt sich jedoch die Frage, ob es überhaupt selbstadjungierte Operatoren gibt.

Satz I.9. *Seien* $(\Omega, \mathfrak{A}, \mu)$ *ein Maßraum und* $f : (\Omega, \mathfrak{A}) \to (\overline{\mathbb{R}}, \overline{\mathfrak{B}_1})$ *reell-meßbar und* μ*-f.ü. endlich. Seien weiterhin* $\mathfrak{H} := L^2(\Omega)$*,*

$$\mathcal{D} \ := \ \big\{ \varphi \in \mathfrak{H} \ \big| \ f\varphi \in \mathfrak{H} \big\} \tag{I.29}$$

und $A : \mathcal{D} \to \mathfrak{H}$ *definiert als* ***Multiplikationsoperator*** *durch,*

$$\forall\, \omega \in \Omega : \quad [A\varphi](\omega) \ := \ f(\omega) \cdot \varphi(\omega) \, . \tag{I.30}$$

Dann ist $(A, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ *selbstadjungiert und das Spektrum von* A *ist gegeben durch*

$$\sigma(A) \ = \ \mathrm{ess\,Ran}(f) \ := \ \bigcap \Big\{ f(\Omega') \ \Big| \ \Omega' \in \mathfrak{A}, \ \mu(\Omega \setminus \Omega') = 0 \Big\} \, . \tag{I.31}$$

I.2. Spektralsatz und Funktionalkalkül

Nach diesen viele neuen Begriffen können wir den *Spektralsatz für selbstadjungierte Operatoren* formulieren, der von zentraler Bedeutung in Mathematik und Physik ist - vor allem in der Quantenphysik.

Satz I.10 (Spektralsatz)**.** *Seien* $(\mathfrak{H}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ *ein separabler komplexer Hilbert-Raum und* $(H, \mathcal{D}) = (H^*, \mathcal{D}^*) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ *ein dicht definierter, selbstadjungierter Operator auf* $\mathfrak{H}$*. Dann gibt es einen Maßraum* $(\Omega, \mathfrak{A}, \mu)$*, eine messbare Abbildung* $h : \Omega \to \mathbb{R}$ *und eine unitäre Transformation* $\Lambda : \mathfrak{H} \to L^2(\Omega)$ *so, dass*

$$\forall\, \varphi \in L^2(\Omega), \ \omega \in \Omega : \quad \big[\Lambda H \Lambda^* \varphi\big](\omega) \ = \ h(\omega)\, \varphi(\omega) \tag{I.32}$$

und dass der Wertebereich $h(\Omega) = \sigma(H)$ *gleich dem Spektrum* $\sigma(H)$ *von* H *ist, d.h. gleich der Menge aller komplexer Zahlen* $z \in \mathbb{C}$*, für die* $H - z$ *nicht beschränkt invertibel ist.*

Bemerkungen und Beispiele.

- Der Spektralsatz I.10 ist offensichtlich enorm wichtig und wir empfehlen das Nachvollziehen seines Beweis. Tatsächlich gibt es mehrere, zueinander äquivalente Formulierungen; welche man davon bevorzugt, ist ein stückweit Geschmackssache. Darstellungen des Spektralsatzes (auch für unbeschränkte Operatoren!) inklusive seines Beweises findet man beispielsweise in [?, Kap. VI-VIII], [?, Kap. 12-13], [?, Kap. XI] und [?].
- Der Spektralsatz I.10 verallgemeinert (I.8) und besagt, dass H nach geeigneter unitärer Transformation als Multiplikationsoperator wirkt. Ein Multiplikationsoperator wie in (I.32) ist also die natürliche Verallgemeinerung einer Diagonalmatrix.
- Im obigen Spezialfall (I.8) sind $\mathfrak{H} = \mathbb{C}^N$, $\Omega = \mathbb{Z}_1^N$, $L^2(\Omega) = \ell^2(\mathbb{Z}_1^N) = \mathbb{C}^N$, $\Lambda_{x,j} = \langle \delta_x | \varphi_j \rangle = \varphi_j(x)$ und (I.32) ist (I.8).
- Wir bemerken ohne Begründung dass für $d \in \mathbb{N}$ und $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$ der Laplace-Operator $\big(-\Delta_x, C_0^\infty(\mathbb{R}^d)\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ wesentlich selbstadjungiert ist. Somit ist $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ ein determinierender Bereich für $-\Delta$.
- Sein Abschluss $\overline{\big(-\Delta_x, C_0^\infty(\mathbb{R}^d)\big)} = \big(-\Delta_x, H^2(\mathbb{R}^d)\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ist selbstadjungiert, wobei $H^2(\mathbb{R}^d)$ den Sobolev-Raum zweiter Ordnung notiert. Dieser enthält alle zweimal schwach differenzierbaren Funktionen, die zusammen mit ihren partiellen Ableitungen bis zum Grad zwei quadratintegrabel sind. Auch dies beweisen wir nicht.
- Für $d \in \mathbb{N}$, $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$ und $\big(-\Delta_x, H^2(\mathbb{R}^d)\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ setzen wir $\Omega = \mathbb{R}^d$ mit dem üblichen Lebesgue-Maß auf $\mathbb{R}^d$. Weiterhin seien $h : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ gegeben durch $h(k) := k^2$ und $\Lambda := \mathfrak{F}$ die d-dimensionale Fouriertransformation,

$$\forall\, \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d),\ k \in \mathbb{R}^d : \quad [\mathfrak{F}\psi](k) \ := \ \int e^{-ik\cdot x}\, \psi(x)\, \frac{d^d x}{(2\pi)^{d/2}}\,, \tag{I.33}$$

wobei $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ die Schwartzschen Testfunktionen notiert. Dann ist $\mathfrak{F}\big[\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)\big] \subseteq \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, und nach dem Satz von Plancherel gilt $\|\mathfrak{F}\psi\|_{L^2} = \|\psi\|_{L^2}$. Daraus gewinnt man leicht, dass sich die Fouriertransformation zu einer unitären Abbildung $\mathfrak{F} : L^2(\mathbb{R}^d) \to L^2(\mathbb{R}^d)$ stetig fortsetzen lässt. Für $\hat{\psi} \in L^2(\mathbb{R}^d)$ nimmt (I.32) dann die Gestalt

$$\forall\, k \in \mathbb{R}^d : \quad \big[\mathfrak{F} \circ H \circ \mathfrak{F}^* \hat{\psi}\big](k) \ = \ k^2\, \hat{\psi}(k) \tag{I.34}$$

an.

Aus dem Spektralsatz I.10 ergibt sich –wie oben schon gesagt– unmittelbar ein Funktionalkalkül.

Definition I.11 (Funktionalkalkül)**.** Seien $(\mathfrak{H}, \langle\cdot|\cdot\rangle)$ ein separabler komplexer Hilbert-Raum, $(H, \mathcal{D}) = \big(H^*, \mathrm{dom}(H^*)\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ein dicht definierter, selbstadjungierter Operator auf $\mathfrak{H}$ und $(\Omega, \mathfrak{A}, \mu)$ der Maßraum, $h : \Omega \to \mathbb{R}$ die messbare Abbildung und $\Lambda : \mathfrak{H} \to L^2(\Omega)$ die unitäre Transformation aus Satz I.10, sodass

$$\forall\, \varphi \in L^2(\Omega),\ \omega \in \Omega : \quad \big[\Lambda H \Lambda^* \varphi\big](\omega) \ = \ h(\omega)\, \varphi(\omega)\,. \tag{I.35}$$

Ist $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ reell-messbar und beschränkt, so definieren wir einen beschränkten linearen Operator $\boldsymbol{f(H)} \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ durch

$$f(H) \ := \ \Lambda^*\, f\big(\Lambda H \Lambda^*\big)\, \Lambda\,, \tag{I.36}$$

d.h.

$$\forall\, \varphi \in L^2(\Omega),\ \omega \in \Omega : \quad \big[\Lambda\, f(H)\, \Lambda^* \varphi\big](\omega) \ := \ f[h(\omega)]\, \varphi(\omega)\,. \tag{I.37}$$

Bemerkungen und Beispiele.

- Sind $H = H^* \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ ein beschränkter selbstadjungierter Operator und $p \in \mathbb{C}[x]$ ein komplexes Polynom der Form $p(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2 + \ldots + \alpha_M x^M$, so ist $p : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ zwar nicht beschränkt, aber der Funktionalkalkül (I.36) ergibt bei seiner Anwendung genau das gewünschte Resultat, nämlich

$$\begin{aligned} p(H) \ &= \Lambda^*\, p\big(\Lambda H \Lambda^*\big)\, \Lambda \ = \ \Lambda^* \left(\sum_{m=0}^{M} \alpha_m (\Lambda H \Lambda^*)^M \right) \Lambda \\ &= \sum_{m=0}^{M} \alpha_m \Lambda^* \underbrace{\Lambda H \Lambda^* \cdots \Lambda H \Lambda^*}_{m \text{ Faktoren } \Lambda H \Lambda^*} \Lambda \ = \ \sum_{m=0}^{M} \alpha_m H^m\,. \end{aligned} \tag{I.38}$$

Eine erste Anwendung des Spektralsatzes in Verbindung mit dem Funktionalkalkül ist folgendes Korollar.

Korollar I.12. *Seien $(\mathfrak{H}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ ein separabler komplexer Hilbert-Raum, $(H, \mathcal{D}) = \big(H^*, \mathrm{dom}(H^*)\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ein dicht definierter, selbstadjungierter Operator auf $\mathfrak{H}$ und $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ eine reell-messbare und beschränkte Funktion. Dann ist*

$$\big\| f(H) \big\|_{\mathrm{op}} \ = \ \sup_{\lambda \in \sigma(H)} \big\{ |f(\lambda)| \big\}\,, \tag{I.39}$$

wobei $\| \cdot \|_{\mathrm{op}} := \| \cdot \|_{\mathcal{B}(\mathfrak{H})}$ die Operatornorm auf $\mathcal{B}(\mathfrak{H})$ bezeichnet.

II. Diskretes und Essentielles Spektrum

II.1. Invertibitilität und Spektrum von Operatoren

Zunächst erinnern wir an die Definition von Spektren, Resolventen usw.

Definition II.1. Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum und $(A, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ein dicht definierter, abschließbarer linearer Operator.

(i) Der Operator $(A, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ heißt (**beschränkt**) **invertibel** :⇔

$$\exists\, A^{-1} \in \mathcal{B}(\mathfrak{H}) : \qquad A \circ A^{-1} \;=\; \mathbb{1}_{\mathfrak{H}}\,, \quad A^{-1} \circ A \;=\; \mathbb{1}_{\mathcal{D}}\,. \tag{II.1}$$

(ii) Die **Resolventenmenge** des Operators $(A, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ist gegeben durch

$$\rho(A) \;:=\; \big\{\lambda \in \mathbb{C} \;\big|\; A - \lambda \text{ ist beschränkt invertibel}\big\}\,. \tag{II.2}$$

Lemma II.2. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum. Ein dicht definierter, abschließbarer Operator $(A, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ist genau dann beschränkt invertibel, wenn folgende beiden Eigenschaften (i) und (ii) gelten:*

$$(i) \qquad \mathrm{Ran}(A) \subseteq \mathfrak{H} \text{ ist dicht}, \tag{II.3}$$

$$(ii) \qquad \exists\, m > 0 \;\; \forall\, \varphi \in \mathcal{D} : \quad \|A\varphi\| \;\geq\; m\,\|\varphi\|\,, \tag{II.4}$$

und in diesem Fall gilt $\big\|A^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} = m^{-1} < \infty$.

Lemma II.3. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum und $(A, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ selbstadjungiert. Dann sind folgende Aussagen gleichwertig:*

$$(i) \qquad \lambda \;\in\; \sigma(A); \tag{II.5}$$

$$\Leftrightarrow\; (ii) \qquad \forall\, \varepsilon > 0 : \quad \mathbb{1}[|A - \lambda| < \varepsilon] \;\neq\; 0; \tag{II.6}$$

$$\Leftrightarrow\; (iii) \qquad \exists\, (\varphi_n)_{n=1}^{\infty} \in \mathcal{D}^{\mathbb{N}},\; \|\varphi_n\| = 1 : \quad \lim_{n\to\infty} \big\|(A - \lambda)\varphi_n\big\| \;=\; 0\,. \tag{II.7}$$

Beweis. Wir definieren

$$X \;:=\; \Big\{\lambda \in \mathbb{R} \;\Big|\; \forall\, \varepsilon > 0 : \;\mathbb{1}\big[(A - \lambda) < \varepsilon\big] \;\neq\; 0\Big\}\,, \tag{II.8}$$

$$Y \;:=\; \Big\{\lambda \in \mathbb{R} \;\Big|\; \exists\, (\varphi_n)_{n=1}^{\infty} \in \mathcal{D}^{\mathbb{N}},\; \|\varphi_n\| = 1 : \; \lim_{n\to\infty} \big\|(A - \lambda)\varphi_n\big\| = 0\Big\}\,, \tag{II.9}$$

sodass die behauptete Äquivalenz $(i) \Leftrightarrow (ii) \Leftrightarrow (iii)$ gleichwertig ist mit

$$\sigma(A) \;=\; X \;=\; Y\,. \tag{II.10}$$

Da $(A, \mathcal{D})$ selbstadjungiert ist, gibt es nach dem Spektralsatz einen Maßraum $(\Omega, \mathfrak{A}, \mu)$, eine Funktion $f : \Omega \to \overline{R}$ und einen unitären Operator $U : \mathfrak{H} \to L^2(\Omega)$, so dass

$$\big[U\,A\,U^*\psi\big](\omega) \;=\; f(\omega)\,\psi(\omega)\,. \tag{II.11}$$

$\underline{\sigma(A) \subseteq X}$: Wir setzen $P_{\lambda,\varepsilon}(A) := \mathbb{1}\big[|A-\lambda| < \varepsilon\big]$ und nehmen an, dass $\lambda \notin X$. Dann gibt es ein $\varepsilon > 0$, so dass $P_{\lambda,\varepsilon}(A) = 0$. Wir definieren nun R als Multiplikationsoperator auf $L^2(\Omega)$ durch

$$[R\psi](\omega) \;:=\; \frac{\big(1 - P_{\lambda,\varepsilon}[f(\omega)]\big)}{f(\omega) - \lambda}\,\psi(\omega)\,. \tag{II.12}$$

Dann ist $R \in \mathcal{B}\big(L^2(\Omega)\big)$, nämlich

$$\|R\|_{\mathrm{op}} \;=\; \sup_{\omega\in\Omega}\left|\frac{1 - P_{\lambda,\varepsilon}\big[f(\omega)\big]}{f(\omega)-\lambda}\right| \;=\; \sup_{\omega\in\Omega}\left|\frac{\mathbb{1}\big[|f(\omega)-\lambda| \geq \varepsilon\big]}{f(\omega)-\lambda}\right| \;\leq\; \frac{1}{\varepsilon} \;<\; \infty\,. \tag{II.13}$$

Außerdem ist

$$\begin{aligned} \big[U(A-\lambda)U^*R\,\psi\big](\omega) \;&=\frac{f(\omega)-\lambda}{f(\omega)-\lambda}\,\big(1 - P_{\lambda,\varepsilon}[f(\omega)]\big)\,\psi(\omega) \\ &= \psi(\omega) - \big(U P_{\lambda,\varepsilon}(A)U^*\psi\big)(\omega) \;=\; \psi(\omega)\,, \end{aligned} \tag{II.14}$$

und genauso folgt $R\,U(A-\lambda)U^*\psi = \psi$ und somit ist $U^*RU = A^{-1} \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$, da

$$\big\|U^*R\,U\big\|_{\mathrm{op}} \;=\; \|R\|_{\mathrm{op}} \;=\; \frac{1}{\varepsilon}\,. \tag{II.15}$$

Es folgt, dass $\lambda \in \rho(A)$, also $\lambda \notin \sigma(A)$ und damit $X^c \subseteq \sigma(A)^c$, was gleichwertig mit $\sigma(A) \subseteq X$ ist.

$\underline{X \subseteq Y}$: Gilt (II.6) für jedes $\varepsilon > 0$, so gibt es zu jedem $n \in \mathbb{N}$ ein $\varphi_n \in \mathrm{Ran}\big[P_{\lambda,1/n}(A)\big]$ mit $\|\varphi_n\| = 1$. Offensichtlich sind dann $\varphi_n \in \mathcal{D}$ und $\varphi_n = P_{\lambda,1/n}(A)\varphi_n$. Also gilt

$$\|(A-\lambda)\varphi_n\| \;=\|(A-\lambda)P_{\lambda,1/n}(A)\varphi_n\| \;\leq\; \|(A-\lambda)P_{\lambda,1/n}(A)\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; \frac{1}{n} \;\;\to\;\; 0\,, \tag{II.16}$$

im Limes $n \to \infty$, und daher ist $y \in Y$.

$\underline{Y \subseteq \sigma(A)}$: Ist $\lambda \in Y$, so gibt es eine Folge $(\varphi_n)_{n=1}^\infty \in \mathcal{D}^{\mathbb{N}}$, mit $\|\varphi_n\| = 1$ und $\lim_{n\to\infty} \|(A - \lambda)\varphi_n\| = 0$. Dann ist

$$\inf_{\varphi\in\mathcal{D}\setminus\{0\}}\left\{\frac{\|(A-\lambda)\varphi\|}{\|\varphi\|}\right\} \;\leq\; \inf_{n\in\mathbb{N}}\left\{\frac{\big\|(A-\lambda)\varphi_n\big\|}{\|\varphi_n\|}\right\} \;=\; 0\,, \tag{II.17}$$

und nach Lemma II.2 ist $A - \lambda$ nicht beschränkt invertibel, also $\lambda \in \sigma(A)$. $\square$

II.2. Essenzielles Spektrum und Weyl-Kriterium

Definition II.4. Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum und $(A, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ selbstadjungiert. Dann sind

$$\sigma_{\mathrm{disc}}(A) \;:=\; \Big\{\lambda \in \sigma(A) \;\Big|\; \exists\, \varepsilon > 0 : \;\; \dim \mathrm{Ran}\big(\mathbb{1}\big[|A-\lambda| < \varepsilon\big]\big) < \infty \Big\} \tag{II.18}$$

das **diskrete Spektrum von** $\boldsymbol{A}$ und

$$\sigma_{\mathrm{ess}}(A) \;:=\; \Big\{\lambda \in \sigma(A) \;\Big|\; \forall\, \varepsilon > 0 : \;\; \dim \mathrm{Ran}\big(\mathbb{1}\big[|A-\lambda| < \varepsilon\big]\big) = \infty \Big\} \tag{II.19}$$

das **essenzielle Spektrum von** $\boldsymbol{A}$.

Satz II.5. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum und $(A, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ein selbstadjungierter Operator. Für $\lambda \in \sigma(A)$ gilt $\lambda \in \sigma_{\mathrm{disc}}(A)$ genau dann, wenn folgende Bedingungen (i) und (ii) erfüllt sind,*

(i) λ ist ein isolierter Punkt in $\sigma(A)$, d.h. $\mathrm{dist}\big[\lambda\,,\, \sigma(A) \setminus \{\lambda\}\big] > 0$;

(ii) λ ist ein Eigenwert von A endlicher Multiplizität, d.h. $1 \leq \dim \mathrm{Ker}\big[A - \lambda\big] < \infty$.

Beweis.
„$\Leftarrow$“: Sind $\varepsilon := \frac{1}{2}\mathrm{dist}\big[\lambda\,,\, \sigma(A) \setminus \{\lambda\}\big] > 0$ und $\dim \mathrm{Ker}\big[A-\lambda\big] =: M < \infty$, so ist

$$\dim \mathrm{Ran}\big\{\mathbb{1}\big[|A-\lambda| < \varepsilon\big]\big\} \;=\; \dim \mathrm{Ker}\big[A-\lambda\big] \;<\; \infty\,. \tag{II.20}$$

„$\Rightarrow$“: Sei $\lambda \in \sigma_{\mathrm{disc}}(A)$. Wäre λ nicht isoliert, so gäbe es eine Folge $(\lambda_n)_{n=1}^{\infty} \in \big(\sigma(A) \setminus \{\lambda\}\big)^{\mathbb{N}}$ mit $\lambda_n \to \lambda$. O.B.d.A. können wir diese Folge als monoton annehmen, etwa $\lambda_n \nearrow \lambda$. Für $n \geq 2$ setzen wir

$$\varepsilon_n \;:=\; \frac{1}{3}\min\big\{\lambda_n - \lambda_{n-1}\,,\; \lambda_{n+1} - \lambda_n\big\}\,, \qquad I_n \;:=\; \big(\lambda_n - \varepsilon_n\,,\; \lambda_n + \varepsilon_n\big)\,. \tag{II.21}$$

Die Intervalle I_n sind paarweise disjunkt, und für jedes $N \in \mathbb{N}$ gilt

$$\bigcup_{n=N+1}^{\infty} I_n \;\subseteq\; (\lambda_N\,,\, \lambda)\,. \tag{II.22}$$

Da $\lambda_n \in \sigma(A)$ ist $P_{\lambda_n,\varepsilon_n}(A) \neq 0$ und daher auch $\dim\{\mathrm{Ran}\, P_{\lambda_n,\varepsilon_n}(A)\} \geq 1$. Aus der Disjunktheit der I_n und (II.22) folgt daher für jedes $N \in \mathbb{N}$, dass

$$\dim \mathrm{Ran}\big\{\mathbb{1}[\lambda_N < A < \lambda]\big\} \;\geq\; \sum_{n=N+1}^{\infty} \dim \mathrm{Ran}\big\{P_{\lambda_n,\varepsilon_n}(A)\big\} \;=\; \infty\,. \tag{II.23}$$

Wegen $\lambda_n \to \lambda$ steht dies in Widerspruch zur Existenz eines $\varepsilon > 0$, so dass

$$\dim \mathrm{Ran}\big\{\mathbb{1}\big[|A-\lambda| < \varepsilon\big]\big\} \;<\; \infty\,. \tag{II.24}$$

Also ist $\lambda \in \sigma(A)$ isoliert und es gilt (i).

Zum Beweis von (ii) wählen wir $\varepsilon_1 > 0$ so, dass $\dim \mathrm{Ran}\big\{\mathbb{1}\big[|A-\lambda| < \varepsilon_1\big]\big\} < \infty$. Wählen wir weiterhin $\varepsilon_2 := \frac{1}{2}\mathrm{dist}\big[\lambda\,,\, \sigma(A) \setminus \{\lambda\}\big] > 0$ und $\varepsilon := \min\{\varepsilon_1, \varepsilon_2\} > 0$, so folgt aus $\lambda \in \sigma(A)$, dass $P_{\lambda,\varepsilon} \neq 0$ und deshalb

$$1 \;\leq\; \dim \mathrm{Ran}\big\{P_{\lambda,\varepsilon}(A)\big\} \;=\; \dim \mathrm{Ker}[A-\lambda] \;\leq\; \dim \mathrm{Ran}\big\{P_{\lambda,\varepsilon_1}(A)\big\} \;<\; \infty\,. \tag{II.25}$$

$\square$

Satz II.6 (Weyl-Kriterium). *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum und $(A, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ selbstadjungiert. Dann sind folgende Aussagen äquivalent:*

$$(i) \qquad \lambda \in \sigma_{\mathrm{ess}}(A) \tag{II.26}$$

$$\Leftrightarrow \quad (ii) \quad \exists\, (\varphi_n)_{n=1}^\infty \in \mathcal{D}^{\mathbb{N}}, \ \|\varphi_n\| = 1: \quad w\text{-}\lim_{n\to\infty} \{\varphi_n\} = 0, \ \lim_{n\to\infty} \|(A-\lambda)\varphi_n\| = 0; \tag{II.27}$$

$$\Leftrightarrow \quad (iii) \quad \exists\, (\varphi_n)_{n=1}^\infty \in \mathcal{D}^{\mathbb{N}}, \ \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{mn}: \quad \lim_{n\to\infty} \|(A-\lambda)\varphi_n\| = 0. \tag{II.28}$$

Beweis.
<u>*(i)* ⇒ *(iii)*</u>: Sei $\lambda \in \sigma_{\mathrm{ess}}(A)$. Wir wählen $\varphi_1 \in \mathrm{Ran} P_{\lambda,1}(A)$ mit $\|\varphi_1\| = 1$. Anschließend wählen wir $\varphi_2 \in \mathrm{Ran} P_{\lambda,\frac{1}{2}}(A)$ mit $\|\varphi_2\| = 1$ und $\varphi_2 \perp \varphi_1$. Letzteres ist möglich, da

$$\dim \mathrm{Ran}\{P_{\lambda,\frac{1}{2}}(A)\} = \infty \geq 2. \tag{II.29}$$

Anschließend wählen wir $\varphi_3 \in \mathrm{Ran}\{P_{\lambda,\frac{1}{3}}(A)\}$ mit $\|\varphi_3\| = 1$ und $\varphi_3 \perp \mathrm{span}\{\varphi_1, \varphi_2\}$; letzteres wird ermöglicht durch

$$\dim \mathrm{Ran}\{P_{\lambda,\frac{1}{3}}(A)\} = \infty \geq 3, \tag{II.30}$$

usw. Auf diese Weise erhalten wir eine orthonormale Folge $(\varphi_n)_{n=1}^\infty \in \mathcal{D}^{\mathbb{N}}$, $\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{mn}$ mit $\varphi_n \in \mathrm{Ran}\{P_{\lambda,\frac{1}{n}}(A)\}$, was

$$\|(A-\lambda)\varphi_n\| = \|(A-\lambda)P_{\lambda,\frac{1}{n}}(A)\varphi_n\| \leq \|(A-\lambda)P_{\lambda,\frac{1}{n}}(A)\|_{\mathrm{op}} \leq \frac{1}{n} \overset{n\to\infty}{\to} 0, \tag{II.31}$$

impliziert.
<u>*(iii)* ⇒ *(ii)*</u>: Seien $\psi \in \mathfrak{H}$ und $(\varphi_n)_{n=1}^\infty \in \mathfrak{H}^{\mathbb{N}}$ ein ONS, d.h., $\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{mn}$. Dann ist

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\langle \psi | \varphi_n \rangle|^2 \leq \|\psi\|^2 < \infty, \tag{II.32}$$

und insbesondere $\lim_{n\to\infty} \langle \psi | \varphi_n \rangle = 0$, also $\varphi_n \to^w 0$.
<u>*(ii)* ⇒ *(i)*</u>: Offensichtlich impliziert *(ii)*, dass $\lambda \in \sigma(A)$. Um zu zeigen, dass $\lambda \in \sigma_{\mathrm{ess}}(A)$ im essenziellen Spektrum liegt, nehmen wir nun das Gegenteil $\lambda \in \sigma_{\mathrm{disc}}(A)$ an und zeigen, dass dann *(ii)* nicht gilt. Mit $\lambda \in \sigma_{\mathrm{disc}}(A)$ ist dann $\varepsilon := \frac{1}{2}\mathrm{dist}[\lambda, \sigma(A) \setminus \{\lambda\}] > 0$, und es gibt eine ONB $\{\psi_1, \ldots, \psi_M\}$ von $\mathrm{Ker}\{A - \lambda\} = \mathrm{Ran}\{P_{\lambda,\varepsilon}(A)\}$, wobei

$$M := \dim \mathrm{Ker}\{A - \lambda\} < \infty. \tag{II.33}$$

Ist nun $(\varphi_n)_{n=1}^\infty \in \mathcal{D}^{\mathbb{N}}$ mit $\|\varphi_n\| = 1$ und $\text{w-}\lim_{n\to\infty} \varphi_n = 0$, so sind $\lim_{n\to\infty} \langle \psi_m | \varphi_n \rangle \to 0$, für alle $1 \leq m \leq M$, und deshalb gilt

$$\langle \varphi_n | P_{\lambda,\varepsilon}(A)\varphi_n \rangle = \sum_{m=1}^{M} \langle \varphi_n | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \varphi_n \rangle \to 0, \tag{II.34}$$

im Limes $n \to \infty$. Andererseits ist

$$\begin{aligned} \|(A-\lambda)\varphi_n\|^2 &= \Big\langle (A-\lambda)\varphi_n \,\Big|\, \big\{\big(\mathbb{1} - P_{\lambda,\varepsilon}(A)\big) + P_{\lambda,\varepsilon}(A)\big\}(A-\lambda)\varphi_n \Big\rangle \\ &\geq \varepsilon^2 \left\|\big(\mathbb{1} - P_{\lambda,\varepsilon}(A)\big)\varphi_n\right\|^2 \;=\; \varepsilon^2 \Big(1 - \langle \varphi_n | P_{\lambda,\varepsilon}(A)\varphi_n\rangle\Big) . \end{aligned} \tag{II.35}$$

Mit (II.34) folgt daraus, dass

$$\liminf_{n\to\infty} \|(A-\lambda)\varphi_n\| \;\geq\; \varepsilon \;>\; 0, \tag{II.36}$$

und (ii) kann nicht gelten. □

II.3. Essenzielles Spektrum und kompakte Operatoren

Definition II.7. Sei $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum. Die Menge $\mathrm{Com}(\mathfrak{H})$ der **kompakten Operatoren** auf $\mathfrak{H}$ ist definiert als

$$\mathrm{Com}\,(\mathfrak{H}) \;:=\; \overline{\big\{A \in \mathcal{B}(\mathfrak{H}) \;\big|\; \dim \mathrm{Ran} A < \infty\big\}}^{\|\cdot\|_{\mathrm{op}}}, \tag{II.37}$$

d.h. als Normabschluss der Algebra der Operatoren endlichen Ranges.

Bemerkungen und Beispiele.

- $\mathrm{Com}(\mathfrak{H}) \subset \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ ist eine echte Teilalgebra, $\mathrm{Com}(\mathfrak{H}) \neq \mathcal{B}(\mathfrak{H})$, falls $\dim \mathfrak{H} = \infty$. So ist beispielsweise $\mathbb{1} \notin \mathrm{Com}(\mathfrak{H})$.
- $\mathrm{Com}(\mathfrak{H}) \subseteq \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ ist ein zweiseitiges Ideal, d.h.

$$\forall\, K \in \mathrm{Com}(\mathfrak{H}),\; A \in \mathcal{B}(\mathfrak{H}): \quad KA,\; AK \in \mathrm{Com}(\mathfrak{H})\,. \tag{II.38}$$

Lemma II.8. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum, $K \in \mathrm{Com}(\mathfrak{H})$ kompakt und $(\varphi_n)_{n=1}^\infty \in \mathfrak{H}^{\mathbb{N}}$, mit $\|\varphi_n\| = 1$ und $\text{w-}\lim_{n\to\infty} \varphi_n = 0$. Dann konvergiert $\lim_{n\to\infty} \|K\varphi_n\| = 0$.*

Beweis. Zu $\varepsilon > 0$ gibt es einen Operator endlichen Ranges

$$A \;=\; \sum_{i,j=1}^{N} a_{ij} |\psi_i\rangle\langle\psi_j|\,, \tag{II.39}$$

$N \leq \dim \mathrm{Ran} A < \infty$, so, dass $\|K - A\|_{\mathrm{op}} \leq \varepsilon$. Mit $\text{w-}\lim_{n\to\infty} \varphi_n = 0$ folgt $\lim_{n\to\infty} \langle\psi_j|\varphi_n\rangle \to 0$ für alle $j \in \mathbb{Z}_1^N$. Also ist $\lim_{n\to\infty} \|A\varphi_n\| = 0$ und daher auch

$$\limsup_{n\to\infty} \|K\varphi_n\| \;\leq\; \varepsilon + \limsup_{n\to\infty} \|A\varphi_n\| \;=\; \varepsilon\,. \tag{II.40}$$

Da $\varepsilon > 0$ beliebig klein gewählt werden kann, folgt aus (II.40) auch $\lim_{n\to\infty} \|K\varphi_n\| = 0$. □

Satz II.9. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum und $(A, \mathcal{D})$, $(B, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ zwei selbstadjungierte Operatoren. Ist $A - B \in \mathrm{Com}(\mathfrak{H})$ kompakt, so gilt*

$$\sigma_{\mathrm{ess}}(A) \;=\; \sigma_{\mathrm{ess}}(B). \tag{II.41}$$

Beweis. Seien $K := A - B \in \mathrm{Com}(\mathfrak{H})$ und $\lambda \in \sigma_{\mathrm{ess}}(A)$. Nach Satz II.6 gibt es dann $(\varphi_n)_{n=1}^\infty \in \mathcal{D}^{\mathbb{N}}$ mit $\|\varphi_n\| = 1$ so, dass $\text{w-}\lim_{n\to\infty} \varphi_n = 0$ und $\lim_{n\to\infty} \|(A-\lambda)\varphi_n\| = 0$. Dann gilt jedoch auch

$$\|(B-\lambda)\varphi_n\| \;=\; \|(A-\lambda-K)\varphi_n\| \;\leq\; \|(A-\lambda)\varphi_n\| + \|K\varphi_n\| \;\overset{n\to\infty}{\to}\; 0, \tag{II.42}$$

nach Lemma II.8. Abermals impliziert Satz II.6, dass $\lambda \in \sigma_{\mathrm{ess}}(B)$. Es folgt, dass $\sigma_{\mathrm{ess}}(A) \subseteq \sigma_{\mathrm{ess}}(B)$, und durch Vertauschen der Rollen von A und B folgt genauso $\sigma_{\mathrm{ess}}(B) \subseteq \sigma_{\mathrm{ess}}(A)$. $\square$

Satz II.10. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum, $(A, \mathcal{D})$, $(B, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ zwei selbstadjungierte Operatoren. Existiert ein $z \in \rho(A) \cap \rho(B)$ so, dass die Differenz $(A-z)^{-1} - (B-z)^{-1} \in \mathrm{Com}(\mathfrak{H})$ der Resolventen von A und B zu z kompakt ist, so ist*

$$\sigma_{\mathrm{ess}}(A) \;=\; \sigma_{\mathrm{ess}}(B)\,. \tag{II.43}$$

Beweis. Seien wieder $\lambda \in \sigma_{\mathrm{ess}}(A)$ und $(\varphi_n)_{n=1}^\infty \in \mathcal{D}^{\mathbb{N}}$ mit $\|\varphi_n\| = 1$ so, dass $\text{w-}\lim_{n\to\infty} \varphi_n = 0$ und $\lim_{n\to\infty} \|(A-\lambda)\varphi_n\| = 0$. Ist weiterhin $z \in \rho(A) \cap \rho(B)$ so, dass $M := (A-z)^{-1} - (B-z)^{-1} \in \mathrm{Com}(\mathfrak{H})$ kompakt ist, so beobachten wir, dass

$$\begin{aligned}(B-z)^{-1} - (\lambda-z)^{-1} \;&=\; -M + (A-z)^{-1} - (\lambda-z)^{-1} \\ &=\; -M + (\lambda-z)^{-1}(A-z)^{-1}(A-\lambda)\,.\end{aligned} \tag{II.44}$$

Wenden wir dies auf φ_n an, so folgt mit $\text{w-}\lim_{n\to\infty} \varphi_n = 0$ und $M \in \mathrm{Com}(\mathfrak{H})$, dass $\lim_{n\to\infty} \|M\varphi_n\| = 0$ und daher

$$\big\|(B-z)^{-1}\varphi_n - (\lambda-z)^{-1}\varphi_n\big\| \;\leq\; \|M\varphi_n\| \;+\; |\lambda-z|^{-1}\,\big\|(A-z)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}}\,\|(A-\lambda)\varphi_n\| \;\to\; 0, \tag{II.45}$$

für $n \to \infty$. Daher gibt es ein $N \in \mathbb{N}$, so dass

$$\forall\, n \geq N: \quad \frac{1}{2|\lambda-z|} \;\leq\; \big\|(B-z)^{-1}\varphi_n\big\| \;\leq\; \frac{2}{|\lambda-z|}\,. \tag{II.46}$$

Wir definieren nun

$$\forall\, n \in \mathbb{N}: \quad \tilde{\psi}_n \;:=\; (B-z)^{-1}\varphi_{N+n}\,, \quad \psi_n \;:=\; \frac{\tilde{\psi}_n}{\|\tilde{\psi}_n\|}. \tag{II.47}$$

Dann ist offensichtlich $(\psi_n)_{n=1}^\infty \in \mathcal{D}^{\mathbb{N}}$ und $\|\psi_n\| = 1$. Außerdem ist für jedes $\varphi \in \mathfrak{H}$

$$\begin{aligned}\lim_{n\to\infty} \big|\langle\varphi|\psi_n\rangle\big| \;&\leq 2|\lambda-z| \;\lim_{n\to\infty} \big|\big\langle\varphi\,\big|\,(B-z)^{-1}\varphi_{n+N}\big\rangle\big| \\ &= 2|\lambda-z| \;\lim_{n\to\infty} \big|\big\langle(B-\overline{z})^{-1}\varphi\,\big|\,\varphi_{n+N}\big\rangle\big| \;=\; 0\,,\end{aligned} \tag{II.48}$$

da $\text{w-}\lim_{n\to\infty} \varphi_n = 0$. Also gilt auch $\text{w-}\lim_{n\to\infty} \psi_n = 0$. Schließlich ist

$$\begin{aligned}(B-\lambda) - (A-\lambda) \;&= (B-z) - (A-z) \;=\; (B-z)\big\{(A-z)^{-1} - (B-z)^{-1}\big\}(A-z) \\ &= (B-z)\,M\,\big\{(\lambda-z) + (A-\lambda)\big\}\,,\end{aligned} \tag{II.49}$$

bzw.

$$(B-z)^{-1}\,(B-\lambda) \;=\; (B-z)^{-1}(A-\lambda) \;+\; (\lambda-z)\,M \;+\; M\,(A-\lambda)\,. \tag{II.50}$$

Auf φ_{n+N} angewandt, ergibt sich daraus

$$\begin{aligned}(B-\lambda)\tilde{\psi}_n \;&= (B-z)^{-1}\,(B-\lambda)\varphi_{n+N} \\ &= (B-z)^{-1}(A-\lambda)\varphi_{n+N} \;+\; (\lambda-z)\,M\varphi_{n+N} \;+\; M\,(A-\lambda)\varphi_{n+N}\,.\end{aligned} \tag{II.51}$$

Mit $\lim_{n\to\infty}\|M\varphi_n\| = \lim_{n\to\infty}\|(A-\lambda)\varphi_n\| = 0$ folgt daraus, dass

$$\lim_{n\to\infty}\|(B-\lambda)\tilde{\psi}_n\| \;=\; 0\,. \tag{II.52}$$

Also ist auch

$$\lim_{n\to\infty}\|(B-\lambda)\psi_n\| \;\leq\; 2|\lambda-z|\,\lim_{n\to\infty}\|(B-\lambda)\tilde{\psi}_n\| \;=\; 0\,. \tag{II.53}$$

Somit gilt $\lambda\in\sigma_{\mathrm{ess}}(B)$ und also $\sigma_{\mathrm{ess}}(A)\subseteq\sigma_{\mathrm{ess}}(B)$. Durch Vertauschen der Rollen von A und B ergibt sich die umgekehrte Inklusion $\sigma_{\mathrm{ess}}(B)\subseteq\sigma_{\mathrm{ess}}(A)$. $\square$

III. Kato-Störungstheorie

Wir definieren zuerst den für unbeschränkte Operatoren zentralen Begriff der *relativen Beschränktheit.*

Definition III.1. Seien $(\mathfrak{H}, \langle\cdot|\cdot\rangle)$ ein (separabler komplexer) Hilbert-Raum und $(A, \mathcal{D}_A), (B, \mathcal{D}_B) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ zwei dicht definierte (lineare) Operatoren auf $\mathfrak{H}$.

(i) $(B, \mathcal{D}_B)$ heißt **relativ $\boldsymbol{A}$-beschränkt** $\Leftrightarrow$:
$\mathcal{D}_B \supseteq \mathcal{D}_A$, und es gibt a, $b \in \mathbb{R}^+$, so dass

$$\forall\, \varphi \in \mathcal{D}_A : \quad \|B\varphi\| \;\leq\; a \cdot \|A\varphi\| + b\,\|\varphi\|\,. \tag{III.1}$$

In diesem Fall heißt a **relative Schranke**.

(ii) $(B, \mathcal{D}_B)$ heißt **infinitesimale Störung von $\boldsymbol{(A, \mathcal{D}_A)}$** $\Leftrightarrow$:
$\mathcal{D}_B \supset \mathcal{D}_A$, und für alle $a > 0$ gibt es ein $b \equiv b(a) < \infty$ so, dass

$$\forall\, \varphi \in \mathcal{D}_A : \quad \|B\varphi\| \;\leq\; a \cdot \|A\varphi\| + b\,\|\varphi\|\,. \tag{III.2}$$

(iii) $(A, \mathcal{D}_A)$ heißt **halbbeschränkt (nach unten beschränkt)** $\Leftrightarrow$:

$$\exists\, M > -\infty \quad \forall\, \varphi \in \mathcal{D}_A : \quad \langle\varphi|A\varphi\rangle \;\geq\; M\,\|\varphi\|^2\,. \tag{III.3}$$

In diesem Fall heißt M **untere Schranke von $\boldsymbol{A}$**, und wir schreiben $\boldsymbol{A \geq M}$.

III.1. Der Satz von Kato-Rellich

Mit diesen Begriffen können wir das erste Hauptresultat dieses Kapitels –den Satz von Kato-Rellich– formulieren.

Satz III.2 (Kato-Rellich)**.** *Seien $(\mathfrak{H}, \langle\cdot|\cdot\rangle)$ ein Hilbert-Raum, $(A, \mathcal{D}_A) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ symmetrisch und dicht definiert, $(B, \mathcal{D}_B) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ symmetrisch und relativ A-beschränkt mit relativer Schranke $a < 1$. Dann gelten folgende Aussagen:*

(i) Ist $(A, \mathcal{D}_A) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ selbstadjungiert, so ist auch $(A + B, \mathcal{D}_A) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ selbstadjungiert;

(i) Ist $(A, \mathcal{D}_A) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ wesentlich selbstadjungiert, so ist auch $(A+B, \mathcal{D}_A) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ wesentlich selbstadjungiert;

(iii) Ist $(A, \mathcal{D}_A)$ wesentlich selbstadjungiert und halbbeschränkt mit unterer Schranke $M > -\infty$, so ist auch $(A + B, \mathcal{D}_A)$ wesentlich selbstadjungiert und halbbeschränkt, und zwar mit unterer Schranke

$$A + B \;\geq\; M - \max\left\{\frac{b}{1-a}\,,\ |M|\right\}. \tag{III.4}$$

Beweis. Seien $(A, \mathcal{D}_A) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ selbstadjungiert und $z = \lambda + i\mu$ mit $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ und $\mu \neq 0$. Dann ist $A - z$ invertibel, und $(A-z)^{-1}\psi \in \mathcal{D}_A$, für alle $\psi \in \mathfrak{H}$. Mit (III.1) und (I.39) erhalten wir

$$\begin{aligned} \left\| B(A-z)^{-1}\psi \right\| &\leq a \left\| A(A-z)^{-1}\psi \right\| + b \left\| (A-z)^{-1}\psi \right\| \\ &\leq \left(a \left\| \frac{A}{A-z} \right\|_{\mathrm{op}} + b \left\| \frac{1}{A-z} \right\|_{\mathrm{op}} \right) \|\psi\| \qquad \text{(III.5)} \\ &= \left(a \sup_{\tau \in \sigma(A)} \left| \frac{\tau}{\tau - z} \right| + b \sup_{\tau \in \sigma(A)} \left| \frac{1}{\tau - z} \right| \right) \|\psi\| \,. \end{aligned}$$

Zu (i): Somit ist für $\lambda := 0$

$$\begin{aligned} \left\| B(A-z)^{-1} \right\|_{\mathrm{op}} &\leq a \sup_{\tau \in \sigma(A)} \left| \frac{\tau}{\tau - i\mu} \right| + b \sup_{\tau \in \sigma(A)} \left| \frac{1}{\tau - i\mu} \right| \\ &= a \sup_{\tau \in \sigma(A)} \left(\frac{\tau^2}{\tau^2 + \mu^2} \right)^{1/2} + b \sup_{\tau \in \sigma(A)} \left(\frac{1}{\tau^2 + \mu^2} \right)^{1/2} \\ &= a + \frac{b}{|\mu|} \,. \end{aligned} \qquad \text{(III.6)}$$

Wir wählen $|\mu| := \frac{2b}{1-a} < \infty$ und erhalten mit

$$Q := -B(A - i\mu)^{-1}, \quad \text{dass} \quad \|Q\|_{\mathrm{op}} \leq a + \frac{1-a}{2} = \frac{1+a}{2} < 1 \,. \qquad \text{(III.7)}$$

Wir beobachten nun, dass

$$A + B - i\mu = (\mathbb{1} - Q)(A - i\mu) \qquad \text{(III.8)}$$

gilt, wobei $\mathbb{1} - Q$ invertibel ist, da die Neumann-Reihe

$$(\mathbb{1} - Q)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} Q^n \in \mathcal{B}(\mathfrak{H}) \qquad \text{(III.9)}$$

wegen (III.7) normkonvergent ist.

Wir zeigen nun die Abgeschlossenheit von $(A + B, \mathcal{D}_A)$. Sei dazu $(\psi_n)_{n=1}^{\infty} \subseteq \mathcal{D}_A$ mit $\psi_n \to \psi$ und $(A + B)\psi_n \to \varphi$, für $n \to \infty$. Dann ist nach (III.8)

$$\begin{aligned} A\psi_n &= i\mu\,\psi_n + (A - i\mu)\psi_n = i\mu\,\psi_n + (\mathbb{1} - Q)^{-1}(A + B - i\mu)\psi_n \\ &= i\mu\big[\mathbb{1} - (\mathbb{1} - Q)^{-1}\big]\psi_n + (\mathbb{1} - Q)^{-1}(A + B)\psi_n \,, \end{aligned} \qquad \text{(III.10)}$$

also

$$A\psi_n \to i\mu\big[\psi - (\mathbb{1} - Q)^{-1}\psi\big] + (\mathbb{1} - Q)^{-1}\varphi \,. \qquad \text{(III.11)}$$

Da $(A, \mathcal{D}_A)$ abgeschlossen ist, folgt $\psi \in \mathcal{D}_A$ und

$$A\psi = i\mu\psi - i\mu(\mathbb{1} - Q)^{-1}\psi + (\mathbb{1} - Q)^{-1}\varphi \,, \qquad \text{(III.12)}$$

was mit (III.8) auch

$$\varphi \;=\; (\mathbb{1} - Q)(A - i\mu)\psi \;+\; i\mu\psi \;=\; (A + B)\psi \tag{III.13}$$

impliziert. Somit ist $(A + B, \mathcal{D}_A)$ abgeschlossen. Wegen $\mathcal{D}_B \supseteq \mathcal{D}_A$ ist $(A + B, \mathcal{D}_A)$ auch symmetrisch. Schließlich ist $(A - i\mu)\mathcal{D}_A = \mathrm{Ran}(A - i\mu) = \mathfrak{H}$ und deshalb auch

$$(A + B - i\mu)\mathcal{D}_A \;=\; (\mathbb{1} - Q)\mathfrak{H} \;=\; \mathfrak{H}\,, \tag{III.14}$$

da $(\mathbb{1} - Q)$ invertibel ist. Insbesondere sind

$$\mathrm{Ran}\big(A + B + i\tfrac{2b}{1-a}\big) \;=\; \mathrm{Ran}\big(A + B - i\tfrac{2b}{1-a}\big) \;=\; \mathfrak{H}\,, \tag{III.15}$$

und $(A + B, \mathcal{D}_A)$ ist selbstadjungiert.

Zu (ii): Analog zu (i).

Zu (iii): Aus (III.5) folgt mit $\mu = 0$ und $\lambda < M$, dass wegen $\sigma(A) \subseteq [M, \infty)$

$$\begin{aligned} \big\|B(A-\lambda)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} \;&\leq\; a \sup_{\tau \geq M} \left|\frac{\tau}{\tau - \lambda}\right| \;+\; b \sup_{\tau \geq M} \left|\frac{1}{\tau - \lambda}\right| \;=\; a \sup_{r \geq 0} \left|\frac{M + r}{M + r - \lambda}\right| \;+\; \frac{b}{M - \lambda} \\ &\leq a \sup_{r \geq 0} \left\{\frac{|M| + r}{M - \lambda + r}\right\} \;+\; \frac{b}{M - \lambda} \;=\; a \max\left\{1\,,\; \frac{|M|}{M - \lambda}\right\} \;+\; \frac{b}{M - \lambda}\,. \end{aligned} \tag{III.16}$$

Für $\lambda < M$ genügend klein gilt

$$M - \lambda \;>\; \max\left\{|M|\,,\; \frac{b}{1 - a}\right\}, \tag{III.17}$$

was

$$\big\|B(A - \lambda)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; a + \frac{b}{M - \lambda} \;<\; 1 \tag{III.18}$$

nach sich zieht. Somit beweist eine Neumann-Reihenentwicklung, dass

$$(A + B - \lambda) \;=\; \big[\mathbb{1} + B(A - \lambda)^{-1}\big](A - \lambda) \tag{III.19}$$

invertibel ist. Insbesondere ist

$$\inf \sigma(A + B) \;\geq\; M - \max\left\{|M|, \frac{b}{1 - a}\right\}. \tag{III.20}$$

□

Lemma III.3. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum, $(A, \mathcal{D}_A)$ ein selbstadjungierter, halbbeschränkter Operator, $(B, \mathcal{D}_B) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ mit $\mathcal{D}_B \supseteq \mathcal{D}_A$, und gelte $B(A + E)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$, für $E < \infty$ genügend groß, mit*

$$\lim_{E \to \infty} \big\|B(A + E)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} \;=\; 0. \tag{III.21}$$

Dann ist $(B, \mathcal{D}_B)$ eine infinitesimale Störung von $(A, \mathcal{D}_A)$.

Beweis. Für $\psi \in \mathcal{D}_A$ und $E \gg 1$ folgt

$$\begin{aligned} \big\|B\psi\big\| \ &\le \big\|B(A+E)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} \big\|(A+E)\psi\big\| \\ &\le \big\|B(A+E)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} \big\|A\psi\big\| \ + \ E\,\big\|B(A+E)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} \big\|\psi\big\|. \end{aligned} \tag{III.22}$$

Für jedes $a > 0$ gibt es ein $E_d < 0$, so dass $\big\|B(A+E_a)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} \le a$, und mit $b_a := E_a\, a$ folgt dann $\|B\psi\| \le a\|A\psi\| + b_a\|\psi\|$ aus (III.21). □

III.2. Selbstadjungiertheit von Schrödinger-Operatoren

Wir wollen nun den Satz III.2 von Kato-Rellich auf $A = -\Delta$ und $B = V(x)$ anwenden und so in Raumdimensionen $d \le 3$ die Selbstadjungiertheit von Schrödinger-Operatoren $-\Delta + V(x)$ beweisen. Solche Schrödinger-Operatoren sind die Standard-Hamilton-Operatoren der nichtrelativistischen Quantenmechanik.

Lemma III.4. *Seien $d \le 3$ und $V \in L^2(\mathbb{R}^d)$. Dann ist der Multiplikationsoperator $(V\psi)(x) := V(x)\psi(x)$ definiert auf $H^2(\mathbb{R}^d)$, und es gilt*

$$\lim_{E\to\infty} \big\|V(-\Delta+E)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} \ = \ 0\,. \tag{III.23}$$

Beweis. Sei $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$, so dass auch $\hat{f} \in L^2(\mathbb{R}^d)$, und sei $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$. Dann ist

$$\begin{aligned} \big\|V(f*\psi)\big\|_{L^2}^2 \ &= \ \int |V(z)|^2 \left| \int f(x-z)\,\psi(x)\,d^dx \right|^2 d^dz \\ &\le \ \int |V(z)|^2 \left(\int |f(x-z)|^2 d^dx \right) \left(\int |\psi(x)|^2\, d^dx \right) d^dz \\ &= \|V\|_{L^2}^2\, \|f\|_{L^2}^2\, \|\psi\|_{L^2}^2 \ = \ \|V\|_{L^2}^2\, \|\hat{f}\|_{L^2}^2\, \|\psi\|_{L^2}^2\,. \end{aligned} \tag{III.24}$$

Wir wählen nun $f(x) := (-\Delta+E)^{-1}(x)$, d.h. $\hat{f}(p) = \frac{1}{p^2+E}$, und berechnen

$$\begin{aligned} \|\hat{f}\|_{L^2}^2 \ &= \ \int \frac{d^dp}{(p^2+E)^2} \ \le \ 2\int \frac{d^dp}{(|p|+E)^4} \ = \ 2C_d \int_0^\infty \frac{s^{d-1}ds}{(s+E)^4} \\ &\le 2C_d \int_0^\infty \frac{ds}{(s+E)^{5-d}} \ = \ \frac{2C_d}{4-d}\, E^{-4+d}\,. \end{aligned} \tag{III.25}$$

Also ist

$$\big\|V(-\Delta+E)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} \ \le \ \|V\|_{L^2} \sqrt{\frac{2C_d}{4d}}\, E^{-2+\frac{d}{2}} \ \stackrel{E\to\infty}{\longrightarrow} \ 0\,. \tag{III.26}$$

□

Satz III.5. *Sei $V \in L^2 + L^\infty(\mathbb{R}^d;\mathbb{R})$ mit $d \le 3$. Dann ist $\big(-\Delta_x - V(x), H^2(\mathbb{R}^d)\big)$ selbstadjungiert.*

Beweis. Da $V \in L^2 + L^\infty(\mathbb{R}^d;\mathbb{R})$ ist, gibt es $V_2 \in L^2(\mathbb{R}^d;\mathbb{R})$ und eine beschränkte Funktion $V_\infty : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ so, dass $V = V_2 + V_\infty$. Für $E > 0$ ist dann

$$\begin{aligned} \big\|V(-\Delta+E)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} &\leq \big\|V_2(-\Delta+E)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} + \big\|V_\infty(-\Delta+E)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} \\ &\leq \big\|V_2(-\Delta+E)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} + \frac{\|V_\infty\|_\infty}{E}. \end{aligned} \tag{III.27}$$

Also ist

$$\lim_{E\to\infty} \big\|V(-\Delta+E)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} = \lim_{E\to\infty} \big\|V_2(-\Delta+E)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} = 0\,, \tag{III.28}$$

gemäß Lemma III.4. Da V reell ist, ist V auch symmetrisch auf $\mathcal{D}_V \supseteq \mathcal{D}_{-\Delta} = H^2(\mathbb{R}^d)$, und aus dem Satz III.2 von Kato-Rellich folgt die Selbstadjungiertheit von $(-\Delta - V, H^2(\mathbb{R}^d))$. $\square$

Bemerkungen und Beispiele.

- Sind $V(x) = |x|^{-\alpha}$ und $\alpha > 0$, so schreiben wir $V = V_2 + V_\infty$ mit

$$V_2(x) := \mathbb{1}\big(|x| \leq 1\big) \cdot |x|^{-\alpha} \quad \text{und} \quad V_\infty(x) := \mathbb{1}\big(|x| > 1\big) \cdot |x|^{-\alpha}\,. \tag{III.29}$$

  Dann ist offensichtlich $|V_\infty(x)| \leq 1$, und

$$\int V_2(x)^2\, d^dx = \int_{|x|\leq 1} \frac{d^dx}{|x|^{2\alpha}} = C_d \int_0^1 s^{d-1-2\alpha}\, ds < \infty\,, \tag{III.30}$$

  genau dann, wenn $\alpha < \frac{d}{2}$.
- Die Bedingung $\alpha < \frac{d}{2}$ ist nicht optimal, sichert jedoch die Selbstadjungiertheit von eines *wasserstoffähnlichen Atoms*, das für Kernladung $Z > 0$ durch den Hamilton-Operator $\big(-\Delta - \frac{Z}{|x|}, H^2(\mathbb{R}^3;\mathbb{C}^2)\big)$ repräsentiert wird.
- Mit etwas größerem technischen Aufwand kann man die maximale Familie von Potenzialen, die auf selbstadjungierte Operatoren führen, fast ganz bestimmen. Dies führt auf die *Stummel-Klassen S_d* für Potenziale V, s. [**?**].

III.3. Essenzielles Spektrum von Schrödinger-Operatoren

Für Schrödinger-Operatoren des Typs $-\Delta + V(x)$ kann man für viele Potenziale V mit dem Beweis seiner Selbstadjungiertheit in einem Zug auch sein essenzielles Spektrum bestimmen, nämlich $\sigma_{\mathrm{ess}}[-\Delta + V(x)] = \mathbb{R}_0^+$. Der Schlüssel dafür ist der Begriff der *relativen Kompaktheit.*

Definition III.6. Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum und $(A, \mathcal{D}_A) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ein selbstadjungierter linearer Operator. Ein Operator $(B, \mathcal{D}_B) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ heißt **relativ kompakt zu $(A, \mathcal{D}_A)$**

$$:\Leftrightarrow \quad \mathcal{D}_B \supseteq \mathcal{D}_A \quad \text{und} \quad \exists\, z \in \rho(A): \quad B(A-z)^{-1} \in \mathrm{Com}(\mathfrak{H})\,. \tag{III.31}$$

Lemma III.7. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum, $(A, \mathcal{D}_A) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ein selbstadjungierter linearer Operator und $(B, \mathcal{D}_B) \in \mathfrak{L}(B)$ relativ kompakt zu $(A, \mathcal{D}_A)$. Dann ist $(B, \mathcal{D}_B)$ eine infinitesimale Störung von $(A, \mathcal{D}_A)$.*

Beweis. Wie in Lemma III.3 kann man sehen, dass es reicht,

$$\lim_{E\to\infty} \big\| B(A-iE)^{-1} \big\|_{\mathrm{op}} \;=\; 0 \tag{III.32}$$

zu zeigen. Zum Beweis von (III.32) wählen wir $\varepsilon > 0$ und $z \in \rho(A)$ so, dass $B(A-z)^{-1} \in \mathrm{Com}(\mathfrak{H})$. Da $B(A-z)^{-1}$ durch Operatoren endlichen Ranges approximiert werden kann, gibt es ein ONS $\{\varphi_n\}_{n=1}^N \subseteq \mathcal{D}_A$, $N \in \mathbb{N}$, und Koeffizienten $a_{ij} \in \mathbb{C}$, so dass

$$\big\| B(A-z)^{-1} - M \big\|_{\mathrm{op}}, \quad \text{wobei} \quad M \;=\; \sum_{i,j=1}^N a_{ij} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j| \,. \tag{III.33}$$

Ist weiterhin $R < \infty$ genügend groß, so ist

$$\big\| M\, \mathbb{1}\big(|A| > R\big) \big\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; \sum_{i,j=1}^N |a_{ij}|\, \big\| \mathbb{1}\big(|A| > R\big)\varphi_j \big\| \;\leq\; \varepsilon\,, \tag{III.34}$$

da $\lim_{R\to\infty} \|\mathbb{1}(|A| > R)\psi\| = 0$ für alle $\psi \in \mathfrak{H}$ gilt. Somit erhalten wir für alle $E > 0$

$$\begin{aligned} \big\| B(A-iE)^{-1} \big\|_{\mathrm{op}} \;&=\; \bigg\| B(A-z)^{-1} \,\frac{A-z}{A-iE} \bigg\|_{\mathrm{op}} \\ &\leq \bigg\| \Big\{ B(A-z)^{-1} - M \Big\} \,\frac{A-z}{A-iE} \bigg\|_{\mathrm{op}} + \bigg\| M\, \mathbb{1}\Big(|A| > R\Big) \,\frac{A-z}{A-iE} \bigg\|_{\mathrm{op}} \\ &\qquad + \bigg\| M\, \mathbb{1}\Big(|A| \leq R\Big) \,\frac{A-z}{A-iE} \bigg\|_{\mathrm{op}} \\ &\leq 2\varepsilon \bigg\| \frac{A-z}{A-iE} \bigg\|_{\mathrm{op}} + \bigg\| M\, \mathbb{1}\Big(|A| \leq R\Big) \,\frac{A-z}{A-iE} \bigg\|_{\mathrm{op}} . \end{aligned} \tag{III.35}$$

Wählen wir $R > 0$ genügend groß, so ist

$$\bigg\| \bigg(\sum_{i,j=1}^N a_{ij} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j| \bigg) \,\mathbb{1}\big[|A| > R\big] \bigg\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; \varepsilon\,. \tag{III.36}$$

Ist weiterhin $E > 0$ genügend groß, so sind

$$\bigg\| \frac{A-z}{A-iE} \bigg\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; \sup_{r\in\mathbb{R}} \bigg| \frac{r-z}{r-iE} \bigg| \;\leq\; \sup_{r\in\mathbb{R}} \bigg\{ 1 \,+\, \frac{E+|z|}{\sqrt{r^2+E^2}} \bigg\} \;=\; 1 + \frac{E+|z|}{E} \;\leq\; 3 \tag{III.37}$$

und

$$\bigg\| \mathbb{1}\Big(|A| \leq R\Big) \bigg(\frac{A-z}{A-iE} \bigg) \bigg\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; \sup_{|r|\leq R} \bigg| \frac{r-z}{r-iE} \bigg| \;\leq\; \frac{R+|z|}{|E|} \;\leq\; \varepsilon\,. \tag{III.38}$$

Damit erhalten wir aus (III.35), dass

$$\big\| B(A-iE)^{-1} \big\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; 6\varepsilon + \Big(\big\| B(A-z)^{-1} \big\|_{\mathrm{op}} + \varepsilon \Big)\, \varepsilon\,, \tag{III.39}$$

und (III.32) folgt im Limes $\varepsilon \to 0$. $\square$

Satz III.8. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum, $(A, \mathcal{D}_A) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ein selbstadjungierter und halbbeschränkter linearer Operator und $(B, \mathcal{D}_B) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ symmetrisch und relativ kompakt zu $(A, \mathcal{D}_A)$. Dann ist $(A+B, \mathcal{D}_A) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ein selbstadjungierter und halbbeschränkter linearer Operator und es gilt*

$$\sigma_{\mathrm{ess}}(A+B) \;=\; \sigma_{\mathrm{ess}}(A). \tag{III.40}$$

Beweis. Nach Lemma III.7 ist $(B, \mathcal{D}_B)$ eine infinitesimale Störung von $(A, \mathcal{D}_A)$, und mit A ist auch $A+B$ auf $\mathcal{D}_A$ selbstadjungiert und halbbeschränkt. Es bleibt Glg. (III.40) zu zeigen. Aus der Halbbeschränktheit von sowohl A als auch $A+B$ folgt die Existenz einer Zahl $E_0 > -\infty$, so das $A \geq E_0$ und $A+B \geq E_0$. Für $E < E_0$ und $z \in \rho(A)$ ist dann

$$\begin{aligned}(A-E)^{-1} - (A+B-E)^{-1} &= (A+B-E)^{-1} B (A-E)^{-1} \\ &= (A+B-E)^{-1}\, B(A-z)^{-1}\, (A-z)(A-E)^{-1}\,,\end{aligned} \tag{III.41}$$

und wegen $(A+B-E)^{-1}$, $(A-z)(A-E)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ und $B(A-z)^{-1} \in \mathrm{Com}(\mathfrak{H})$ folgt, dass

$$(A-E)^{-1} - (A+B-E)^{-1} \;\in\; \mathrm{Com}(\mathfrak{H}) \tag{III.42}$$

da $\mathrm{Com}(\mathfrak{H}) \subseteq \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ ein zweiseitiges Ideal ist. Glg. (III.40) ergibt sich jetzt aus Satz II.10. □

Bemerkungen und Beispiele.

- Aus dem Beweis von Lemma III.4 und insbesondere Glg. (III.24) sehen wir, dass ein quadratintegrables Potenzial $V \in L^2(\mathbb{R}^d)$ nicht nur eine infinitesimale Störung des Laplacians $-\Delta$ ist, sondern dass der Operator $V(-\Delta+1)^{-1} \in \mathcal{L}^2[L^2(\mathbb{R}^d)]$ sogar ein Hilbert-Schmidt-Operator ist, s. Übungsaufgabe.
- Der Operator $V(-\Delta+1)^{-1}$ ist nämlich von der Form $V(x) f(-i\nabla_x)$ mit $\hat{f}(p) = (p^2+1)^{-1}$ und agiert auf Wellenfunktionen $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ durch

  $$\big[V(-\Delta+1)^{-1}\psi\big](x) \;=\; \int a(x,z)\, \psi(z)\, d^d z\,, \tag{III.43}$$

  wobei

  $$a(x,z) \;=\; V(x)\, \mathfrak{F}^*[\hat{f}](x-z) \tag{III.44}$$

  wegen

  $$\int |a(x,z)|^2\, d^d x\, d^d z \;=\; \|V\|_{L^2}^2 \, \big\|\mathfrak{F}^*[\hat{f}]\big\|_{L^2}^2 \;=\; \|V\|_{L^2}^2\, \|\hat{f}\|_{L^2}^2 \;<\; \infty \tag{III.45}$$

  ein quadratintegrabler Integralkern ist.
- Insbesondere folgt für $V \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$ und $d \leq 3$ die Selbstadjungiertheit von $-\Delta + V(x)$ auf $H^2(\mathbb{R}^d)$ und

  $$\sigma_{\mathrm{ess}}[-\Delta + V(x)] \;=\; \sigma_{\mathrm{ess}}[-\Delta] \;=\; \mathbb{R}_0^+\,. \tag{III.46}$$

IV. Störungstheorie isolierter Eigenwerte

IV.1. Operatorwertige holomorphe Funktionen

Sie $\Omega \subseteq \mathbb{C}$ eine offene Teilmenge der komplexen Zahlen. Die klassische Funktionentheorie hat die Untersuchung holomorpher Funktionen $f : \Omega \to \mathbb{C}$ zum Gegenstand, also auf Ω komplex differenzierbarer Funktionen mit Werten in $\mathbb{C}$. Eine einfache, aber wichtige Beobachtung in der Funktionalanalysis ist die Übertragbarkeit eines großen Teils der Funktionentheorie bis einschließlich der Cauchyschen Integralformel auf Funktionen $f : \Omega \to X$ mit Werten in einem komplexen Banach-Raum $\big(X, \|\cdot\|_X\big)$. Besonders einfach wird die Situation, falls $X = \mathcal{B}(Y)$ der Raum der beschränkten linearen Operatoren auf einem komplexen Banach-Raum ist, denn die dann maßgebliche Operatornorm ist submultiplikativ, $\|AB\|_{\mathcal{B}(Y)} \leq \|A\|_{\mathcal{B}(Y)} \cdot \|B\|_{\mathcal{B}(Y)}$, und die Übertragung der Beweise vom $\mathbb{C}$-wertigen Fall der klassischen Funktionentheorie auf den $\mathcal{B}(Y)$-wertigen Fall erfolgt fast ausnahmslos durch Ersetzung von Beträgen komplexer Zahlen durch die Norm $\|\cdot\|_{\mathcal{B}(Y)}$.

Wir werden uns hier auf den letzteren Fall beschränken, und zwar mit $Y = \mathfrak{H}$, wobei $\mathfrak{H}$ wieder ein separabler komplexer Hilbert-Raum ist. Wir geben keine Beweise der zugehörigen Sätze. Für den folgenden Satz erinnern wir zuvor an den Begriff des rektifizierbaren Wegs: Sind $\Omega \subseteq \mathbb{C}$ offen und nichtleer und $a, b \in \mathbb{R}$, mit $a < b$, so heißt ein Weg $\gamma \in C\big([a,b];\Omega\big)$ *rektifizierbar*, falls

$$L(\gamma) \; = \; \sup\left\{ \sum_{k=1}^{N} \big|\gamma(t_k) - \gamma(t_{k-1})\big| \;\middle|\; N \in \mathbb{N},\; a = t_0 < t_1 < \cdots < t_N := b \right\} \; < \; \infty. \qquad \text{(IV.1)}$$

In diesem Fall nennt man $L(\gamma)$ die *Länge* des Weges γ.

Satz IV.1. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum, $a, b \in \mathbb{R}$, mit $a < b$, $\Omega \subseteq \mathbb{C}$ offen und nichtleer, $\gamma \in C\big([a,b];\mathbb{C}\big)$ ein rektifizierbarer Weg in Ω und $f \in C\big(\Omega;\mathcal{B}(\mathfrak{H})\big)$ eine stetige Funktion auf Ω.*

(i) Dann existiert das ***Integral***

$$\int_\gamma f(z)\, dz \; := \; \lim_{n\to\infty} \left\{ \sum_{k=0}^{2^n-1} \big[\gamma(t_{k+1}) - \gamma(t_k)\big]\, f\big[\gamma(t_k)\big] \right\} \; \in \; \mathcal{B}(\mathfrak{H}) \qquad \text{(IV.2)}$$

von* f *entlang des Weges *γ als normkonvergente Reihe, wobei $t_k := a + (b-a)2^{-n}k$.*

(ii) Ist $\varepsilon > 0$, so gibt es ein $\delta > 0$ so, dass

$$\left\| \int_\gamma f(z)\, dz \; - \; \sum_{k=0}^{N-1} \big[\gamma(s_{k+1}) - \gamma(s_k)\big]\, f\big[\gamma(s_k)\big] \right\|_{\mathrm{op}} \; \leq \; \varepsilon\,, \qquad \text{(IV.3)}$$

für alle $N \in \mathbb{N}$ und $a =: s_0 < s_1 < s_2 < \cdots < s_{N-1} < s_N := b$, die $s_{j+1} \leq s_j + \delta$, für $j \in \mathbb{Z}_0^{N-1}$ erfüllen.

(iii) Ist $\eta \sim \gamma$ ein zu γ äquivalenter Weg (d.h. ist η eine Umparametrisierung von γ), so ist

$$\int_\gamma f(z)\,dz \;=\; \int_\eta f(z)\,dz\,. \tag{IV.4}$$

(iv) Ist $\gamma \in C^1\big([a,b];\Omega\big)$ zusätzlich stetig differenzierbar, so ist $(f\circ\gamma)\cdot\dot\gamma \in C\big([a,b];\mathcal{B}(\mathfrak{H})\big)$ auf $[a,b]$ Riemann-integrabel und es gilt

$$\int_\gamma f(z)\,dz \;=\; \int_a^b f\big[\gamma(t)\big]\,\dot\gamma(t)\,dt\,. \tag{IV.5}$$

(v) Für alle $\varphi,\psi \in \mathfrak{H}$ ist

$$\left\langle \varphi \,\middle|\, \left(\int_\gamma f(z)\,dz\right)\psi \right\rangle \;=\; \int_\gamma \langle\varphi|\,f(z)\psi\rangle\,dz\,. \tag{IV.6}$$

Definition IV.2. Seien $\mathfrak{H}$ ein (separabler komplexer) Hilbert-Raum, $\Omega \subseteq \mathbb{C}$ offen und nichtleer und $f:\Omega\to\mathcal{B}(\mathfrak{H})$ eine Abbildung.

(i) f heißt **analytisch auf Ω**

$:\Leftrightarrow$ f ist lokal in Potenzreihen entwickelbar

$:\Leftrightarrow$ $\forall\, z_0\in\Omega\;\; \exists (a_k)_{k=0}^\infty \in [\mathcal{B}(\mathfrak{H})]^{\mathbb{N}_0},\;\; R^{-1} := \limsup_{k\to\infty} \sqrt[k]{\|a_k\|_{\mathrm{op}}} < \infty \;\;\forall z \in D(z_0,R):$

$$f(z) \;=\; \sum_{k=0}^\infty a_k\,(z-z_0)^k\,. \tag{IV.7}$$

(ii) f heißt **holomorph in Ω**

$$:\Leftrightarrow \qquad \forall\, z_0\in\Omega:\quad f \text{ ist komplex differenzierbar in } z_0. \tag{IV.8}$$

$$:\Leftrightarrow \qquad \forall\, z_0\in\Omega\;\;\exists\, f'(z_0)\in\mathcal{B}(\mathfrak{H}):\quad \lim_{z\to z_0}\left\|\frac{f(z)-f(z_0)}{z-z_0} - f'(z_0)\right\|_{\mathrm{op}} \;=\; 0\,,$$

und in diesem Fall heißt $f':\Omega\to\mathcal{B}(\mathfrak{H})$ **Ableitung von *f* auf Ω**.

Mit diesem Holomorphiebegriff gilt der Cauchysche Integralsatz und auch die Cauchysche Integralformel sowie deren Äquivalenz zu Holomorphie und Analytizität.

Satz IV.3 (Cauchysche Integralsatz)**.** *Sind $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum, $\Omega\subseteq\mathbb{C}$ nichtleer, offen und einfach zusammenhängend, $f:\Omega\to\mathcal{B}(\mathfrak{H})$ holomorph in Ω, $a,b\in\mathbb{R}$ mit $a<b$ und $\gamma\in C\big([a,b];\Omega\big)$ ein geschlossener, rektifizierbarer Weg in Ω, so gilt*

$$\int_\gamma f(z)\,dz \;=\; 0\,. \tag{IV.9}$$

Satz IV.4. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum, $\Omega\subset\mathbb{C}$ nichtleer, offen und einfach zusammenhängend und $f:\Omega\to\mathbb{C}$ stetig in Ω. Dann sind folgende Aussagen gleichwertig, (i) $\Leftrightarrow$ (ii) $\Leftrightarrow$ (iii):*

(i) *f ist analytisch auf Ω;*

(ii) *f ist holomorph in Ω;*

(iii) *f erfüllt die **Cauchysche Integralformel**, d.h. für jeden Punkt $z_0 \in \Omega$ und jeden rektifizierbaren, geschlossenen, doppelpunktsfreien Weg $\gamma \in C\big([a,b];\Omega\big)$ in Ω, der z_0 nicht berührt und z_0 in mathematisch positiver Richtung umläuft, gilt*

$$f(z_0) \;=\; \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma \frac{f(z)\,dz}{z - z_0}\,. \tag{IV.10}$$

Wir kommen nun zum für uns wichtigsten Beispiel für die holomorphe Funktion f, nämlich $f(z) = (A - z)^{-1}$.

Lemma IV.5. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum und $(A, \mathcal{D}_A) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ein dicht definierter, abgeschlossener Operator auf $\mathfrak{H}$. Dann ist die Resolventenmenge $\rho(A) \subseteq \mathbb{C}$ von A offen, und $\rho(A) \ni z \mapsto (A-z)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ ist analytisch auf $\rho(A)$.*

Beweis. Die Behauptung ist trivial richtig, falls $\rho(A) = \emptyset$ leer ist. Ist $z_0 \in \rho(A)$, so ist $A - z_0$ invertibel mit beschränkter Inverser $\big\|(A - z_0)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} =: m^{-1} < \infty$. Die Neumann-Reihenentwicklung

$$(A-z)^{-1} \;=\; \sum_{k=0}^{\infty} a_k\,(z_0 - z)^k\,, \quad a_k \;:=\; (A - z_0)^{-k-1} \;\in\; \mathcal{B}(\mathfrak{H})\,, \quad \|a_k\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; m^{-k-1}\,, \tag{IV.11}$$

zeigt, dass diese Reihe für $z \in D(z_0, m)$ normkonvergent ist. Somit ist auch $D(z_0, m) \subseteq \rho(A)$, und $\rho(A)$ ist offen. Darüber hinaus folgt aus (IV.11) die behauptete Analytizität. □

IV.2. Spektralprojektionen aus Dunford-Cauchy-Integralen

Die im vorigen Abschnitt skizzierte Theorie der operatorwertigen komplexen Analysis hat vielfältige Anwendungen, da sich mit ihr ein Funkionalkalkül $A \mapsto F(A)$ entwickeln lässt, der über die einsetzbaren Operatoren A nur sehr schwache Annahmen fordert.

Wir vertiefen dies hier nicht in allgemeiner Form, sondern konzentrieren uns auf Projektionen, wie in [?]. Dabei wollen wir für $z_0 \in \mathbb{C}$ und $r > 0$ mit $\partial D(z_0, r)$ den Weg $\gamma : [0, 2\pi] \to \mathbb{C}$, $\gamma(t) := r \cdot e^{it} + z_0$, entlang des Randes der Kreisscheibe $D(z_0, r)$ bezeichnen, der z_0 in mathematisch positiver Richtung umläuft.

Satz IV.6. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum, $(A, \mathcal{D}_A) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ein dicht definierter, abgeschlossener Operator auf $\mathfrak{H}$ und $\lambda \in \sigma(A)$ ein isolierter Spektralpunkt, d.h. $\varepsilon := \mathrm{dist}[\lambda\,,\, \sigma(A) \setminus \{\lambda\}] > 0$. Dann gelten folgende Aussagen:*

(i) *Für jedes $0 < r < \varepsilon$ existiert*

$$P \;:=\; \frac{-1}{2\pi i} \int_{\partial D(\lambda, r)} \frac{dz}{A - z} \;\in\; \mathcal{B}(\mathfrak{H})\,, \tag{IV.12}$$

ist beschränkt und unabhängig von r.

(ii) *P ist eine Projektion, d.h. es gilt $P^2 = P$. Ist $(A, \mathcal{D}_A)$ darüber hinaus selbstadjungiert, so ist P orthogonal, d.h. $P = P^* \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ ist auch selbstadjungiert.*

(iii) *Der Kern $\mathrm{Ker}(P) \subseteq \mathfrak{H}$ und das Bild $\mathrm{Ran}(P) \subseteq \mathfrak{H}$ von P sind abgeschlossene komplementäre Unterräume, d.h. es gilt*

$$\mathfrak{H} \;=\; \mathrm{Ran}(P) \,+\, \mathrm{Ker}(P) \quad \textit{und} \quad \mathrm{Ran}(P) \cap \mathrm{Ker}(P) \;=\; \{0\}\,, \tag{IV.13}$$

Ist $(A, \mathcal{D}_A)$ darüber hinaus selbstadjungiert, so sind Kern und Bild von P zueinander orthogonal, $\mathrm{Ker}(P) \perp \mathrm{Ran}(P)$.

(iv) *Das Bild $\mathrm{Ran}(P) \subseteq \mathcal{D}_A$ liegt im Definitionsbereich von A und ist ein invarianter Unterraum, $A[\mathrm{Ran}(P)] \subseteq \mathrm{Ran}(P)$.*

(v) *Es sind $\mathrm{Ker}(P) \cap \mathcal{D}_A$ dicht in $\mathrm{Ker}(P)$ und $A[\mathrm{Ker}(P) \cap \mathcal{D}_A] \subseteq \mathrm{Ker}(P)$.*

(vi) *Sind $\dim \mathrm{Ran}(P) = n < \infty$, so ist $(A - \lambda)^n \psi = 0$ für jedes $\psi \in \mathrm{Ran}(P)$.*

(vii) *Für jedes $0 < r < \varepsilon$ und $w \in D(\lambda, r/2)$ ist $A - w : \mathrm{Ker}(P) \cap \mathcal{D}_A \to \mathrm{Ker}(P)$ beschränkt invertibel mit Resolvente $\bar{R}(w) : \mathrm{Ker}(P) \to \mathrm{Ker}(P) \cap \mathcal{D}_A$,*

$$\bar{R}(w) \;:=\; \frac{-1}{2\pi i} \int_{\partial D(\lambda, r)} \frac{1}{w - z} \, \frac{dz}{A - z} \;\in\; \mathcal{B}(\mathfrak{H})\,, \tag{IV.14}$$

die der Normabschätzung $\|\bar{R}(w)\|_{\mathrm{op}} \leq 2 \, \max_{|z-\lambda|=r} \|(A - z)^{-1}\|_{\mathrm{op}}$ genügt.

Beweis.
<u>*zu (i):*</u> Nach Voraussetzung ist die punktierte Kreisscheibe $\dot{D}(\lambda, \varepsilon) := D(\lambda, \varepsilon) \setminus \{\lambda\} \subseteq \rho(A)$ Teil der Resolventenmenge von A und $z \mapsto (A - z)^{-1}$ analytisch auf $\dot{D}(\lambda, \varepsilon)$ nach Lemma IV.5. Damit sind die Existenz des Integrals (IV.12) und seine Unabhängigkeit von $r \in (0, \varepsilon)$ Konsequenzen aus Satz IV.1 und dem Cauchyschen Integralsatz, Satz IV.3. Die Beschränktheit von P erhalten wir aus der Dreieckungleichung und der Tatsache, dass $z \mapsto \|(A - z)^1\|_{\mathrm{op}}$ – als stetige Funktion auf dem Kompaktum $\partial D(\lambda, r)$ – beschränkt ist, nämlich

$$\|P\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \Big\| \big(A - \lambda - r e^{it}\big)^{-1} \Big\|_{\mathrm{op}} \, r \, dt \;\leq\; r\, M\,, \tag{IV.15}$$

mit

$$M \;:=\; \max_{|\zeta| = r} \Big\| \big(A - \lambda - \zeta\big)^{-1} \Big\|_{\mathrm{op}} \;<\; \infty\,. \tag{IV.16}$$

<u>*zu (ii):*</u> Wir wählen $0 < r < R < \varepsilon$ und beobachten, dass gemäß der 1. Resolventengleichung

$$\frac{1}{A - z} - \frac{1}{A - w} \;=\; \frac{1}{A - z}\,(z - w)\,\frac{1}{A - w} \tag{IV.17}$$

für $z \in \partial D(\lambda, R)$ und $w \in \partial D(\lambda, r)$ gilt. Somit ist

$$
\begin{aligned}
P^2 &= \Big(\frac{-1}{2\pi i}\Big)^2 \int_{z\in\partial D(\lambda,R)} \int_{w\in\partial D(\lambda,r)} \frac{1}{A-z}\,\frac{1}{A-w}\,dz\,dw \\
&= \Big(\frac{-1}{2\pi i}\Big)^2 \int_{\partial D(\lambda,R)} \int_{\partial D(\lambda,r)} \Big(\frac{1}{A-z} - \frac{1}{A-w}\Big)\frac{dz\,dw}{z-w} \\
&= \frac{-1}{2\pi i} \int_{z\in\partial D(\lambda,R)} \Big\{ \frac{-1}{2\pi i} \int_{w\in\partial D(\lambda,r)} \frac{dw}{z-w} \Big\} \frac{dz}{A-z} \\
&\quad - \frac{-1}{2\pi i} \int_{w\in\partial D(\lambda,r)} \Big\{ \frac{-1}{2\pi i} \int_{z\in\partial D(\lambda,R)} \frac{dz}{z-w} \Big\} \frac{dw}{A-w}\,.
\end{aligned}
\tag{IV.18}
$$

Nun liegt jeder Punkt $z \in \partial D(\lambda, R)$ wegen $R > r$ außerhalb der Kontur $\partial D(\lambda, r)$, und deshalb ist

$$
\frac{-1}{2\pi i} \int_{w\in\partial D(\lambda,r)} \frac{dw}{z-w} \;=\; 0\,. \tag{IV.19}
$$

Umgekehrt ist jeder Punkt $w \in \partial D(\lambda, r)$ wegen $r < R$ innerhalb der Kontur $\partial D(\lambda, R)$, und deshalb ist

$$
\frac{-1}{2\pi i} \int_{z\in\partial D(\lambda,R)} \frac{dw}{z-w} \;=\; -1\,. \tag{IV.20}
$$

Setzen wir (IV.19) und (IV.20) in (IV.18) ein, so folgt

$$
P^2 \;=\; \frac{-1}{2\pi i} \int_{w\in\partial D(\lambda,r)} \frac{dw}{A-w} \;=\; P\,. \tag{IV.21}
$$

Für selbstadjungiertes A sind dann $\lambda \in \mathbb{R}$ und

$$
P^* \;=\; \frac{1}{2\pi i} \int_{z\in\partial D(\lambda,r)} \frac{dz}{A-\bar{z}} \;=\; \frac{-1}{2\pi i} \int_{z\in\partial D(\lambda,r)} \frac{dz}{A-z} \;=\; P\,, \tag{IV.22}
$$

da mit $z = \lambda + e^{it}$ die konjugierte Variable $\bar{z} = \lambda + e^{-it}$ dieselbe Kontur $\partial D(\lambda, r)$ in umgekehrter Richtung durchläuft.

zu (iii): Zunächst beobachten wir, dass mit P auch $\mathbb{1} - P$ eine Projektion ist, da $(\mathbb{1} - P)^2 = \mathbb{1} - 2P + P^2 = \mathbb{1} - P$ ist. Da P nach (i) und somit auch $\mathbb{1} - P$ beschränkt sind, sind $\mathrm{Ker}(P) \subseteq \mathfrak{H}$ und $\mathrm{Ran}(P) = \mathrm{Ker}(\mathbb{1} - P) \subseteq \mathfrak{H}$ abgeschlossene Unterräume.

Ist weiterhin $\varphi \in \mathrm{Ran}(P)$, so gibt es ein $\eta \in \mathfrak{H}$ mit $\varphi = P\eta$ und dann gilt $(\mathbb{1}-P)\varphi = P\eta - P^2\eta = P\eta - P\eta = 0$, also ist $\varphi \in \mathrm{Ker}(\mathbb{1} - P)$. Ist umgekehrt $\hat{\varphi} \in \mathrm{Ker}(\mathbb{1} - P)$, so ist $\varphi = P\varphi \in \mathrm{Ran}(P)$. Wiederholen wir dieses Argument mit P durch $\mathbb{1} - P$ ersetzt, so erhalten wir

$$
\mathrm{Ran}(P) \;=\; \mathrm{Ker}(\mathbb{1} - P) \quad \text{und} \quad \mathrm{Ran}(\mathbb{1} - P) \;=\; \mathrm{Ker}(P)\,. \tag{IV.23}
$$

Insbesondere können wir jedes $\psi \in \mathfrak{H}$ schreiben als $\psi = P\psi + (\mathbb{1} - P)\psi$ und beobachten, dass $P\psi \in \mathrm{Ran}(P)$ und $(\mathbb{1} - P)\psi \in \mathrm{Ran}(\mathbb{1} - P) = \mathrm{Ker}(P)$, nach (IV.23). Also ist $\mathfrak{H} = \mathrm{Ran}(P) + \mathrm{Ker}(P)$.

Aus $\psi = P\eta \in \mathrm{Ran}(P)$ folgt $P\psi = P^2\eta = P\eta = \psi$. Ist außerdem $\psi \in \mathrm{Ker}(P)$, so folgt damit $\psi = P\psi = 0$, also $\mathrm{Ran}(P) \cap \mathrm{Ker}(P) = \{0\}$.

zu (iv): Wir erinnern zuerst an die Definition (IV.2) des Wegintegrals, dergemäß $P = \lim_{n\to\infty}\{P_n\}$ in Norm ist, wobei

$$P_n \;:=\; \sum_{k=0}^{2^n-1} \frac{r\,(\tau_n^{k+1} - \tau_n^k)}{A - \lambda - r\,\tau_n^k} \tag{IV.24}$$

mit $\tau_n := \exp[2\pi i \cdot 2^{-n}]$ sind.

Für jedes $k \in \mathbb{Z}_0^{2^n-1}$ ist $\lambda + r\tau_n^k \in \rho(A)$ und somit $(A - \lambda - r\tau_n^k)^{-1}[\mathfrak{H}] \subseteq \mathcal{D}_A$. Da $\mathcal{D}_A \subseteq \mathfrak{H}$ ein Teilraum ist, folgt damit $\mathrm{Ran}(P_n) \subseteq \mathcal{D}_A$. Außerdem definiert AP_n einen beschränkten Operator auf $\mathfrak{H}$ mit

$$\|AP_n\|_{\mathrm{op}} \;\le r\,|\tau_n - 1|\,2^n \max_{|z|=r} \big\|A(A-\lambda-z)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} \;\le\; 2\pi\, r\,\big[1 + (|\lambda| + r)\,M\big] \;<\; \infty\,, \tag{IV.25}$$

da $|\tau_n - 1| = 2|\sin(2\pi \cdot 2^{-n})| \le 2\pi \cdot 2^{-n}$ und

$$\big\|A(A-\lambda-z)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} \;\le\; 1 \;+\; (|\lambda| + r)\big\|(A-\lambda-z)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} \;\le\; 1 \;+\; (|\lambda| + r)\,M \tag{IV.26}$$

für $|z| = r$ gelten.

Ist nun $1 \le m < n$, so gibt es für jedes $k \in \mathbb{Z}_0^{2^n-1}$ eindeutige $\ell \in \mathbb{Z}_0^{2^m-1}$ und $j \in \mathbb{Z}_0^{2^{n-m}-1}$ so, dass $k = \ell \cdot 2^{n-m} + j$. Außerdem sind dann $\tau_m = \tau_n^{2^{n-m}}$ und

$$\tau_n^k \;=\; \tau_n^{\ell\cdot 2^{n-m}}\,\tau_n^j \;=\; \tau_m^\ell\,\tau_n^j\,. \tag{IV.27}$$

Eingesetzt in (IV.24) ergibt dies

$$P_n \;=\; \sum_{\ell=0}^{2^m-1}\;\sum_{j=0}^{2^{n-m}-1} \frac{r\,\tau_m^\ell\,\tau_n^j(\tau_n - 1)}{A - \lambda - r\,\tau_m^\ell\,\tau_n^j}\,. \tag{IV.28}$$

Wir beobachten weiter, dass

$$\tau_m^{\ell+1} - \tau_m^\ell \;=\; \tau_m^\ell\big(\tau_n^{2^{n-m}} - 1\big) \;=\; \sum_{j=0}^{2^{n-m}-1} \tau_m^\ell\big(\tau_n^{j+1} - \tau_n^j\big)\,, \tag{IV.29}$$

woraus wir

$$P_m \;=\; \sum_{\ell=0}^{2^m-1} \frac{r\,(\tau_m^{\ell+1} - \tau_m^\ell)}{A - \lambda - r\,\tau_m^\ell}\,. \;=\; \sum_{\ell=0}^{2^m-1}\;\sum_{j=0}^{2^{n-m}-1} \frac{r\,\tau_m^\ell\,\tau_n^j(\tau_n - 1)}{A - \lambda - r\,\tau_m^\ell} \tag{IV.30}$$

erhalten, was zusammen mit (IV.28)

$$\begin{aligned} P_n - P_m \;&=\; \sum_{\ell=0}^{2^m-1}\;\sum_{j=0}^{2^{n-m}-1} r\,\tau_m^\ell\,\tau_n^j(\tau_n - 1)\Big\{\big(A - \lambda - r\,\tau_m^\ell\,\tau_n^j\big)^{-1} \;-\; \big(A - \lambda - r\,\tau_m^\ell\big)^{-1}\Big\} \\ &=\; \sum_{\ell=0}^{2^m-1}\;\sum_{j=0}^{2^{n-m}-1} \frac{-r^2\,\tau_m^{2\ell}\,\tau_n^{2j}(\tau_n - 1)\,(\tau_n^j - 1)}{(A - \lambda - r\,\tau_m^\ell\,\tau_n^j)\,(A - \lambda - r\,\tau_m^\ell)} \end{aligned} \tag{IV.31}$$

ergibt. Aus (IV.31) folgen mit (IV.16), (IV.26) und $|\tau_n^p - 1| = 2|\sin(2\pi p \cdot 2^{-n-1})| \le 2\pi\, p\, 2^{-n}$, für $p = 1$ und $p = j \le 2^{n-m}$ die Normabschätzungen

$$\|P_n - P_m\|_{\mathrm{op}} \le r^2 M^2 |\tau_n - 1|\, |\tau_n^j - 1|\, 2^m\, 2^{n-m} \;\le\; (2\pi r)^2 M^2\, 2^{-m}\,, \tag{IV.32}$$

$$\begin{aligned} \|AP_n - AP_m\|_{\mathrm{op}} &\le r^2 M \big[1 + (|\lambda| + r)\, M\big]\, |\tau_n - 1|\, |\tau_n^j - 1|\, 2^m\, 2^{n-m} \\ &\le (2\pi r)^2 M \big[1 + (|\lambda| + r)\, M\big]\, 2^{-m}\,. \end{aligned} \tag{IV.33}$$

Damit sind $(P_n)_{n=1}^\infty$ als auch $(AP_n)_{n=1}^\infty$ Cauchy-Folgen in $\mathcal{B}(\mathfrak{H})$, und in der Tat wussten wir dies für $(P_n)_{n=1}^\infty$ schon, da $P_n \to P$, für $n \to \infty$.

Ist nun $\psi = P\psi \in \mathrm{Ran}(P)$, so setzen wir $\psi_n := P_n\psi \in \mathcal{D}_A$ und beobachten, dass $\|\psi_n - \psi\| = \|(P_n - P)\psi\| \to 0$, für $n \to \infty$. Außerdem ist auch $(A\psi_n)_{n=1}^\infty \in \mathfrak{H}^{\mathbb{N}}$ eine Cauchy-Folge, weil $\|A\psi_n - A\psi_m\| = \|(AP_n - AP_m)\psi\| \le \|AP_n - AP_m\|_{\mathrm{op}}\, \|\psi\|$. Also ist auch $(A\psi_n)_{n=1}^\infty \in \mathfrak{H}^{\mathbb{N}}$ konvergent, d.h. $\varphi := \lim_{n\to\infty}\{A\psi_n\} \in \mathfrak{H}$. Da $(A, \mathcal{D}_A)$ abgeschlossen ist, folgt nun $\psi \in \mathcal{D}_A$ und $A\psi = \lim_{n\to\infty}\{A\psi_n\}$. Schließlich ist

$$A\psi \;=\; \lim_{n\to\infty} \big\{AP_n\psi\big\} \;=\; \lim_{n\to\infty} \big\{P_n A\psi\big\} \;=\; PA\psi \;\in\; \mathrm{Ran}(P)\,. \tag{IV.34}$$

M.a.W. lässt sich $(PA, \mathcal{D}_A) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ zu einem beschränkten Operator $\widetilde{PA} \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ fortsetzen, und es gilt $\widetilde{PA} = AP$. (Die Faktoren P und A können in $\widetilde{PA}$ nicht mehr getrennt werden).

zu (v): Sei $\psi \in \mathrm{Ker}(P)$. Da $\mathcal{D}_A \subseteq \mathfrak{H}$ dicht liegt, gibt es zu jedem $\delta > 0$ ein $\tilde{\varphi} \in \mathcal{D}_A$ so, dass $\|\psi - \tilde{\varphi}\| \le \delta$. Wir setzen $\varphi := (\mathbb{1} - P)\tilde{\varphi} \in \mathrm{Ran}(\mathbb{1} - P) = \mathrm{Ker}(P)$. Wegen $\mathrm{Ran}(P) \subseteq \mathcal{D}_A$ ist mit $\tilde{\varphi}$ auch $\varphi = \tilde{\varphi} - P\tilde{\varphi} \in \mathcal{D}_A$, also ist $\varphi \in \mathrm{Ker}(P) \cap \mathcal{D}_A$. Da

$$\|\psi - \varphi\| \;=\; \big\|(\mathbb{1} - P)\psi - (\mathbb{1} - P)\tilde{\varphi}\big\| \;\le\; \|\mathbb{1} - P\|_{\mathrm{op}}\, \|\psi - \tilde{\varphi}\| \;\le\; (1 + rM)\,\delta \tag{IV.35}$$

im Limes $\delta \to 0$ beliebig klein wird, ist $\mathrm{Ker}(P) \cap \mathcal{D}_A$ in $\mathrm{Ker}(P)$ dicht.

Da $AP = PA$ auf $\mathrm{Ran}(P)$ gilt, ist $P[A\varphi] = A[P\varphi] = 0$, für jedes $\varphi \in \mathrm{Ker}(P) \cap \mathcal{D}_A$, und es folgt

$$A[\mathrm{Ker}(P) \cap \mathcal{D}_A] \;\subseteq\; \mathrm{Ker}(P)\,. \tag{IV.36}$$

zu (vi): Seien $\{\psi_1, \ldots, \psi_n\} \subseteq \mathrm{Ran}(P)$ eine Basis. Da $A[\mathrm{Ran}(P)] \subseteq \mathrm{Ran}(P)$ diesen n-dimensionalen Teilraum invariant lässt, ist $A = PAP$ auf $\mathrm{Ran}(P)$. daher kann die Wirkung von $A - \lambda$ auf $\mathrm{Ran}(P)$ durch die Matrix $(a_{i,j})_{i,j=1}^n \in \mathfrak{M}_{n\times n}(\mathbb{C})$ dargestellt werden. Sei nun $\psi \in \mathcal{D}_A$ ein Eigenvektor von A zum Eigenwert $\mu \in \mathbb{C} \setminus \{\lambda\}$. Dann ist

$$P\psi \;=\; \frac{-1}{2\pi i} \int_{\partial D(\lambda, r)} \frac{dz}{\mu - z}\, \psi \;=\; 0\,. \tag{IV.37}$$

Somit ist λ der einzige Eigenwert von A auf $\mathrm{Ran}(P)$. Die Jordansche Normalform von $(a_{i,j})_{i,j=1}^n$ ist also von der Form $\lambda \cdot \mathbb{1}_{n\times n} + D$, wobei alle nichtverschwindenden Matrixelemente von D oberhalb der Diagonalen liegen und D somit eine nilpotente Matrix mit $D^n = 0$ ist.

zu (vii): Zu $w \in \partial D(\lambda, r/2)$ definieren wir $\bar{R}(w)$ durch (IV.14) und beobachten, dass wegen $|w - z| \ge r/2$

$$\|\bar{R}(w)\|_{\mathrm{op}} \;\le\; 2 \max_{z \in \partial D(\lambda, r)} \big\|(A - z)^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} \;=\; 2M \;<\; \infty\,. \tag{IV.38}$$

Wir führen nun zwei zu (IV.18) ähnliche Berechnungen durch. Einerseits ist

$$\begin{aligned}\bar{R}(w)\,P &= \Big(\frac{-1}{2\pi i}\Big)^2 \int_{z\in\partial D(\lambda,r)} \int_{\tilde{z}\in\partial D(\lambda,r/3)} \frac{1}{w-z}\,\frac{1}{A-z}\,\frac{1}{A-\tilde{z}}\,dz\,d\tilde{z} \\ &= \Big(\frac{-1}{2\pi i}\Big)^2 \int_{z\in\partial D(\lambda,r)} \int_{\tilde{z}\in\partial D(\lambda,r/3)} \Big(\frac{1}{A-z} - \frac{1}{A-\tilde{z}}\Big)\frac{dz\,d\tilde{z}}{(w-z)(z-\tilde{z})} \\ &= \frac{-1}{2\pi i}\int_{z\in\partial D(\lambda,R)} \Big\{\frac{-1}{2\pi i}\int_{\tilde{z}\in\partial D(\lambda,r/3)} \frac{d\tilde{z}}{z-\tilde{z}}\Big\}\frac{dz}{(w-z)(A-z)} \\ &\quad - \frac{-1}{2\pi i}\int_{\tilde{z}\in\partial D(\lambda,r/3)} \Big\{\frac{-1}{2\pi i}\int_{z\in\partial D(\lambda,r)} \frac{dz}{(w-z)(z-\tilde{z})}\Big\}\frac{d\tilde{z}}{A-\tilde{z}}\,. \end{aligned} \tag{IV.39}$$

Da $z \notin \overline{D(\lambda, r/3)}$, verschwindet $\int_{\tilde{z}\in\partial D(\lambda,r/3)} \frac{d\tilde{z}}{z-\tilde{z}}$, und da $w, \tilde{z} \in D(\lambda, r)$ beide im Inneren der Kontur $\partial D(\lambda, r)$ liegen, verschwindet auch $\int_{z\in\partial D(\lambda,r)} \frac{dz}{(w-z)(z-\tilde{z})}$. Es folgt, dass

$$P\,\bar{R}(w) \;=\; \bar{R}(w)\,P \;=\; 0\,. \tag{IV.40}$$

Andererseits ist

$$\begin{aligned} A\,\bar{R}(w) \;=\; \bar{R}(w)\,A \;&=\; \Big(\frac{-1}{2\pi i}\Big)\int_{z\in\partial D(\lambda,r)} \frac{1}{w-z}\,\frac{A}{A-z}\,dz \\ &= \Big(\frac{-1}{2\pi i}\Big)\int_{z\in\partial D(\lambda,r)} \frac{dz}{w-z} - \Big(\frac{-1}{2\pi i}\Big)\int_{z\in\partial D(\lambda,r)} \frac{-z}{w-z}\,\frac{dz}{A-z} \\ &= \Big(\frac{-1}{2\pi i}\Big)\int_{z\in\partial D(\lambda,r)} \frac{dz}{w-z} - \Big(\frac{-1}{2\pi i}\Big)\int_{z\in\partial D(\lambda,r)} \frac{dz}{A-z} + \Big(\frac{-1}{2\pi i}\Big)\int_{z\in\partial D(\lambda,r)} \frac{w}{w-z}\,\frac{dz}{A-z} \\ &= \mathbb{1} - P + w\,\bar{R}(w)\,, \end{aligned} \tag{IV.41}$$

woraus wir

$$(A-w)\,\bar{R}(w) \;=\; \bar{R}(w)\,(A-w) \;=\; \mathbb{1} - P \tag{IV.42}$$

gewinnen. Also ist $\bar{R}(w) = (\mathbb{1} - P)\bar{R}(w)(\mathbb{1} - P)$ die Inverse der Restriktion von $A - w$ auf $\mathrm{Ker}(P) \cap \mathcal{D}$. □

IV.3. Analytische Familien und Störungstheorie isolierter, einfacher Eigenwerte

Wir führen zunächst den Begriff der *analytischen Familie vom Typ A* ein und zeigen seinen engen Zusammenhang mit der relativen Beschränktheit.

Definition IV.7. Seien $\Omega \subseteq \mathbb{C}$ eine offene, zusammenhängende Umgebung von $0 \in \Omega$ und nichtleer, $\mathfrak{H}$ ein (separabler komplexer) Hilbert-Raum und $\mathcal{D} \subseteq \mathfrak{H}$ ein dichter Unterraum. Eine Abbildung $(T, \mathcal{D}) : \Omega \to \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ heißt **analytische Familie vom Typ A** $:\Leftrightarrow$

(i) Für alle $\beta \in \Omega$ ist T_β abgeschlossen.

(ii) $T : \Omega \to \mathcal{B}(\mathcal{D};\mathfrak{H})$ ist analytisch, wobei der Hilbert-Raum $\big(\mathcal{D}\,,\,\langle\cdot|\cdot\rangle_{\mathcal{D}}\big)$ durch das Graphskalarprodukt $\langle\varphi|\psi\rangle_{\mathcal{D}} := \langle T_0\varphi|T_0\psi\rangle + \langle\varphi|\psi\rangle$ gegeben ist.

Lemma IV.8. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum, $(T,\mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ein dicht definierter, abgeschlossener Operator und $(V,\mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$. Dann gilt folgende Äquivalenz:*

(i) $(V,\mathcal{D})$ ist relativ T-beschränkt;

$\Leftrightarrow$(ii) $\mathbb{C} \ni \beta \mapsto T_\beta := T + \beta V \in \mathcal{B}(\mathcal{D};\mathfrak{H})$ ist eine analytische Familie vom Typ A.

Beweis. Sind $\beta, \beta_0 \in \mathbb{C}$, mit $\beta \neq \beta_0$, so ist

$$\frac{T_\beta - T_{\beta_0}}{\beta - \beta_0} \;=\; V\,. \tag{IV.43}$$

(i) $\Rightarrow$ (ii): Ist $(V,\mathcal{D})$ ist relativ T-beschränkt mit $\|V\psi\| \leq a\|T\psi\| + b\|\psi\|$, so ist

$$\|V\psi\| \;\leq\; a\|T\psi\| + b\|\psi\| \;\leq\; \sqrt{2}\,\max(a,b)\,\sqrt{\|T\psi\|^2 + \|\psi\|^2} \;=\; \sqrt{2}\,\max(a,b)\,\|\psi\|_{\mathcal{D}}\,, \tag{IV.44}$$

für alle $\psi \in \mathcal{D}$ und daher $V \in \mathcal{B}(\mathcal{D};\mathfrak{H})$ mit $\|V\|_{\mathcal{B}(\mathcal{D};\mathfrak{H})}$.

(i) $\Leftarrow$ (ii): Ist $\beta \mapsto T + \beta V$ eine analytische Familie vom Typ A, so ist die Ableitung ein beschränkter Operator $\mathcal{D} \to \mathfrak{H}$, d.h. für alle $\psi \in \mathcal{D}$ ist

$$\|V\psi\| \;\leq\; \|V\|_{\mathcal{B}(\mathcal{D};\mathfrak{H})}\,\|\psi\|_{\mathcal{D}} \;\leq\; \|V\|_{\mathcal{B}(\mathcal{D};\mathfrak{H})}\,\sqrt{\|T\psi\|^2 + \|\psi\|^2} \;=\; \|V\|_{\mathcal{B}(\mathcal{D};\mathfrak{H})}\,\big(\|T\psi\| \;+\; \|\psi\|\big)\,. \tag{IV.45}$$

□

Zur Vorbereitung des Beweises der Hauptaussage dieses Abschnitts beweisen wir noch folgendes Lemma

Lemma IV.9. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum und $P, Q \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ zwei Projektionen. Ist $\|P-Q\|_{\mathrm{op}} < 1$, so ist $\dim\mathrm{Ran}(P) = \dim\mathrm{Ran}(Q)$ (wobei auch beide Seiten unendlich sein können).*

Beweis. Wir setzen $X := \mathrm{Ran}(P) \subseteq \mathfrak{H}$ und $Y := \mathrm{Ran}(Q) \subseteq \mathfrak{H}$ und zeigen, dass $\dim(X) \neq \dim(Y)$ die Normschranke $\|P-Q\|_{\mathrm{op}} \geq 1$ nach sich zieht. Dazu können wir o.B.d.A. $\dim(X) > \dim(Y)$ annehmen. Insbesondere sind dann $\dim(Y) < \infty$ und $\dim(X) \geq \dim(Y) + 1$.

Wir bezeichnen weiterhin mit $\widehat{Q} := Q\big|_X \in \mathcal{B}(X;\mathfrak{H})$ die Einschränkung von Q auf X. Gemäß eines Lemmas der elementaren linearen Algebra gilt $\dim\mathrm{Ker}(\widehat{Q}) + \dim\mathrm{Ran}(\widehat{Q}) = \dim(X)$ und wegen $\dim\mathrm{Ran}(\widehat{Q}) \subseteq Y$ auch

$$\dim\mathrm{Ker}(\widehat{Q}) \;=\; \dim(X) - \dim\mathrm{Ran}(\widehat{Q}) \;\geq\; \dim(X) - \dim(Y) \;\geq\; 1\,. \tag{IV.46}$$

Andererseits ist

$$\mathrm{Ker}(\widehat{Q}) \;=\; \big\{\varphi \in X \;\big|\; Q\varphi = 0\big\} \;=\; \mathrm{Ran}(P) \,\cap\, \mathrm{Ker}(Q)\,, \tag{IV.47}$$

und zusammen mit (IV.46) erhalten wir die Existenz eines normierten Vektors $\varphi \in \mathrm{Ran}(P) \cap \mathrm{Ker}(Q)$, für den dann entsprechend

$$\|(P-Q)\varphi\| \;=\; \|P\varphi\| \;=\; \|\varphi\| \;=\; 1 \tag{IV.48}$$

gilt. Somit ist dann $\|P-Q\|_{\mathrm{op}} \geq 1$. □

Satz IV.10. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum, $(T_0, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ein dicht definierter, abgeschlossener Operator, $(V, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ relativ T_0-beschränkt und $T_\beta := T_0 + \beta V$ für $\beta \in \mathbb{C}$. Sei außerdem $\lambda_0 \in \sigma(T_0)$ ein einfacher, isolierter Eigenwert von T_0 mit normiertem Eigenvektor $\psi_0 \in \mathcal{D}$. Dann gibt es $r, \rho > 0$ so, dass folgende Aussagen gelten:*

(i) Für $\beta \in D(0, \rho)$ besitzt T_β einen einfachen und isolierten Eigenwert $\lambda_\beta \in D(\lambda_0, r)$, und dies ist der einzige Spektralwert in der Kreisscheibe, $\sigma(T_\beta) \cap D(\lambda_0, r) = \{\lambda_\beta\}$.

(ii) $D(0, \rho) \ni \beta \mapsto \lambda_\beta \in D(\lambda_0, r)$ ist analytisch.

(iii) Bezeichnet P_β die durch das Dunford-Cauchy-Integral (IV.12) *definierte Projektion auf λ_β, so ist auch $D(0, \rho) \ni \beta \mapsto P_\beta \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ analytisch.*

Beweis. Da V relativ T_0-beschränkt ist, gibt es Konstanten $a, b > 0$ so, dass $\|V\psi\| \leq a\|T_0\psi\| + b\|\psi\|$, für alle $\psi \in \mathcal{D}$ gilt. Weiterhin schließen wir aus der Annahme, dass λ_0 ein isolierter Eigenwert von T_0 ist, dass $\dot{D}(\lambda_0, 3r) = D(\lambda_0, 3r) \setminus \{\lambda_0\} \subseteq \rho(T_0)$, für $r > 0$ genügend klein, ist. Analog zu (IV.16) erhalten wir

$$M \ := \ \max_{|\zeta|=2r} \left\| \big(T_0 - \lambda_0 - \zeta\big)^{-1} \right\|_{\mathrm{op}} \ < \ \infty . \tag{IV.49}$$

Außerdem folgt aus (IV.49) und der relativen T_0-Beschränktheit von V, dass für alle $|\zeta| = 2r$ und alle $\varphi \in \mathfrak{H}$

$$\begin{aligned} \left\|V\,(T_0 - \lambda_0 - \zeta)^{-1}\varphi\right\| \ &\leq a \left\|T_0\,(T_0 - \lambda_0 - \zeta)^{-1}\varphi\right\| \ + \ b \left\|(T_0 - \lambda_0 - \zeta)^{-1}\varphi\right\| \\ &\leq a \left\|\mathbb{1} + (\lambda_0 - \zeta)(T_0 - \lambda_0 - \zeta)^{-1}\right\|_{\mathrm{op}} \|\varphi\| \ + \ b \left\|(T_0 - \lambda_0 - \zeta)^{-1}\right\|_{\mathrm{op}} \|\varphi\| \end{aligned} \tag{IV.50}$$

und damit

$$\forall\, |\zeta| = 2r : \quad \left\|V\,(T_0 - \lambda_0 - \zeta)^{-1}\right\|_{\mathrm{op}} \ \leq \ \frac{1}{2\tilde{\rho}} \ := \ a\big(1 + (|\lambda_0| + 2r)\,M\big) \ + \ bM . \tag{IV.51}$$

Damit ist für $|\zeta| = 2r$ und $|\beta| < \tilde{\rho}$ die Neumann-Reihe

$$R_\beta(\zeta) \ := \ (T_\beta - \lambda_0 - \zeta)^{-1} \ = \ \sum_{n=0}^{\infty} (T_0 - \lambda_0 - \zeta)^{-1} \big[(-\beta V)\,(T_0 - \lambda_0 - \zeta)^{-1}\big]^n \tag{IV.52}$$

normkonvergent und insbesondere $T_\beta - \lambda_0 - \zeta$ invertibel mit

$$\|R_\beta(\zeta)\|_{\mathrm{op}} \ = \ \left\|(T_\beta - \lambda_0 - \zeta)^{-1}\right\|_{\mathrm{op}} \ \leq \ 2\,M . \tag{IV.53}$$

$$\|V\,R_\beta(\zeta)\|_{\mathrm{op}} \ \leq \ \frac{1}{2\tilde{\rho}} \sum_{n=0}^{\infty} 2^{-n} \ = \ \frac{1}{\tilde{\rho}} . \tag{IV.54}$$

Außerdem erhalten wir für $\tilde{\beta}, \beta \in D(0, \tilde{\rho})$, $\tilde{\beta} \neq \beta$, dass

$$\begin{aligned} \frac{R_{\tilde{\beta}}(\zeta) - R_\beta(\zeta)}{\tilde{\beta} - \beta} \ + \ R_\beta(\zeta)\,V\,R_\beta(\zeta) \ &= \ -\,[R_{\tilde{\beta}}(\zeta) - R_\beta(\zeta)]\,V\,R_\beta(\zeta) \\ &= (\tilde{\beta} - \beta)\,R_{\tilde{\beta}}(\zeta)\,V\,R_\beta(\zeta)\,V\,R_\beta(\zeta) , \end{aligned} \tag{IV.55}$$

was

$$\left\| \frac{R_{\tilde\beta}(\zeta) - R_\beta(\zeta)}{\tilde\beta - \beta} \;+\; R_\beta(\zeta)\, V\, R_\beta(\zeta) \right\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; \frac{8M}{\tilde\rho^2}\, |\tilde\beta - \beta| \tag{IV.56}$$

nach sich zieht. Somit ist $D(0,\tilde\rho) \ni \beta \mapsto R_\beta(\zeta) \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ für jedes $\zeta \in \partial D(0,2r)$ holomorph mit

$$\frac{dR_\beta(\zeta)}{d\beta} \;=\; -R_\beta(\zeta)\, V\, R_\beta(\zeta)\,. \tag{IV.57}$$

Analog zeigt man, dass für festes $\beta \in D(0,\tilde\rho)$ auch $\zeta \mapsto R_\beta(\zeta)$ in einem kleinen offenen Annulus $D(0, 2r+\varepsilon) \setminus D(0, 2r-\varepsilon)$, der $D(0,2r)$ enthält, holomorph ist mit

$$\frac{dR_\beta(\zeta)}{d\zeta} \;=\; -R_\beta(\zeta)^2\,. \tag{IV.58}$$

<u>*zu (iii):*</u> Insbesondere ist $\zeta \mapsto R_\beta(\zeta)$ entlang des Kreises $\zeta \in D(0,2r)$ stetig und das Dunford-Cauchy-Integral

$$P_\beta \;:=\; \frac{-1}{2\pi i} \int_{\partial D(\lambda_0, 2r)} \frac{dz}{T_\beta - z} \;=\; \frac{-1}{2\pi i} \int_{\partial D(0,2r)} R_\beta(\zeta)\, d\zeta \;\in\; \mathcal{B}(\mathfrak{H}) \tag{IV.59}$$

ist wohldefiniert, beschränkt in Norm und eine Projektion, $P_\beta^2 = P_\beta$. Sind weiterhin $\tilde\beta, \beta \in D(0,\tilde\rho)$ mit $\tilde\beta \neq \beta$, so folgt aus (IV.56), dass

$$\frac{P_{\tilde\beta} - P_\beta}{\tilde\beta - \beta} \;+\; \frac{-1}{2\pi i} \int_{\partial D(0,2r)} R_\beta(\zeta)\, V\, R_\beta(\zeta)\, d\zeta \;=\; -\,\frac{\tilde\beta - \beta}{2\pi i} \int_{\partial D(0,2r)} R_{\tilde\beta}(\zeta)\, V\, R_\beta(\zeta)\, V\, R_\beta(\zeta)\, d\zeta\,. \tag{IV.60}$$

Dies impliziert die Holomorphie der Abbildung $D(0,\tilde\rho) \ni \beta \mapsto P_\beta \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ mit

$$\frac{dP_\beta}{d\beta} \;=\; \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial D(0,2r)} R_\beta(\zeta)\, V\, R_\beta(\zeta)\, d\zeta \quad \text{und} \quad \sup_{\beta \in D(0,\tilde\rho)} \left\| \frac{dP_\beta}{d\beta} \right\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; \frac{2r\, M}{\tilde\rho}\,. \tag{IV.61}$$

<u>*zu (i) und (ii):*</u> Da $D(0,\tilde\rho)$ zusammenhängend ist, können je zwei Punkte $\tilde\beta, \beta \in D(0,\tilde\rho)$ durch einen stetigen Weg verbunden werden, und da $D(0,\tilde\rho)$ sogar konvex ist, können wir $\tilde\beta$ und $\beta \neq \tilde\beta$ auch etwa durch das Geradensegment $\gamma : [0,1] \to D(0,\tilde\rho)$, $\beta(t) := t\tilde\beta + (1-t)\beta$ verbinden. Dann sind $P_\beta = P_{\beta(0)}$, $P_{\tilde\beta} = P_{\beta(1)}$ und

$$\|P_{\beta(t)} - P_{\beta(s)}\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; (t-s)\, \frac{2r\, M\, |\tilde\beta - \beta|}{\tilde\rho} \;\leq\; 2r\, M\, (t-s) \;<\; 1\,, \tag{IV.62}$$

für $s, t \in [0,1]$ mit $0 < t - s < (2rM)^{-1}$. Aus Lemma IV.9 folgt nun, dass $\dim \mathrm{Ran}[P_{\beta(t)}] = \dim \mathrm{Ran}[P_{\beta(s)}]$, damit auch $\dim \mathrm{Ran}[P_{\tilde\beta}] = \dim \mathrm{Ran}[P_\beta]$, für alle $\tilde\beta, \beta \in D(0,\tilde\rho)$ und schließlich

$$\forall\, \beta \in D(0,\tilde\rho): \qquad \dim \mathrm{Ran}[P_\beta] \;=\; 1\,. \tag{IV.63}$$

Weiterhin ist mit P_0 auch P_0^* eine Projektion derselben Dimension $\dim \mathrm{Ran}(P_0^*) = \dim \mathrm{Ran}(P_0) = 1$ und Norm, und wir notieren

$$\psi_0^* \;:=\; P_0^* \psi_0 \;\in\; \mathrm{Ran}(P_0^*)\,. \tag{IV.64}$$

Da

$$\langle \psi_0^* | \psi_0 \rangle \;=\; \langle P_0^* \psi_0 | \psi_0 \rangle \;=\; \langle \psi_0 | P_0 \psi_0 \rangle \;=\; \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1\,, \tag{IV.65}$$

sind $\psi_0^* \neq 0$ und deshalb $\mathrm{Ran}(P_0^*) = \mathbb{C} \cdot \psi_0^*$. Wir beobachten nun, dass $P_0 \psi_0 = \psi_0$ und mit (IV.61) deshalb

$$\big| \langle \psi_0^* \,|\, P_\beta \psi_0 \rangle \big| \;=\big| 1 \,+\, \langle \psi_0^* \,|\, (P_\beta - P_0) \psi_0 \rangle \big| \;\geq\; 1 \,-\, \frac{2r\, M\, \|\psi_0^*\|\, \beta}{\tilde{\rho}} \;\geq\; \frac{1}{2}\,, \tag{IV.66}$$

$$\Big| \|P_\beta \psi_0\| \;-\; 1 \Big| \;\leq \|(P_\beta - P_0)\psi_0\| \;\leq\; \frac{2r\, M\, \beta}{\tilde{\rho}} \;\leq\; \frac{1}{2}\,, \tag{IV.67}$$

gilt, falls $\beta \in D(0, \rho)$ mit

$$\rho \;:=\; \frac{\tilde{\rho}}{2 \;+\; 4r\, M\, (1 + \|\psi_0^*\|)} \;<\; \frac{\tilde{\rho}}{2}\,. \tag{IV.68}$$

Dank (IV.66) existiert für $\beta \in D(0, \rho)$ der Rayleigh-Quotient

$$\lambda_\beta \;:=\; \frac{\langle \psi_0^* \,|\, T_\beta\, P_\beta \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0^* \,|\, P_\beta \psi_0 \rangle}\,, \tag{IV.69}$$

und der Vektor

$$\psi_\beta \;:=\; P_\beta \psi_0 \tag{IV.70}$$

erfüllt mit (IV.67) die Normschranke

$$\frac{1}{2} \;\leq\; \|\psi_\beta\| \;\leq\; \frac{3}{2} \tag{IV.71}$$

und spannt damit $\mathrm{Ran}(P_\beta) = \mathbb{C} \cdot \psi_\beta \subseteq \mathcal{D}$ auf. Außerdem folgt aus $|\langle \psi_0^* | P_\beta \psi_0 \rangle| \geq \frac{1}{2}$ und der Analytizität von $\beta \mapsto P_\beta$ und $\beta \mapsto T_\beta$ auch die Analytizität von $\beta \mapsto \lambda_\beta$.

Wie in Satz IV.6 *(iii)-(v)* sind $\mathrm{Ran}(P_\beta)$ und $\mathrm{Ker}(P_\beta)$ komplementäre, abgeschlossene und unter T_β invariante Unterräume

$$\mathrm{Ran}(P_\beta) + \mathrm{Ker}(P_\beta) \;=\; \mathfrak{H}\,, \quad \mathrm{Ran}(P_\beta) \cap \mathrm{Ker}(P_\beta) \;=\; \{0\}\,, \tag{IV.72}$$

$$T_\beta[\mathrm{Ran}(P_\beta)] \;\subseteq\; \mathrm{Ran}(P_\beta)\,, \quad T_\beta[\mathrm{Ker}(P_\beta) \cap \mathcal{D}] \;\subseteq\; \mathrm{Ker}(P_\beta)\,. \tag{IV.73}$$

Insbesondere folgt, dass es eine komplexe Zahl $\mu \in \mathbb{C}$ so gibt, dass $T_\beta \psi_\beta = \mu \psi_\beta$. Setzen wir dies ein, so erhalten wir

$$\mu\, \langle \psi_0^* | \psi_\beta \rangle \;=\; \langle \psi_0^* | T_\beta \psi_\beta \rangle \;=\; \lambda_\beta\, \langle \psi_0^* | \psi_\beta \rangle \tag{IV.74}$$

und wegen $\langle \psi_0^* | \psi_\beta \rangle = \langle \psi_0^* | T_\beta \psi_0 \rangle \neq 0$ auch $\mu = \lambda_\beta$, d.h. $T_\beta \psi_\beta = \lambda_\beta \psi_\beta$.
Analog zu (IV.14) definieren wir

$$\bar{R}_\beta(\zeta) \ := \frac{-1}{2\pi i} \int_{\eta \in \partial D(0,2r)} \frac{1}{\zeta - \eta} \, \frac{d\eta}{T_\beta - \lambda_0 - \eta} \, , \tag{IV.75}$$

für $\zeta \in D(\lambda_0, r)$ und $\beta \in D(0, \rho)$ und beobachten, dass wegen $|\zeta - \eta| \geq r$ auch

$$\|\bar{R}_\beta(\zeta)\|_{\mathrm{op}} \ \leq \ 2 \max_{|\eta|=2r} \|R_\beta(\eta)\|_{\mathrm{op}} \ \leq \ 4M \ < \ \infty \, . \tag{IV.76}$$

Wie in (IV.39)-(IV.42) folgt nun, dass

$$P_\beta \, \bar{R}_\beta(\zeta) \ = \bar{R}_\beta(\zeta) \, P_\beta \ = \ 0 \tag{IV.77}$$

$$(T_\beta - \lambda_0 - \zeta) \, \bar{R}_\beta(\zeta) \ = \bar{R}_\beta(\zeta) \, (T_\beta - \lambda_0 - \zeta) \ = \ \mathbb{1} - P_\beta \, , \tag{IV.78}$$

d.h. $\bar{R}_\beta(\zeta) = (\mathbb{1} - P_\beta) \bar{R}_\beta(\zeta) (\mathbb{1} - P_\beta)$ ist die Inverse der Restriktion von $T_\beta - \lambda_0 - \zeta$ auf $\mathrm{Ker}(P_\beta) \cap \mathcal{D}$. Für alle $\beta \in D(0, \rho)$ ist damit aber λ_β der einzige Spektralpunkt in $D(\lambda_0, r)$. □

Im vorigen Satz IV.10 wurde bewiesen, dass der gestörte isolierte einfache Eigenwert λ_β der Operators $T_\beta = T_0 + \beta V$ durch den Rayleigh-Quotienten (IV.69)

$$\lambda_\beta \ := \ \frac{\langle \psi_0^* \mid T_\beta \, P_\beta \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0^* \mid P_\beta \psi_0 \rangle} \tag{IV.79}$$

gegeben und eine analytische Funktion $\beta \mapsto \lambda_\beta$ für kleine $|\beta|$ ist. Insbesondere kann λ_β für kleine $|\beta|$ in eine konvergente Potenzreihe

$$\lambda_\beta \ = \ \sum_{n=0}^{\infty} a_n \, \beta^n \tag{IV.80}$$

entwickelt werden. Wir wollen nun kurz beleuchten, wie man die Koeffizienten a_n, die durch Division zweier Potenreihen resultieren, berechnet. Die Projektion P_β erhalten wir für $|\beta| < \rho$ durch die normkonvergente Neumann-Reihe

$$P_\beta \ = \ \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{(-1)^{k+1}}{2\pi i} \int_{\partial D(0,2r)} R_0(\zeta) \, \big[V \, R_0(\zeta) \big]^k \, d\zeta \right) \beta^k \, , \tag{IV.81}$$

und damit auch die Reihe für $T_\beta P_\beta$, nämlich

$$
\begin{aligned}
T_\beta P_\beta \;&=\; \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{(-1)^{k+1}}{2\pi i} \int_{\partial D(0,2r)} \big(T_0 + \beta V\big)\, R_0(\zeta)\, \big[V\, R_0(\zeta)\big]^k \, d\zeta \right) \beta^k \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{(-1)^{k+1}}{2\pi i} \int_{\partial D(0,2r)} T_0\, R_0(\zeta)\, \big[V\, R_0(\zeta)\big]^k \, d\zeta \right) \beta^k \\
&\qquad + \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{(-1)^{k+1}}{2\pi i} \int_{\partial D(0,2r)} \big[V\, R_0(\zeta)\big]^{k+1} \, d\zeta \right) \beta^{k+1} \\
&= \frac{-1}{2\pi i} \int_{\partial D(0,2r)} T_0\, R_0(\zeta)\, d\zeta \\
&\qquad + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{(-1)^{k+1}}{2\pi i} \int_{\partial D(0,2r)} (\lambda_0 + \zeta)\, R_0(\zeta)\, \big[V\, R_0(\zeta)\big]^k \, d\zeta \right) \beta^k \qquad \text{(IV.82)} \\
&= T_0\, P_0 \;+\; \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{(-1)^{k+1}}{2\pi i} \int_{\partial D(0,2r)} (\lambda_0 + \zeta)\, R_0(\zeta)\, \big[V\, R_0(\zeta)\big]^k \, d\zeta \right) \beta^k \,.
\end{aligned}
$$

Wir berechnen nun exemplarisch a_1. Dazu beobachten wir, dass es eine Konstante $C < \infty$ gibt, sodass

$$
\begin{aligned}
\langle \psi_0^* \,|\, P_\beta \psi_0 \rangle \;&=\; 1 \;+\; \left(\frac{1}{2\pi i} \int_{\partial D(0,2r)} \big\langle \psi_0 \,\big|\, P_0\, R_0(\zeta)\, V\, R_0(\zeta)\, \psi_0 \big\rangle \, d\zeta \right) \beta \;+\; \gamma_\beta\, \beta^2 \\
&= 1 \;+\; \left(\frac{1}{2\pi i} \int_{\partial D(0,2r)} \frac{d\zeta}{\zeta^2} \right) \langle \psi_0 \,|\, P_0\, V\, \psi_0 \rangle\, \beta \;+\; \gamma_\beta\, \beta^2 \,, \\
&= 1 \;+\; \gamma_\beta \cdot \beta^2 \,, \qquad \text{(IV.83)}
\end{aligned}
$$

und

$$
\begin{aligned}
\langle \psi_0^* \,|\, T_\beta\, P_\beta \psi_0 \rangle \;&=\; \lambda_0 \;+\; \left(\frac{1}{2\pi i} \int_{\partial D(0,2r)} (\lambda_0 + \zeta)\, \big\langle \psi_0 \,\big|\, P_0\, R_0(\zeta)\, V\, R_0(\zeta)\, \psi_0 \big\rangle \, d\zeta \right) \beta \;+\; \delta_\beta\, \beta^2 \\
&= \lambda_0 \;+\; \frac{1}{2\pi i} \left(\int_{\partial D(0,2r)} \frac{\lambda_0\, d\zeta}{\zeta^2} \;+\; \int_{\partial D(0,2r)} \frac{d\zeta}{\zeta} \right) \langle \psi_0 \,|\, P_0\, V\, \psi_0 \rangle\, \beta \;+\; \delta_\beta\, \beta^2 \\
&= \lambda_0 \;+\; \langle \psi_0^* \,|\, V\, \psi_0 \rangle\, \beta \;+\; \delta_\beta\, \beta^2 \,, \qquad \text{(IV.84)}
\end{aligned}
$$

mit $\sup_{|\beta| \leq \rho} \big\{ |\gamma_\beta| + |\delta_\beta| \big\} \leq C$, wobei wir $\langle \psi_0^* | \varphi \rangle = \langle \psi_0 | P_0 \varphi \rangle$ verwenden, was für jedes $\varphi \in \mathfrak{H}$ richtig ist. Also ist

$$
\begin{aligned}
\lambda_\beta \;&=\; \frac{\lambda_0 + \langle \psi_0^* | V \psi_0 \rangle\, \beta + \delta_\beta\, \beta^2}{1 + \gamma_\beta\, \beta^2} \\
&= \lambda_0 + \langle \psi_0^* | V \psi_0 \rangle\, \beta + \left(\delta_\beta \;-\; \frac{(\lambda_0 + \langle \psi_0^* | V \psi_0 \rangle\, \beta + \delta_\beta\, \beta^2)\, \gamma_\beta}{1 + \gamma_\beta\, \beta^2} \right) \beta^2 \,, \qquad \text{(IV.85)}
\end{aligned}
$$

woraus wir

$$a_1 \;=\; \langle \psi_0^* \,|\, V\,\psi_0 \rangle \;=\; \langle \psi_0 \,|\, P_0\, V\, P_0\, \psi_0 \rangle \tag{IV.86}$$

gewinnen.

V. Die Feshbach-Schur-Abbildung

In diesem Kapitel steht eine alternative Methode zur störungstheoretischen Analyse des Spektralproblems $H_\beta = T + \beta V$ im Mittelpunkt: die *glatte Feshbach-Schur-Abbildung* [?].

V.1. Feshbach-Schur-Paare und Isospektralität

Definition V.1. Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum und $(H, \mathcal{D}), (T, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ zwei auf $\mathcal{D} \subseteq \mathfrak{H}$ dicht definierte, abgeschlossene lineare Operatoren auf $\mathfrak{H}$. Seien weiterhin $\chi, \overline{\chi} \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ zwei beschränkte lineare Operatoren auf $\mathfrak{H}$, die $\mathcal{D}$ invariant lassen, untereinander und mit T kommutieren und eine Partition der Eins definieren,

$$\chi(\mathcal{D}),\, \overline{\chi}(\mathcal{D}) \;\subseteq\; \mathcal{D}\,, \quad \chi\,\overline{\chi} \;=\; \overline{\chi}\,\chi\,, \quad T\,\chi \;=\; \chi\,T\,, \;\; T\,\overline{\chi} \;=\; \overline{\chi}\,T\,, \quad \chi^2 + \overline{\chi}^2 \;=\; \mathbb{1}\,. \tag{V.1}$$

Weiterhin seien mit $W := H - T$ der lineare Operator $(W, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ relativ T-beschränkt mit relativer Schranke $a \leq 1/2$,

$$W_\chi \;:=\; \chi\,W\,\chi\,, \qquad W_{\overline{\chi}} \;:=\; \overline{\chi}\,W\,\overline{\chi}\,, \tag{V.2}$$

$$H_\chi \;:=\; T \,+\, W_\chi\,, \qquad H_{\overline{\chi}} \;:=\; T \,+\, W_{\overline{\chi}}\,, \tag{V.3}$$

und $H_{\overline{\chi}}$ auf $\mathrm{Ran}(\overline{\chi})$ beschränkt invertibel. Dann heißt (H, T) ein **Feshbach-Schur-Paar** zu χ. Die **glatte Feshbach-Schur-Abbildung** $(H, T) \mapsto F_\chi(H, T)$ ist durch den linearen Operator

$$F_\chi(H, T) \;:=\; T \,+\, W_\chi \,-\, \chi W \overline{\chi} (H_{\overline{\chi}})^{-1} \overline{\chi} W \chi \tag{V.4}$$

definiert. Außerdem definieren wir zum Feshbach-Schur-Paar (H, T) noch die beschränkten linearen Operatoren $Q_\chi(H, T) \in \mathcal{B}\big(\mathrm{Ran}[\chi]; \mathcal{H}\big)$ und $Q_\chi^\#(H, T) \in \mathcal{B}\big(\mathcal{H}; \mathrm{Ran}[\chi]\big)$ durch

$$Q_\chi(H, T) \;:=\; \chi \,-\, \overline{\chi}\,(H_{\overline{\chi}})^{-1} \overline{\chi} W \chi \quad \text{und} \quad Q_\chi^\#(H, T) \;:=\; \chi \,-\, \chi W \overline{\chi}\,(H_{\overline{\chi}})^{-1} \overline{\chi}\,. \tag{V.5}$$

Das zum Feshbach-Schur-Paar (H, T) gehörige Bild $F_\chi(H, T)$ unter der glatten Feshbach-Schur-Abbildung ist zu H im Sinne des folgenden Satzes *isospektral.*

Satz V.2 (Isospektralität)**.** *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum und $(H, \mathcal{D}), (T, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ zwei auf $\mathcal{D} \subseteq \mathfrak{H}$ dicht definierte, abgeschlossene lineare Operatoren auf $\mathfrak{H}$. Seien weiterhin $\chi, \overline{\chi} \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ zwei beschränkte lineare Operatoren auf $\mathfrak{H}$, die* (V.1) *erfüllen. Das zu χ gehörige Feshbach-Schur-Paar (H, T) und ihr Bild $F_\chi(H, T)$ unter der glatten Feshbach-Schur-Abbildung besitzt die folgenden Eigenschaften.*

(i) *H ist auf $\mathfrak{H}$ genau dann beschränkt invertibel, wenn $F_\chi(H,T)$ beschränkt invertibel auf* $\mathrm{Ran}(\chi)$ *ist. In diesem Fall gelten*

$$H^{-1} = Q_\chi(H,T)\, F_\chi(H,T)^{-1}\, Q_\chi(H,T)^{\#} + \overline{\chi}\, H_{\overline{\chi}}^{-1} \overline{\chi}\,, \tag{V.6}$$

$$F_\chi(H,T)^{-1} = \chi\, H^{-1}\, \chi + \overline{\chi}\, T^{-1} \overline{\chi}\,. \tag{V.7}$$

(ii) $\mathrm{Ker}[H]$ *und* $\mathrm{Ker}[F_\chi(H,T)]$ *sind isomorph und* $\chi : \mathrm{Ker}[H] \to \mathrm{Ker}[F_\chi(H,T)]$ *und* $Q_\chi(H,T) : \mathrm{Ker}[F_\chi(H,T)] \to \mathrm{Ker}[H]$ *sind zueinander inverse, beschränkte Isomorphismen.*

(iii) *Sind zusätzlich $\chi = \chi^*$, $H = H^*$ und $T = T^*$ selbstadjungiert und*

$$M := (H_{\overline{\chi}})^{-1}\, \overline{\chi}\, W\, \chi \quad \textit{und} \quad N := \big(\mathbb{1} + M^* M\big)^{-1/2}, \tag{V.8}$$

so gelten

$$\lim_{\varepsilon \searrow 0} \mathrm{Im}\big\langle \psi \big|\, (H - i\varepsilon)^{-1}\, \psi \big\rangle = \tag{V.9}$$
$$\lim_{\varepsilon \searrow 0} \mathrm{Im}\Big\langle N\, Q_\chi(H,T)^*\, \psi \Big|\, \big(N\, F_\chi(H,T)\, N - i\varepsilon\big)^{-1}\, N\, Q_\chi(H,T)^*\, \psi \Big\rangle$$

und

$$\lim_{\varepsilon \searrow 0} \mathrm{Im}\big\langle \psi \big|\, \big(N\, F_\chi(H,T)\, N - i\varepsilon\big)^{-1}\, \psi \big\rangle = \lim_{\varepsilon \searrow 0} \mathrm{Im}\big\langle \chi\, N^{-1}\, \psi \big|\, (H - i\varepsilon)^{-1}\, \chi\, N^{-1}\, \psi \big\rangle, \tag{V.10}$$

für jedes $\psi \in \mathcal{H}$.

Beweis. Für den Beweis verwenden wir die Abkürzungen $F := F_\chi(H,T)$, $Q := Q_\chi(H,T)$ und $Q^{\#} := Q^{\#}_\chi(H,T)$ wie in [**?**] und folgen weitgehend [**?**]. Wir beweisen zunächst die folgenden Identitäten auf $\mathcal{D}$:

$$\overline{\chi}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\overline{\chi}\, H = \mathbb{1} - Q\,\chi\,, \qquad \overline{\chi}\, T^{-1}\overline{\chi}\, F = \mathbb{1} - \chi\, Q\,, \tag{V.11}$$

$$H\, Q = \chi\, F\,, \qquad Q^{\#}\, H = F\, \chi\,. \tag{V.12}$$

Der Beweis erfolgt jeweils durch Nachrechnen. Glg. (V.11) ergibt sich durch

$$\begin{aligned} \overline{\chi}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\overline{\chi}\, H &= \overline{\chi}(H_{\overline{\chi}})^{-1} T \overline{\chi} + \overline{\chi}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\overline{\chi} W = \overline{\chi}(H_{\overline{\chi}})^{-1}(T + W_{\overline{\chi}})\overline{\chi} + \overline{\chi}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\overline{\chi} W \chi^2 \\ &= \overline{\chi}^2 + \overline{\chi}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\overline{\chi} W \chi^2 = \mathbb{1} - Q\,\chi\,, \end{aligned} \tag{V.13}$$

und

$$\begin{aligned} \overline{\chi}\, T^{-1}\overline{\chi}\, F &= \overline{\chi}\, T^{-1}\overline{\chi}\big(T + W_\chi - \chi W \overline{\chi}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\overline{\chi} W \overline{\chi}\big) \\ &= \overline{\chi}^2 + \chi\overline{\chi} T^{-1}\overline{\chi} W \chi - \chi\,\overline{\chi}\, T^{-1} W_{\overline{\chi}}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\overline{\chi} W \overline{\chi} \\ &= \overline{\chi}^2 + \chi\overline{\chi}\big[T^{-1} - (H_{\overline{\chi}})^{-1} - T^{-1} W_{\overline{\chi}}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\big]\overline{\chi} W \chi + \chi\overline{\chi}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\overline{\chi} W \chi \\ &= \overline{\chi}^2 + \chi\overline{\chi}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\overline{\chi} W \chi = \mathbb{1} - \chi\, Q\,. \end{aligned} \tag{V.14}$$

Auch der Beweis von (V.12) ist eine Rechnung,

$$H\,Q \;=\; H\chi \;-\; H\overline{\chi}\,(H_{\overline{\chi}})^{-1}\overline{\chi}W\chi \;=\; \chi H_\chi \;+\; \overline{\chi}^2 W\chi \;-\; \big(\overline{\chi}H_{\overline{\chi}} + \chi^2 W\overline{\chi}\big)\,(H_{\overline{\chi}})^{-1}\overline{\chi}W\chi \;=\; \chi\,F\,. \tag{V.15}$$

Die zweite Identität in (V.12) ergibt sich ähnlich.

zu (i): Es reicht zu zeigen, dass die beschränkte Invertibilität von F auf $\mathrm{Ran}(\chi)$ Glg. (V.6) und die beschränkte Invertibilität von H auf $\mathfrak{H}$ Glg. (V.7) implizieren.
Seien also F auf $\mathrm{Ran}(\chi)$ invertibel und

$$R \;:=\; Q\,F^{-1}\,Q^{\#} \;+\; \overline{\chi}\,H_{\overline{\chi}}^{-1}\overline{\chi}\,. \tag{V.16}$$

Mit Hilfe von (V.11) und (V.12) erhalten wir

$$R\,H \;=\; Q\,F^{-1}\,Q^{\#}\,H \;+\; \overline{\chi}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\overline{\chi}\,H \;=\; Q\,F^{-1}\,F\,\chi \;+\; \mathbb{1} \;-\; Q\,\chi \;=\; \mathbb{1}\,, \tag{V.17}$$

und mit einer ähnlichen Rechnung auch $HR = \mathbb{1}$. Also ist H beschränkt invertibel mit $R = H^{-1}$, wie in (V.6) behauptet.
Seien umgekehrt H beschränkt invertibel und

$$\widetilde{R} \;:=\; \chi\,H^{-1}\,\chi \;+\; \overline{\chi}\,T^{-1}\overline{\chi}\,. \tag{V.18}$$

Abermals unter Verwendung von (V.11) und (V.12) folgt dann

$$\widetilde{R}\,F \;=\; \chi\,H^{-1}\,\chi\,F \;+\; \overline{\chi}\,T^{-1}\overline{\chi}\,F \;=\; \chi\,H^{-1}\,H\,Q \;+\; \mathbb{1} \;-\; \chi\,Q \;=\; \mathbb{1}\,. \tag{V.19}$$

Analog zeigt man, dass auch $\widetilde{R}F = \mathbb{1}$. Also ist F auf $\mathcal{H}$ (global) invertibel with Inverser $F^{-1} = \widetilde{R}$. Bezeichnen wir mit P die Projektion auf $\mathrm{Ran}(\chi)$, so beobachten wir, dass

$$F \;=\; P\,F\,P \;+\; P^{\perp}\,T\,P^{\perp} \tag{V.20}$$

blockdiagonal bezüglich $\mathcal{H} = \mathrm{Ran}(\chi) \oplus \mathrm{Ran}(\chi)^{\perp}$ ist. Daher impliziert die globale Invertibilität von F auf $\mathcal{H}$ auch die Invertibilität der Restriktion von F auf $\mathrm{Ran}(\chi)$, was den Beweis von *(i)* vervollständigt.

zu (ii): Ist $\psi \in \mathrm{Ker}(H)$, so folgt $F[\chi\psi] = Q^{\#}H\psi = 0$ nach (V.12), d.h. $\chi\psi \in \mathrm{Ker}(F)$. Analog erhalten wir für $\varphi \in \mathrm{Ker}(F)$ aus (V.12), dass $H[Q\varphi] = \chi F\varphi = 0$, d.h. $Q\varphi \in \mathrm{Ker}(H)$. Somit sind

$$\chi:\; \mathrm{Ker}(H) \;\to\; \mathrm{Ker}(F) \qquad \text{und} \qquad Q:\; \mathrm{Ker}(F) \;\to\; \mathrm{Ker}(H)\,. \tag{V.21}$$

Außerdem folgt aus (V.11) und $\psi \in \mathrm{Ker}(H)$ sowie $\varphi \in \mathrm{Ker}(F)$, dass

$$Q\,\chi\,\psi \;= \psi \;-\; \overline{\chi}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\overline{\chi}\,H\psi \;=\; \psi\,, \tag{V.22}$$

$$\chi\,Q\,\varphi \;= \varphi \;-\; \overline{\chi}\,T^{-1}\overline{\chi}\,F\varphi \;=\; \varphi\,, \tag{V.23}$$

was den Beweis von *(ii)* komplettiert,

$$Q \circ \chi \;=\; \mathbb{1}_{\mathrm{Ker}(H)} \qquad \text{und} \qquad \chi \circ Q \;=\; \mathbb{1}_{\mathrm{Ker}(F)}\,. \tag{V.24}$$

zu (iii): Nach Voraussetzung ist $H_{\overline{\chi}} - z$ auf $\mathrm{Ran}(\overline{\chi})$ für $z = 0$ beschränkt invertibel, d.h. $0 \in \rho(H_{\overline{\chi}}|_{\mathrm{Ran}(\overline{\chi})})$. Da die Resolventenmenge offen ist, enthält sie eine offene Kreisscheibe um 0 mit Radius $r > 0$ und so, dass die Norm der Resolvente auf dieser Kreissscheibe uniform beschränkt ist,

$$D(0,r) \;\subseteq\; \rho\big(H_{\overline{\chi}}|_{\mathrm{Ran}(\overline{\chi})}\big) \qquad \text{und} \qquad \sup_{|z|<r} \big\|\overline{\chi}(H_{\overline{\chi}} - z)^{-1}\overline{\chi}\big\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; C \;<\; \infty\,. \tag{V.25}$$

Es folgt, dass $(H - z, T - z)$ ein Feshbach-Schur-Paar zu χ für alle $z \in D(0,r)$. Wir kürzen $F_z := F_\chi(H - z, T - z)$ und $Q := Q_\chi(H,T)$ ab und zeigen für jedes $\psi \in \mathcal{H}$, dass

$$\lim_{\varepsilon \searrow 0} \mathrm{Im}\big\langle \psi \big|\, F_{i\varepsilon}^{-1}\, \psi \big\rangle \;=\; \lim_{\varepsilon \searrow 0} \mathrm{Im}\big\langle N\,\psi \big|\, \big(N\,F_0\,N \;-\; i\varepsilon\big)^{-1}\, N\,\psi \big\rangle\,. \tag{V.26}$$

Dazu berechnen wir die Differenz zwischen $F_{i\varepsilon}$ und $F_0 - i\varepsilon$,

$$\begin{aligned} F_{i\varepsilon} - F_0 + i\varepsilon \;&=\; -\,\chi\,W\,\overline{\chi}\,(H_{\overline{\chi}} - i\varepsilon)^{-1}\,\overline{\chi}\,W\,\chi \;+\; \chi\,W\,\overline{\chi}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\,\overline{\chi}\,W\,\chi \\ &=\; -\,i\varepsilon\,\chi\,W\,\overline{\chi}\,(H_{\overline{\chi}} - i\varepsilon)^{-1}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\,\overline{\chi}\,W\,\chi \\ &=\; -\,i\varepsilon\,\chi\,W\,\overline{\chi}\,H_{\overline{\chi}}^{-2}\,\overline{\chi}\,W\,\chi \;+\; \varepsilon^2\,\chi\,W\,\overline{\chi}(H_{\overline{\chi}})^{-1}(H_{\overline{\chi}} - i\varepsilon)^{-1}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\,\overline{\chi}\,W\,\chi \\ &=\; -\,i\varepsilon\,M^*\,M \;+\; \varepsilon^2\,M^*\,(H_{\overline{\chi}} - i\varepsilon)^{-1}\,M \qquad\qquad (\mathrm{V}.27) \\ &=\; -\,i\varepsilon\,M^*\,M \;+\; \varepsilon^2\,M^*(H_{\overline{\chi}})^{-1}\,M \;+\; i\varepsilon^3\,M^*\,(H_{\overline{\chi}} - i\varepsilon)^{-1}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\,M\,. \end{aligned}$$

Unter Beachtung, dass $N^{-2} = \mathbb{1} + M^*M$, sehen wir, dass (V.27) äquivalent ist zu

$$F_{i\varepsilon} - F_0 + i\varepsilon N^{-2} \;=\; \varepsilon^2\,M^*(H_{\overline{\chi}})^{-1}\,M \;+\; i\varepsilon^3\,M^*\,(H_{\overline{\chi}} - i\varepsilon)^{-1}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\,M\,, \tag{V.28}$$

und wenn wir dies von links mit $F_{i\varepsilon}^{-1}$ und von rechts mit $(F_0 - i\varepsilon N^{-2})^{-1}$ multiplizieren, erhalten wir daraus

$$\begin{aligned} F_{i\varepsilon}^{-1} - \big(F_0 - i\varepsilon N^{-2}\big)^{-1} \;&=\; -\,\varepsilon^2\,F_{i\varepsilon}^{-1}\,M^*(H_{\overline{\chi}})^{-1}\,M\,\big(F_0 - i\varepsilon N^{-2}\big)^{-1} \qquad (\mathrm{V}.29) \\ &\quad +\; i\varepsilon^3\,F_{i\varepsilon}^{-1}\,M^*\,(H_{\overline{\chi}} - i\varepsilon)^{-1}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\,M\,\big(F_0 - i\varepsilon N^{-2}\big)^{-1}\,. \end{aligned}$$

Nun sind $\|F_{i\varepsilon}^{-1}\|_{\mathrm{op}} \leq C\varepsilon^{-1}$ und auch $\|(F_0 - i\varepsilon N^{-2})^{-1}\|_{\mathrm{op}} = C\varepsilon^{-1}$, sodass

$$\big\|F_{i\varepsilon}^{-1} - (F_0 - i\varepsilon N^{-2})^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; C\,, \tag{V.30}$$

$$\big\|i\varepsilon^3\,F_{i\varepsilon}^{-1}\,M^*\,(H_{\overline{\chi}} - i\varepsilon)^{-1}(H_{\overline{\chi}})^{-1}\,M\,(F_0 - i\varepsilon N^{-2})^{-1}\big\|_{\mathrm{op}} \;=\; C\,\varepsilon\,. \tag{V.31}$$

Aus Glg. (V.31)) folgt, dass der zweite Term auf der rechten Seite in (V.29) im Limes $\varepsilon \to 0$ vernachlässigt werden kann, d.h. dass

$$\begin{aligned} &\lim_{\varepsilon \searrow 0} \mathrm{Im}\Big\langle \psi \Big|\, \big\{F_{i\varepsilon}^{-1} - (F_0 - i\varepsilon N^{-2})^{-1}\big\}\,\psi \Big\rangle \;= \qquad (\mathrm{V}.32) \\ &\qquad -\lim_{\varepsilon \searrow 0} \Big\{\varepsilon^2\,\mathrm{Im}\Big\langle \psi \Big|\, F_{i\varepsilon}^{-1}\,M^*(H_{\overline{\chi}})^{-1}\,M\,\big(F_0 - i\varepsilon N^{-2}\big)^{-1}\,\psi \Big\rangle \Big\}\,. \end{aligned}$$

Dank (V.30) und der Schranke $\|(F_0 - i\varepsilon N^{-2})^{-1}\| = \mathcal{O}(\varepsilon^{-1})$ können wir $F_{i\varepsilon}^{-1}$ auf der rechten Seite in (V.32) durch $(F_0 - i\varepsilon N^{-2})^{-1}$ ersetzen; genauer gilt

$$\begin{aligned}
&\lim_{\varepsilon\searrow 0} \mathrm{Im}\Big\langle \psi \Big| \left\{ F_{i\varepsilon}^{-1} \,-\, (F_0 - i\varepsilon N^{-2})^{-1} \right\} \psi \Big\rangle \\
&\quad = \,-\lim_{\varepsilon\searrow 0} \Big\{ \varepsilon^2\, \mathrm{Im}\Big\langle \psi \Big| \left(F_0 - i\varepsilon N^{-2}\right)^{-1} M^*(H_{\overline{\chi}})^{-1} M \left(F_0 - i\varepsilon N^{-2}\right)^{-1} \psi \Big\rangle \Big\} \\
&\quad = \lim_{\varepsilon\searrow 0} \mathrm{Im}\Big\langle M\, N \frac{\varepsilon}{NF_0N + i\varepsilon} N\,\psi \Big| H_{\overline{\chi}}^{-1}\, M\, N \frac{\varepsilon}{NF_0N - i\varepsilon} N\,\psi \Big\rangle . \qquad \text{(V.33)}
\end{aligned}$$

Schließlich nutzen wir die Tatsache aus, dass $\varepsilon(NF_0N \pm i\varepsilon)^{-1}$ stark gegen $\mp i\, P_{\mathrm{Ker}(NF_0N)}$ konvergiert, wobei $P_{\mathrm{Ker}(NF_0N)}$ die Projektion auf den Kern von (NF_0N) notiert. Daher ist der Limes $\varepsilon \searrow 0$ des Matrixelements auf der rechten Seite von (V.33) reell, und wir erhalten (V.26), also

$$\lim_{\varepsilon\searrow 0} \mathrm{Im}\langle \psi |\, F_{i\varepsilon}^{-1}\, \psi \rangle \;=\; \lim_{\varepsilon\searrow 0} \mathrm{Im}\langle N\,\psi |\, \left(N\,F_0\,N \,-\, i\varepsilon\right)^{-1} N\,\psi \rangle . \qquad \text{(V.34)}$$

Zum Beweis von (V.10) kombinieren wir (V.26) [bzw. (V.34)] mit (V.7) und erhalten

$$\begin{aligned}
&\lim_{\varepsilon\searrow 0} \mathrm{Im}\Big\langle \psi \Big| \left(N\,F_0\,N \,-\, i\varepsilon\right)^{-1} \psi \Big\rangle \;=\; \lim_{\varepsilon\searrow 0} \mathrm{Im}\langle N^{-1}\,\psi |\, F_{i\varepsilon}^{-1}\, N^{-1}\,\psi \rangle \\
&\quad = \lim_{\varepsilon\searrow 0} \mathrm{Im}\langle \chi\, N^{-1}\,\psi |\, (H - i\varepsilon)^{-1}\, \chi\, N^{-1}\,\psi \rangle \,+\, \mathrm{Im}\langle \overline{\chi}\, N^{-1}\,\psi |\, T^{-1}\, \overline{\chi}\, N^{-1}\,\psi \rangle \\
&\quad = \lim_{\varepsilon\searrow 0} \mathrm{Im}\langle \chi\, N^{-1}\,\psi |\, (H - i\varepsilon)^{-1}\, \chi\, N^{-1}\,\psi \rangle . \qquad \text{(V.35)}
\end{aligned}$$

Der Beweis von (V.9) ist ähnlich. Wir verwenden abermals (V.26) [bzw. (V.34)] und (V.7) und erhalten

$$\begin{aligned}
&\lim_{\varepsilon\searrow 0} \mathrm{Im}\langle\, \psi |\, (H - i\varepsilon)^{-1}\, \psi \rangle \;=\; \lim_{\varepsilon\searrow 0} \mathrm{Im}\langle Q^*\,\psi |\, F_{i\varepsilon}^{-1}\, Q^*\,\psi \rangle \,+\, \mathrm{Im}\langle \overline{\chi}\,\psi |\, H_{\overline{\chi}}^{-1}\, \overline{\chi}\,\psi \rangle \qquad \text{(V.36)} \\
&\quad = \lim_{\varepsilon\searrow 0} \mathrm{Im}\langle Q^*\,\psi |\, F_{i\varepsilon}^{-1}\, Q^*\,\psi \rangle \;=\; \lim_{\varepsilon\searrow 0} \mathrm{Im}\langle N\,Q^*\,\psi |\, \left(N\,F_0\,N \,-\, i\varepsilon\right)^{-1} N\,Q^*\,\psi \rangle .
\end{aligned}$$

□

Die spezielle Wahl von χ als Projektion $P = P^2$ ergibt in Satz V.2 gerade die wohlbekannte *Feshbach-Projektionsmethode* der theoretischen Physik, die in verschiedenen Teilgebieten der Mathematik unter einem jeweils anderen Namen bekannt ist –etwa als *Schur-Komplement*, *Grushin-Problem* oder *Lyapunov-Schmidt-Reduktion*– und die auch immer wieder „neu endeckt“ wird. Wir formulieren diesen Spezialfall im folgenden Korollar.

Korollar V.3. *Seien $\mathfrak{H}$ ein Hilbert-Raum und $(H, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ ein auf $\mathcal{D} \subseteq \mathfrak{H}$ dicht definierter, abgeschlossener linearer Operator auf $\mathfrak{H}$. Sei weiterhin $P = P^2 \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ eine beschränkte Projektionen auf $\mathfrak{H}$, die $\mathcal{D}$ erhält, $P(\mathcal{D}) \subseteq \mathcal{D}$, und so, dass $\overline{P}H\overline{P}$ auf* $\mathrm{Ran}(\overline{P})$ *beschränkt invertibel ist, wobei $\overline{P} := \mathbb{1} - P$. Dann existieren die* ***Feshbach-Schur-Abbildung*** $\big(F_P(H), P(\mathcal{D})\big) \in \mathfrak{L}[\mathrm{Ran}(P)]$,

$$F_P(H) \;:=\; P\,H\,P \,-\, P\,H\,\overline{P}\big(\overline{P}\,H\,\overline{P}\big)^{-1}\overline{P}\,H\,P\,, \qquad \text{(V.37)}$$

sowie $\big(Q_P(H), \mathcal{D}\big), \big(Q_P(H)^\#, \mathfrak{H}\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H})]$ *mit*

$$Q_P(H) \;:=\; P \,-\, \overline{P}\,(\overline{P}H\overline{P})^{-1}\overline{P}\,H\,P \quad \text{und} \quad Q_P(H)^\# \;:=\; P \,-\, P\,H\,\overline{P}\,(\overline{P}H\overline{P})^{-1}\overline{P}\,, \tag{V.38}$$

und besitzen die folgende Eigenschaften:

(i) H *ist auf* $\mathfrak{H}$ *genau dann beschränkt invertibel, wenn* $F_P(H)$ *beschränkt invertibel auf* $\mathrm{Ran}(P)$ *ist. In diesem Fall gelten*

$$H^{-1} \;= Q_P(H)\,F_P(H)^{-1}\,Q_P(H)^\# \;+\; \overline{P}\,(\overline{P}H\overline{P})^{-1}\overline{P}\,, \tag{V.39}$$

$$F_P(H)^{-1} \;= P\,H^{-1}\,P\,. \tag{V.40}$$

(ii) $\mathrm{Ker}[H]$ *und* $\mathrm{Ker}[F_P(H)]$ *sind isomorph und* $P : \mathrm{Ker}[H] \to \mathrm{Ker}[F_P(H)]$ *und* $Q_P(H) : \mathrm{Ker}[F_P(H)] \to \mathrm{Ker}[H]$ *sind zueinander inverse, beschränkte Isomorphismen.*

Bemerkungen und Beispiele.

- Seien $\mathfrak{H} = \mathbb{C}^N$ mit unitärem Skalarprodukt und $A = A^* \in \mathfrak{M}_{N\times N}(\mathbb{C})$ eine selbstadjungierte Matrix mit Eigenwerten $\lambda_1, \ldots, \lambda_N \in \mathbb{R}$, $\lambda_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_N$, und zugehörigen orthonormalen Eigenvektoren $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N \in \mathbb{C}^N$, d.h. $\langle \vec{x}_i | \vec{x}_j \rangle = \delta_{i,j}$. Dann sind

$$P_j \;=\; |\vec{x}_j\rangle\langle\vec{x}_j| \tag{V.41}$$

  die zugehörigen orthogonalen Projektionen, $P_j = P_j^* = P_j^2$.

- Wegen $\mathrm{Ker}[A - \lambda_j \cdot \mathbb{1}] = \mathbb{C}\cdot\vec{x}_j$ ist $A - \lambda_j \cdot \mathbb{1}$ nicht invertibel, aber $P_j^\perp(A-\lambda_j)P_j^\perp$ ist auf $P_j^\perp\mathfrak{H} = (\mathbb{C}\cdot\vec{x}_j)^\perp$ invertibel, und wegen der Selbstadjungiertheit von A ist

$$\big(P_j^\perp(A-\lambda_j)P_j^\perp\big)^{-1}P_j^\perp \;=\; \sum_{i=1,\, i\neq j}^{N} \frac{P_i}{\lambda_i - \lambda_j}, \tag{V.42}$$

$$\big\|\big(P_j^\perp(A-\lambda_j)P_j^\perp\big)^{-1}P_j^\perp\big\|_{\mathrm{op}} \;=\; \max\left\{ \frac{1}{|\lambda_i - \lambda_j|} \;\middle|\; i \in \mathbb{Z}_1^N,\; i \neq j \right\}. \tag{V.43}$$

- Ein konkretes Beispiel:

$$A \;=\; \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 9 \end{pmatrix}, \qquad \lambda_1 = 1\,,\; \lambda_2 = 5\,,\; \lambda_3 = 9\,, \tag{V.44}$$

$$P_1 \;=\; \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad P_1^\perp \;=\; \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{V.45}$$

$$P_1^\perp(A-1)P_1^\perp \;=\; \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{pmatrix}, \quad \big(P_1^\perp(A-1)P_1^\perp\big)^{-1}P_1^\perp \;=\; \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{8} \end{pmatrix}. \tag{V.46}$$

V.2. Störungstheorie isolierter Eigenwerte mit Hilfe der Feshbach-Schur-Abbildung

Wir diskutieren zunächst ein Beispiel. Seien $N = 3$ und

$$A \;=\; A^* \;=\; \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 9 \end{pmatrix} \;\in\; \mathfrak{M}_{3\times 3}(\mathbb{C})\,, \tag{V.47}$$

wie in (V.44), mit Eigenwerten $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 5$ und $\lambda_3 = 9$ sowie zugehörigen orthogonalen Eigenprojektionen

$$P_1 \;=\; \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad P_2 \;=\; \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad P_3 \;=\; \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad P_1^\perp \;=\; P_2 + P_3\,. \tag{V.48}$$

Weiterhin seien $W = W^* \in \mathfrak{M}_{3\times 3}(\mathbb{C})$ eine selbstadjungierte 3×3-Störmatrix und $g > 0$ eine kleine Zahl. Dann ist auch

$$A_g \;=\; A_g^* \;=\; A + gW \;\in\; \mathfrak{M}_{3\times 3}(\mathbb{C}) \tag{V.49}$$

selbstadjungiert, und wir wissen bereits aus Kapitel IV, dass die zugehörigen Eigenwerte $\lambda_1(g)$, $\lambda_2(g)$, $\lambda_3(g)$ analytisch in g sind und $\lim_{g\to 0} \lambda_j(g) = \lambda_j$ genügen.
Zur genauen Untersuchung von (z.B.) $\lambda_1(g)$ definieren wir

$$P \;:=\; P_1 \tag{V.50}$$

und beobachten, dass $P^\perp(A - 1 - z)P^\perp$ für genügend kleine $|z|$ auf $P^\perp\mathbb{C}^3$ invertibel ist, und zwar

$$R_0^\perp(z) \;:=\; \big(P^\perp(A-1-z)P^\perp\big)^{-1} P^\perp \;=\; \frac{P_2}{4-z} + \frac{P_3}{8-z} \;=\; \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4-z} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{8-z} \end{pmatrix}, \tag{V.51}$$

und also

$$\|R_0^\perp(z)\|_{\mathrm{op}} \;=\; \max\left\{ \frac{1}{|4-z|}\,,\; \frac{1}{|8-z|} \right\} \;\le\; \frac{1}{3}\,, \tag{V.52}$$

falls $|z| \le 1$. Aus der Isospektralität der Feshbach-Schur-Abbildung erhalten wir nun für alle $z \in D(0,1)$, dass

$$\big\{1 + z \text{ ist ein Eigenwert von } A_g\big\} \quad\Leftrightarrow\quad \exists\, \vec{y} \neq \vec{0}: \quad \mathcal{F}_P(A_g - 1 - z)\vec{y} \;=\; \vec{0}\,. \tag{V.53}$$

Da $P\mathfrak{H} = \mathbb{C} \cdot \vec{e}_1$ ist, ist (V.53) gleichwertig mit $\mathcal{F}_P(A_g - 1 - z)\vec{e}_1 = \vec{0}$ und sogar

$$\big\langle \vec{e}_1 \;\big|\; \mathcal{F}_P(A_g - 1 - z)\vec{e}_1 \big\rangle \;=\; \vec{0}\,. \tag{V.54}$$

Wir berechnen $\mathcal{F}_P(A_g - 1 - z)$. Wegen

$$(A - 1 - z)P \; = \; P(A - 1 - z) \; = \; -zP \tag{V.55}$$

und mit

$$R_g^\perp(z) \; := \; P^\perp \big(P^\perp(A - 1 - z + gW)P^\perp\big)^{-1} P^\perp \tag{V.56}$$

ist

$$\mathcal{F}_P(A_g - 1 - z) \; = \; gPWP \; - \; zP \; - \; g^2 PWP^\perp R_g^\perp(z) P^\perp WP\,. \tag{V.57}$$

Nun ist nach (V.52)

$$\big\| g\, R_0^\perp(z)\, W\, P^\perp \big\|_{\mathrm{op}} \; \leq \; \frac{|g|}{3}\, \|W\|_{\mathrm{op}}\,, \tag{V.58}$$

und für $|g| < 3/\|W\|_{\mathrm{op}}$ erhalten wir aus einer Neumann-Reihenentwicklung, dass

$$\mathcal{F}_P(A_g - 1 - z) \; = \; -zP + gPW \left[\sum_{n=0}^{\infty} (-g)^n \big(R_0^\perp(z) W\big)^n \right] P\,. \tag{V.59}$$

Setzen wir dies in (V.54) ein, so erhalten wir eine implizite Gleichung für z,

$$\begin{aligned} z \; &= g\langle \vec{e}_1 | W \vec{e}_1 \rangle - g^2 \langle \vec{e}_1 | W R_0^\perp(z) W \vec{e}_1 \rangle + g^3 \langle \vec{e}_1 | W R_0^\perp(z) W R_0^\perp(z) W \vec{e}_1 \rangle \\ &\quad - g^4 \langle \vec{e}_1 | W R_0^\perp(z) W R_0^\perp(z) W R_0^\perp(z) W \vec{e}_1 \rangle + \ldots \end{aligned} \tag{V.60}$$

Schließlich schreiben wir noch $W_{i,j} := \langle \vec{e}_i | W \vec{e}_j \rangle$ und erhalten weiter

$$\begin{aligned} z \; &= gW_{1,1} - g^2 \left(\frac{W_{1,2}W_{2,1}}{4 - z} + \frac{W_{1,3}W_{3,1}}{8 - z} \right) \\ &\quad + g^3 \left(\frac{W_{1,2}W_{2,2}W_{2,1}}{(4 - z)^2} + \frac{W_{1,2}W_{2,3}W_{3,1}}{(4 - z)(8 - z)} + \frac{W_{1,3}W_{3,2}W_{2,1}}{(8 - z)(4 - z)} + \frac{W_{1,3}W_{3,3}W_{3,1}}{(8 - z)^2} \right) \\ &\quad - g^4 \left(\frac{W_{1,2}W_{2,2}W_{2,2}W_{2,1}}{(4 - z)^3} + \ldots \text{weitere 6 Terme} \ldots + \frac{W_{1,3}W_{3,3}W_{3,3}W_{3,1}}{(8 - z)^3} \right) + \ldots \end{aligned} \tag{V.61}$$

Der gesuchte Eigenwert ist nun die Lösung $z_1(g)$ der obigen Gleichung (V.61) – vorausgesetzt, wir können ihre Existenz und Eindeutigkeit etablieren.

Satz V.4. *Seien $\big(\mathfrak{H}, \langle \cdot | \cdot \rangle\big)$ ein separabler komplexer Hilbertraum, $A = A^*, W = W^* \in \mathcal{B}(\mathfrak{H})$ zwei beschränkte selbstadjungierte Operatoren und $\lambda \in \mathbb{R}$ ein einfacher, isolierter Eigenwert von A mit zugehörigem normierten Eigenvektor $\vec{x} \in \mathfrak{H}$, d.h. $A\vec{x} = \lambda \vec{x}$,*

$$\delta \; := \; \mathrm{dist}\big[\lambda\,,\, \sigma(A) \setminus \{\lambda\}\big] \; > \; 0\,, \tag{V.62}$$

und mit $P := |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|$ gilt

$$\forall\, \vec{y} \in \mathfrak{H}: \quad \big\|(A - \lambda)P^\perp \vec{y}\big\| \; \geq \; \delta\, \|P^\perp \vec{y}\|\,. \tag{V.63}$$

Sei $g_0 := \frac{1}{8}\delta \|W\|_{\mathrm{op}}^{-1}$. Dann gelten folgende Aussagen:

(i) Für $g \in [-g_0\,,\,g_0]$ besitzt

$$A_g \;:=\; A + gW \tag{V.64}$$

in $I_\delta := \big(\lambda - \frac{\delta}{4}\,,\,\lambda + \frac{\delta}{4}\big)$ einen Eigenwert $\lambda(g) \in I_\delta$, der einfach ist und eindeutig durch die implizite Gleichung

$$\lambda(g) \;=\; g\langle\vec{x}|W\vec{x}\rangle - g^2\Big\langle\vec{x}\,\Big|W\big(P^\perp[A_g - \lambda(g)]P^\perp\big)^{-1}P^\perp W\vec{x}\Big\rangle \tag{V.65}$$

bestimmt ist, wobei $P := |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|$ die orthogonale Projektion auf den zu λ gehörigen Eigenraum ist.

(ii) Der zu $\lambda(g)$ gehörige Eigenvektor $\vec{x}(g) \in \mathfrak{H} \setminus \{\vec{0}\}$ ist gegeben durch

$$\vec{x}(g) \;=\; \vec{x} - g\,\big(P^\perp[A_g - \lambda(g)]P^\perp\big)^{-1}P^\perp W\vec{x}\,. \tag{V.66}$$

(iii) Der Eigenwert $\lambda(g)$ und der Eigenvektor $\vec{x}(g)$ besitzen jeweils eine auf $(-|g_0|\,,\,|g_0|)$ konvergente Potenzreihenentwicklung

$$\lambda(g) \;=\; \sum_{n=0}^{\infty}\alpha_n\,g^n\,, \tag{V.67}$$

$$\vec{x}(g) \;=\; \sum_{n=0}^{\infty}\vec{y}_n\,g^n\,, \tag{V.68}$$

wobei

$$\alpha_0 \;=\; \lambda, \quad \alpha_1 \;=\; \langle\vec{x}|W\vec{x}\rangle \quad \textit{und} \quad \alpha_2 \;=\; -\bigg\langle\vec{x}\,\bigg|\,W\bigg(\frac{P^\perp}{A-\lambda}\bigg)W\vec{x}\bigg\rangle\,, \tag{V.69}$$

sowie

$$\vec{y}_0 \;=\; \vec{x}, \quad \textit{und} \quad \vec{y}_1 \;=\; -\bigg(\frac{P^\perp}{A-\lambda}\bigg)W\vec{x}\,. \tag{V.70}$$

In (V.69) *und* (V.70) *und auch im Weiteren verwenden wir für kommutierende Operatoren $AB = BA$ die Notation $AB^{-1} = B^{-1}A =: \frac{A}{B}$.*

Beweis. Zur Anwendung des Korollars V.3 beobachten wir, dass gemäß (V.62) für alle $z \in D(0, \delta/2)$ auch $(\lambda + z) \notin \sigma(A) \setminus \{\lambda\}$ und wegen der Selbstadjungiertheit von A weiterhin

$$\bigg\|\frac{P^\perp}{A-\lambda-z}\bigg\|_{\mathrm{op}} \;\le\; \Big(\mathrm{dist}\big[\lambda+z\,,\,\sigma(A)\setminus\{\lambda\}\big]\Big)^{-1} \;\le\; \frac{1}{\delta-|z|} \;\le\; \frac{2}{\delta} \tag{V.71}$$

gilt. Für $g \in [-g_0\,,\,g_0]$ ist somit

$$\big\|g\,R_0^\perp(z)\,W\big\|_{\mathrm{op}} \;\le\; \frac{2\,|g|\,\|W\|_{\mathrm{op}}}{\delta} \;\le\; \frac{1}{4}\,, \tag{V.72}$$

wobei

$$R_0^\perp(z) \;=\; \frac{P^\perp}{A - \lambda - z}\,. \tag{V.73}$$

Somit ist die zugehörige Neumann-Reihe konvergent, und wir erhalten

$$\big(\mathbb{1} + gR_0^\perp(z)W\big)^{-1} \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} (-g)^n \big(R_0^\perp(z)W\big)^n\,. \tag{V.74}$$

Daher lässt sich auch die Inverse

$$R_g^\perp(z) \;:=\; \big(P^\perp[A_g - \lambda - z]P^\perp\big)^{-1}P^\perp \tag{V.75}$$

der Restriktion von $A_g - \lambda - z$ auf $P^\perp\mathfrak{H}$ konstruieren, nämlich

$$\begin{aligned} R_g^\perp(z) \;&=\; \big[(A-\lambda-z)P^\perp + gP^\perp W P^\perp\big]^{-1}P^\perp \;=\; \big[\mathbb{1} + gR_0^\perp(z)WP^\perp\big]^{-1}R_0^\perp(z) \\ &=\; \sum_{n=0}^{\infty}(-g)^n \big(R_0^\perp(z)W\big)^n R_0^\perp(z)\,. \end{aligned} \tag{V.76}$$

Insbesondere erhalten wir die Normabschätzungen

$$\begin{aligned} \|R_g^\perp(z)\|_{\mathrm{op}} \;&\le\; \sum_{n=0}^{\infty} |g|^n\, \|W\|_{\mathrm{op}}^n\, \|R_0^\perp(z)\|_{\mathrm{op}}^{n+1} \\ &=\; \frac{\|R_0^\perp(z)\|_{\mathrm{op}}}{1 \;-\; |g|\,\|W\|_{\mathrm{op}}\,\|R_0^\perp(z)\|_{\mathrm{op}}} \;\le\; \frac{\frac{2}{\delta}}{1 - \frac{1}{4}} \;=\; \frac{8}{3\,\delta} \end{aligned} \tag{V.77}$$

und

$$\begin{aligned} \|R_g^\perp(z) - R_0^\perp(z)\|_{\mathrm{op}} \;&\le\; \sum_{n=1}^{\infty} |g|^n\, \|W\|_{\mathrm{op}}^n\, \|R_0^\perp(z)\|_{\mathrm{op}}^{n+1} \\ &=\; \frac{|g|\,\|W\|_{\mathrm{op}}\,\|R_0^\perp(z)\|_{\mathrm{op}}^2}{1 \;-\; |g|\,\|W\|_{\mathrm{op}}\,\|R_0^\perp(z)\|_{\mathrm{op}}} \;\le\; \frac{16\,\|W\|_{\mathrm{op}}}{\delta^2}\,|g|\,, \end{aligned} \tag{V.78}$$

wobei wir (V.71) und (V.72) verwenden. Somit existiert das Bild $\mathcal{F}_P(A_g - \lambda - z)$ der Feshbach-Schur-Abbildung, angewandt auf $A_g - \lambda - z$, für alle $z \in D(0, \delta/2)$, und gemäß Korollar V.3 gilt

$$\big\{\lambda + z \in \sigma(A_g)\big\} \;\Leftrightarrow\; \big\{0 \in \sigma(A_g - \lambda - z)\big\} \;\Leftrightarrow\; \big\{0 \in \sigma[\mathcal{F}_P(A_g - \lambda - z)]\big\}\,, \tag{V.79}$$

und in diesem Fall ist

$$\dim \operatorname{Ker}[A_g - \lambda - z] \;=\; \dim \operatorname{Ker}[\mathcal{F}_P(A_g - \lambda - z)]\,. \tag{V.80}$$

Da $P = |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|$ eine Projektion vom Rang eins ist, ist (V.79) für alle $z \in D(0, \delta/2)$ gleichwertig mit

$$\begin{aligned}\big\{\lambda + z \text{ ist ein Eigenwert von } A_g\big\} \;&\Leftrightarrow \Big\{0 \;=\; \big\langle \vec{x} \,\big|\, \mathcal{F}_P(A_g - \lambda - z)\vec{x}\big\rangle\Big\} \\ &\Leftrightarrow \big\{z \;=\; h_g(z)\big\}\,,\end{aligned} \tag{V.81}$$

wobei $h_g : D(0, \delta/2) \to \mathbb{C}$ definiert ist durch

$$h_g(z) \;:=\; g\langle\vec{x}|W\vec{x}\rangle - g^2\big\langle \vec{x} \,\big|\, W R_g^{\perp}(z) W\vec{x}\big\rangle\,. \tag{V.82}$$

Beachte, dass

$$|h_g(z)| \;\le\; |g|\,\|W\|_{\mathrm{op}} + g^2\,\|W\|_{\mathrm{op}}^2\,\|R_g^{\perp}(z)\|_{\mathrm{op}} \;\le\; \frac{3}{2}\,|g|\,\|W\|_{\mathrm{op}} \;\le\; \frac{3\delta}{2\cdot 8} \;<\; \frac{\delta}{2}\,, \tag{V.83}$$

also ist

$$h_g(z) \;:\; \overline{D(0, \tfrac{3\delta}{16})} \;\to\; \overline{D(0, \tfrac{3\delta}{16})}, \tag{V.84}$$

wobei $\overline{D(z_0, r)} := \{\zeta \in \mathbb{C} :\; |\zeta - z_0| \le r\}$ die abgeschlossene Kreisscheibe vom Radius $r > 0$ um $z_0 \in \mathbb{C}$ notiert.

Aus der ersten Resolventengleichung erhalten wir nun für alle $w, z \in \overline{D(0, \frac{3\delta}{16})}$, dass

$$\begin{aligned}\big|h_g(w) - h_g(z)\big| \;&= g^2\,\big|\big\langle \vec{x} \,\big|\, W[R_g^{\perp}(w) - R_g^{\perp}(z)]W\vec{x}\big\rangle\big| \\ &= g^2\,|w - z|\,\big|\big\langle \vec{x} \,\big|\, W\,R_g^{\perp}(w)\,R_g^{\perp}(z)\,W\vec{x}\big\rangle\big| \\ &\le g^2\,|w - z|\,\|W\|_{\mathrm{op}}^2\,\|R_g^{\perp}(w)\|_{\mathrm{op}}\,\|R_g^{\perp}(z)\|_{\mathrm{op}} \\ &\le \left(\frac{8\,|g|\,\|W\|_{\mathrm{op}}}{3\,\delta}\right)^2 |w - z| \;\le\; \frac{1}{9}\,|w - z|\,,\end{aligned} \tag{V.85}$$

wobei wir (V.77) verwenden. Aus dem Banachschen Fixpunktsatz folgt nun die Existenz und Eindeutigkeit eines Fixpunkts $z_g \in \overline{D(0, \frac{3\delta}{16})}$ von h_g, also einer Lösung von $z = h_g(z)$.

Mit Blick auf (V.81) folgern wir, dass A_g in $\overline{D(\lambda, \frac{3\delta}{16})}$ genau einen Eigenwert $\lambda + z_g$ besitzt, der wegen

$$\dim \mathrm{Ker}[A_g - \lambda - z_g] \;=\; \dim \mathrm{Ker}[\mathcal{F}_P(A_g - \lambda - z_g)] \;=\; 1 \tag{V.86}$$

einfach (d.h. nichtentartet) ist. Die Potenzreihenentwicklung von z_g gewinnen wir konkret durch Iteration von h_g. Dazu setzen wir $z_g^{(0)} := 0$ und $z_g^{(n)} := h_g[z_g^{(n-1)}]$, für alle $n \in \mathbb{N}$.

Korollar V.3 impliziert außerdem, dass $\mathrm{Ker}[A_g - \lambda - z_g] = \mathbb{C} \cdot \vec{x}_g$ mit

$$\vec{x}_g \;=\; \vec{x} \;-\; g\,R_g^{\perp}(z_g)\,W\vec{x}. \tag{V.87}$$

Um dies näher zu untersuchen, schätzen wir zunächst $|z_g|$ ab; es ist

$$|z_g| \;\le\; |z_1| + |z_g - z_1| \;=\; |h_g(0)| + |h_g(z_g) - h_g(0)| \;\le\; |h_g(0)| + \tfrac{1}{9}|z_g|, \tag{V.88}$$

also ist mit (V.83)

$$|z_g| \;\le\; \frac{9}{8}|h_g(0)| \;\le\; \frac{81}{32}\,|g|\,\|W\|_{\mathrm{op}}. \tag{V.89}$$

Aus Abschätzung (V.78), der ersten Resolventengleichung, (V.88) und (V.77) erhalten wir dann

$$\begin{aligned} \|R_g^\perp(z_g) - R_0^\perp(0)\|_{\mathrm{op}} &\le \|R_g^\perp(z_g) - R_0^\perp(z_g)\|_{\mathrm{op}} + \|R_0^\perp(z_g) - R_0^\perp(0)\|_{\mathrm{op}} \\ &\le \frac{16\,\|W\|_{\mathrm{op}}}{\delta^2}\,|g| + |z_g|\,\|R_0^\perp(z_g)\|_{\mathrm{op}}\,\|R_0^\perp(0)\|_{\mathrm{op}} \\ &\le \frac{16\,\|W\|_{\mathrm{op}}}{\delta^2}\,|g| + \frac{81\cdot 8^2\cdot \|W\|_{\mathrm{op}}}{32\cdot 3^2\cdot\delta^2}\,|g| \;\le\; \frac{34\,\|W\|_{\mathrm{op}}}{\delta^2}\,|g|. \end{aligned} \tag{V.90}$$

Setzen wir diese Abschätzung in (V.87) ein, so folgt

$$\big\|\vec{x}_g - [\vec{x} - gR_0^\perp(0)W\vec{x}]\big\| \;\le\; |g|\,\|R_g^\perp(z_g) - R_0^\perp(0)\|_{\mathrm{op}}\,\|W\|_{\mathrm{op}} \;\le\; \frac{34\,\|W\|_{\mathrm{op}}^2}{\delta^2}\,|g|^2 \;\le\; 4\,C_{W,\delta}^2\,|g|^2. \tag{V.91}$$

□

VI. Die Zweite Quantisierung

Der Übergang von der Schrödingerschen Quantenmechanik zur Quantenfeldtheorie geschieht durch Einführung der *Zweiten Quantisierung*. Zunächst bedeutet dies, den Fockraum sowie Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren einzuführen.

VI.1. Fock-Räume: allgemein, bosonisch und fermionisch

Definition VI.1. Sei $\mathfrak{h}$ ein (separabler komplexer) Hilbert-Raum.

(i) Der **Vakuumsektor** ist der eindimensionale Hilbert-Raum

$$\mathfrak{F}^{(0)}(\mathfrak{h}) \;:=\; \mathfrak{F}_b^{(0)}(\mathfrak{h}) \;:=\; \mathfrak{F}_f^{(0)}(\mathfrak{h}) \;:=\; \mathbb{C} \cdot \Omega \,, \tag{VI.1}$$

wobei Ω ein Einheitsvektor ist, $\langle \Omega | \Omega \rangle_{\mathfrak{F}^{(0)}(\mathfrak{h})} = 1$, und als **Vakuumvektor** bezeichnet wird.

(ii) Für $n \in \mathbb{N}$ ist der ***n*-Teilchen-Hilbert-Raum** $\big(\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h})\,,\, \langle \cdot | \cdot \rangle_{\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h})}\big)$ durch

$$\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h}) \;:=\; \bigotimes_{k=1}^{n} \mathfrak{h} \tag{VI.2}$$

und stetige und sesquilineare Fortsetzung von

$$\langle \varphi_1 \otimes \cdots \otimes \varphi_n \,|\, \psi_1 \otimes \cdots \otimes \psi_n \rangle_{\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h})} \;:=\; \langle \varphi_1 | \psi_1 \rangle_{\mathfrak{h}} \cdots \langle \varphi_n | \psi_n \rangle_{\mathfrak{h}} \tag{VI.3}$$

definiert.

(iii) Der **Fock-Raum über $\mathfrak{h}$** ist der Hilbert-Raum $\big(\mathfrak{F}(\mathfrak{h})\,,\, \langle \cdot | \cdot \rangle_{\mathfrak{F}(\mathfrak{h})}\big)$ mit

$$\mathfrak{F}(\mathfrak{h}) \;:=\; \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h})\,, \qquad \Big\langle (\Phi^{(n)})_{n=0}^{\infty} \,\Big|\, (\Psi^{(n)})_{n=0}^{\infty} \Big\rangle_{\mathfrak{F}(\mathfrak{h})} \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} \langle \Phi^{(n)} \,|\, \Psi^{(n)} \rangle_{\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h})} \,. \tag{VI.4}$$

(iv) Der **bosonische Fock-Raum über $\mathfrak{h}$** ist der durch

$$\mathfrak{F}_b(\mathfrak{h}) \;:=\; \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathfrak{F}_b^{(n)}(\mathfrak{h}) \;:=\; \mathcal{S}\big[\mathfrak{F}(\mathfrak{h})\big] \;\subseteq\; \mathfrak{F}(\mathfrak{h})\,, \quad \mathfrak{F}_b^{(n)}(\mathfrak{h}) \;:=\; \mathcal{S}^{(n)}\big[\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h})\big] \;=:\; \bigvee_{k=1}^{n} \mathfrak{h}\,, \tag{VI.5}$$

definierte Unterraum $\mathfrak{F}_b(\mathfrak{h}) \subseteq \mathfrak{F}(\mathfrak{h})$ des Fock-Raums über $\mathfrak{h}$. Dabei ist $\mathcal{S} := \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{S}^{(n)} = \mathcal{S}^2 = \mathcal{S}^* \in \mathcal{B}[\mathfrak{F}(\mathfrak{h})]$ die orthogonale Projektion auf die total symmetrischen Vektoren in $\mathfrak{F}(\mathfrak{h})$, und $\mathcal{S}^{(n)} = [\mathcal{S}^{(n)}]^2 = [\mathcal{S}^{(n)}]^* \in \mathcal{B}[\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h})]$ sind für $n \in \mathbb{N}_0$ die orthogonalen

Projektionen auf die symmetrischen Vektoren, die durch lineare und stetige Fortsetzung von

$$\forall\, \varphi_1, \ldots, \varphi_n \in \mathfrak{h} : \qquad \mathcal{S}^{(n)}[\varphi_1 \otimes \ldots \otimes \varphi_n] \;:=\; \frac{1}{n!} \sum_{\pi \in \mathcal{S}_n} \varphi_{\pi(1)} \otimes \cdots \otimes \varphi_{\pi(n)} \tag{VI.6}$$

auf $\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h})$ definiert sind.

(v) Der **fermionische Fock-Raum über $\mathfrak{h}$** ist der durch

$$\mathfrak{F}_f(\mathfrak{h}) \;:=\; \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathfrak{F}_f^{(n)}(\mathfrak{h}) \;:=\; \mathcal{A}\big[\mathfrak{F}(\mathfrak{h})\big] \;\subseteq\; \mathfrak{F}(\mathfrak{h}) \,, \quad \mathfrak{F}_f^{(n)}(\mathfrak{h}) \;:=\; \mathcal{A}^{(n)}\big[\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h})\big] \;=:\; \bigwedge_{k=1}^{n} \mathfrak{h} \,, \tag{VI.7}$$

definierte Unterraum $\mathfrak{F}_f(\mathfrak{h}) \subseteq \mathfrak{F}(\mathfrak{h})$ des Fock-Raums über $\mathfrak{h}$. Dabei ist $\mathcal{A} := \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{A}^{(n)} = \mathcal{A}^2 = \mathcal{A}^* \in \mathcal{B}[\mathfrak{F}(\mathfrak{h})]$ die orthogonale Projektion auf die total antisymmetrischen Vektoren in $\mathfrak{F}(\mathfrak{h})$, und $\mathcal{A}^{(n)} = [\mathcal{A}^{(n)}]^2 = [\mathcal{A}^{(n)}]^* \in \mathcal{B}[\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h})]$ sind für $n \in \mathbb{N}_0$ die orthogonalen Projektionen auf die antisymmetrischen Vektoren, die durch lineare und stetige Fortsetzung von

$$\forall\, \varphi_1, \ldots, \varphi_n \in \mathfrak{h} : \qquad \mathcal{A}^{(n)}[\varphi_1 \otimes \ldots \otimes \varphi_n] \;:=\; \frac{1}{n!} \sum_{\pi \in \mathcal{S}_n} (-1)^{\pi}\, \varphi_{\pi(1)} \otimes \cdots \otimes \varphi_{\pi(n)} \tag{VI.8}$$

auf $\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h})$ definiert sind.

Bemerkungen und Beispiele.

- Es sind

$$\mathfrak{F}^{(1)}(\mathfrak{h}) \;=\; \mathfrak{F}_f^{(1)}(\mathfrak{h}) \;=\; \mathfrak{F}_b^{(1)}(\mathfrak{h}) \;=\; \mathfrak{h} \,, \tag{VI.9}$$

und deshalb bezeichnet man $\mathfrak{h}$ als **1-Teilchen-Hilbert-Raum**.

- Ist $\{\varphi_k\}_{k=1}^{\infty} \subseteq \mathfrak{h}$ eine ONB in $\mathfrak{h}$, so ist

$$\big\{ \varphi_{k(1)} \otimes \ldots \otimes \varphi_{k(n)} \;\big|\; k(1), \ldots, k(n) \in \mathbb{N} \big\} \;\subseteq\; \mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h}) \tag{VI.10}$$

eine ONB in $\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h})$.

- Mit

$$\varphi_1 \wedge \ldots \wedge \varphi_n \;:=\; \sqrt{n!}\, \mathcal{A}_n(\varphi_1 \otimes \ldots \otimes \varphi_n) \;=\; \sum_{\pi \in \mathcal{S}_n} \frac{(-1)^{\pi}}{\sqrt{n!}}\, \varphi_{\pi(1)} \otimes \ldots \otimes \varphi_{\pi(n)} \tag{VI.11}$$

ist

$$\big\{ \varphi_{k(1)} \wedge \varphi_{k(2)} \wedge \ldots \wedge \varphi_{k(n)} \;\big|\; 1 \leq k(1) < k(2) < \ldots < k(n) \big\} \;\subseteq\; \mathfrak{F}_f^{(n)}(\mathfrak{h}) \tag{VI.12}$$

eine ONB in $\mathfrak{F}_f^{(n)}(\mathfrak{h})$.

- Ist $\underline{n} = (n_1, n_2, n_3, \ldots) \in \mathbb{N}_0^{\mathbb{N}}$ eine Folge nichtnegativer ganzer Zahlen mit $\sum_{k=1}^{\infty} n_k = n$, so sind nur höchstens $m \leq n$ dieser Zahlen $n_{k(1)}, n_{k(2)}, \ldots, n_{k(m)} \in \mathbb{N}$ ungleich null, wobei o.B.d.A. $1 \leq k(1) < k(2) < \ldots < k(m)$ gilt. Dann ist

$$\left\{ \mathcal{S}\left(\frac{\varphi_{k(1)}^{\otimes n_{k(1)}}}{\sqrt{n_{k(1)}!}} \otimes \cdots \otimes \frac{\varphi_{k(m)}^{\otimes n_{k(m)}}}{\sqrt{n_{k(m)}!}} \right) \;\middle|\; \underline{n} \in \mathbb{N}_0^{\mathbb{N}},\ n_{k(1)} + \ldots + n_{k(m)} \;=\; n \right\} \;\subseteq\; \mathfrak{F}_b^{(n)}(\mathfrak{h}) \tag{VI.13}$$

  eine ONB in $\mathfrak{F}_b^{(n)}(\mathfrak{h})$.

Definition VI.2. Seien $\mathfrak{h}$ ein Hilbert-Raum und

$$\mathcal{D}_{\mathcal{N}} \;:=\; \left\{ \Phi = (\phi^{(n)})_{n=0}^{\infty} \in \mathfrak{F}(\mathfrak{h}) \;\middle|\; \sum_{n=0}^{\infty} n^2 \, \|\phi^{(n)}\|^2 < \infty \right\}. \tag{VI.14}$$

Dann ist der **Teilchenzahloperator** $(\mathcal{N}, \mathcal{D}_{\mathcal{N}}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}(\mathfrak{h})]$ definiert durch

$$\forall\, \Phi = (\phi^{(n)})_{n=0}^{\infty} \in \mathcal{D}_{\mathcal{N}} : \quad \mathcal{N}\Phi \;:=\; (n\, \phi^{(n)})_{n=0}^{\infty} \,. \tag{VI.15}$$

Bemerkungen und Beispiele.

- Der Teilchenzahloperator $\mathcal{N}$ agiert also auf dem dichten Definitionsbereich $\mathcal{D}_{\mathcal{N}} \subseteq \mathfrak{F}(\mathfrak{h})$ als reeller Multiplikationsoperator. Da $\mathcal{D}_{\mathcal{N}}$ der natürliche Definitionsbereich für $\mathcal{N}$ ist, folgt daraus die Selbstadjungiertheit von $(\mathcal{N}, \mathcal{D}_{\mathcal{N}})$.
- Es sind $\sigma(\mathcal{N}) = \mathbb{N}_0$, $\sigma_{\mathrm{disc}}(\mathcal{N}) = \{0\}$ und $\sigma_{\mathrm{ess}}(\mathcal{N}) = \mathbb{N}$.
- Bezeichnen wir mit $P^{(n)} := \mathbb{1}_{\{n\}}(\mathcal{N})$ für $n \in \mathbb{N}_0$ die Projektionen auf die invarianten Unterräume zu den Eigenwerten des Teilchenzahloperators, so sind $\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h}) = P^{(n)}[\mathfrak{F}(\mathfrak{h})]$, $\mathfrak{F}_b^{(n)}(\mathfrak{h}) = P^{(n)}[\mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})]$ und $\mathfrak{F}_f^{(n)}(\mathfrak{h}) = P^{(n)}[\mathfrak{F}_f(\mathfrak{h})]$.

VI.2. Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Definition VI.3. Seien $\mathfrak{h}$ ein Hilbert-Raum und $\varphi \in \mathfrak{h}$.

(i) Wir definieren $A_0^{\dagger}(\varphi) \in \mathcal{B}[\mathfrak{F}^{(0)}(\mathfrak{h}); \mathfrak{F}^{(1)}(\mathfrak{h})]$ durch

$$A_0^{\dagger}(\varphi)[\Omega] \;:=\; \phi. \tag{VI.16}$$

(ii) Für $n \in \mathbb{N}$ definieren wir $A_n^{\dagger}(\varphi) \in \mathcal{B}[\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h}); \mathfrak{F}^{(n+1)}(\mathfrak{h})]$ durch

$$\forall\, \phi^{(n)} \in \mathfrak{F}^{(n)} : \quad A_n^{\dagger}(\varphi)[\phi^{(n)}] \;:=\; \sqrt{n+1}\, \varphi \otimes \phi^{(n)} \,. \tag{VI.17}$$

(iii) Wir definieren den **Erzeugungsoperator (zu φ)** $(A^{\dagger}(\varphi), \mathcal{D}_{\sqrt{\mathcal{N}}}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}(\mathfrak{h})]$ durch

$$A^{\dagger}(\varphi)\Big[\big(\phi^{(0)},\, \phi^{(1)},\, \phi^{(2)}, \ldots\big)\Big] \;:=\; \big(0,\, A_0^{\dagger}(\varphi)[\phi^{(0)}],\, A_1(\varphi)[\phi^{(1)}],\, A_2^{\dagger}(\varphi)[\phi^{(2)}],\, \ldots\big)\,, \tag{VI.18}$$

wobei $\mathcal{D}_{\sqrt{\mathcal{N}}} \;:=\; \big\{\Phi = (\phi^{(n)})_{n=0}^{\infty} \in \mathfrak{F}(\mathfrak{h}) \big|\ \sum_{n=0}^{\infty} n\, \|\phi^{(n)}\|^2 < \infty\big\}$. In diesem Zusammenhang bezeichnet man $\varphi \in \mathfrak{h}$ auch als **Orbital**.

(iv) Wir definieren $A_0(\varphi) \in \mathcal{B}[\mathfrak{F}^{(1)}(\mathfrak{h}); \mathfrak{F}^{(0)}(\mathfrak{h})]$ durch

$$\forall \psi \in \mathfrak{h} : \quad A_0(\varphi)[\psi] \;:=\; \langle \varphi | \psi \rangle \cdot \Omega \,. \tag{VI.19}$$

(v) Für $n \in \mathbb{N}$ definieren wir $A_n(\varphi) \in \mathcal{B}[\mathfrak{F}^{(n+1)}(\mathfrak{h}); \mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h})]$ durch

$$A_n(\varphi)\big[\psi_1 \otimes \ldots \otimes \psi_{n+1}\big] \;:=\; \sqrt{n+1}\, \langle \varphi | \psi_1 \rangle \, \psi_2 \otimes \ldots \otimes \psi_{n+1} \tag{VI.20}$$

und stetige und lineare Fortsetzung.

(vi) Wir definieren den **Vernichtungsoperator (zu φ)** $(A(\varphi), \mathcal{D}_{\sqrt{\mathcal{N}}}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}(\mathfrak{h})]$ durch

$$A(\varphi)\Big[\big(\phi^{(0)},\, \phi^{(1)},\, \phi^{(2)}, \ldots\big)\Big] \;:=\; \big(A_0(\varphi)[\phi^{(1)}],\; A_1(\varphi)[\phi^{(2)}],\; A_2(\varphi)[\phi^{(3)}],\; \ldots\big)\,. \tag{VI.21}$$

Bemerkungen und Beispiele.

- Für $\varphi \in \mathfrak{H}$ sind $A^\dagger(\varphi)$ und $A(\varphi)$ dicht definiert, abgeschlossen und relativ beschränkt zu $\sqrt{\mathcal{N}}$.
- Für $\varphi \in \mathfrak{H}$ sind $A^\dagger(\varphi)$ und $A(\varphi)$ zueinander adjungiert:

$$\big(A(\varphi)\big)^* \;=\; A^\dagger(\varphi)\,, \qquad \big(A^\dagger(\varphi)\big)^* \;=\; A(\varphi). \tag{VI.22}$$

- Die Abbildung $\mathfrak{h} \ni \varphi \mapsto A^\dagger(\varphi) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}(\mathfrak{h})]$ ist linear, die Abbildung $\mathfrak{h} \ni \varphi \mapsto A(\varphi) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}(\mathfrak{h})]$ hingegen antilinear (nicht zu verwechseln mit der Linearität von $A(\varphi)$ als Operator).
- Es ist bequem, zum Fock-Raum $\mathfrak{F}(\mathfrak{h})$ Unterräume endlicher Vektoren einzuführen. Ist $\mathfrak{d} \subseteq \mathfrak{h}$ ein dichter Teilraum, so definieren wir durch

$$\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}^{(n)}(\mathfrak{d}) \;:= \mathrm{span}\Big\{\varphi_1 \otimes \cdots \otimes \varphi_n \;\Big|\; \varphi_1, \ldots, \varphi_n \in \mathfrak{d}\Big\}\,, \tag{VI.23}$$

$$\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}(\mathfrak{d}) \;:=\; \bigcup_{N=1}^{\infty} \mathrm{span}\Big\{(\phi^{(0)},\, \phi^{(1)}, \ldots,\, \phi^{(N)},\, 0,\, 0 \ldots) \;\Big| \; \phi^{(0)} \in \mathfrak{F}^{(0)}(\mathfrak{h})\,,\, \phi^{(1)} \in \mathfrak{F}^{(1)}(\mathfrak{h})\,, \ldots, \phi^{(N)} \in \mathfrak{F}^{(N)}(\mathfrak{h})\Big\}\,, \tag{VI.24}$$

den *Unterraum* $\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}(\mathfrak{d})$ *endlicher Vektoren über* $\mathfrak{d}$.
- Offensichtlich ist $\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}(\mathfrak{d}) \subseteq \mathfrak{F}(\mathfrak{h})$ ein dichter Teilraum, der nicht abgeschlossen ist und für den $\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}(\mathfrak{d}) \subseteq \mathcal{D}_{\mathcal{N}} \subseteq \mathcal{D}_{\sqrt{\mathcal{N}}}$ gilt.

Definition VI.4. Seien $\mathfrak{h}$ ein Hilbert-Raum und $\varphi \in \mathfrak{h}$.

(i) Wir definieren den **bosonischen Erzeugungsoperator** $\big(a^*(\varphi), \mathcal{D}_{\sqrt{\mathcal{N}}}\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})]$ und den **bosonischen Vernichtungsoperator** $\big(a(\varphi), \mathcal{D}_{\sqrt{\mathcal{N}}}\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})]$ durch

$$a^\dagger(\varphi) \;:=\; \mathcal{S} \circ A^\dagger(\varphi) \circ \mathcal{S}\,, \qquad a(\varphi) \;:=\; \mathcal{S} \circ A(\varphi) \circ \mathcal{S}\,. \tag{VI.25}$$

(ii) Wir definieren den **fermionischen Erzeugungsoperator** $\big(c^*(\varphi), \mathcal{D}_{\sqrt{\mathcal{N}}}\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})]$ und den **fermionischen Vernichtungsoperator** $\big(c(\varphi), \mathcal{D}_{\sqrt{\mathcal{N}}}\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})]$ durch

$$c^\dagger(\varphi) \;:=\; \mathcal{A} \circ A^\dagger(\varphi) \circ \mathcal{A}\,, \qquad c(\varphi) \;:=\; \mathcal{A} \circ A(\varphi) \circ \mathcal{A}\,. \tag{VI.26}$$

Bemerkungen und Beispiele.

- Für $\varphi \in \mathfrak{H}$ sind $a^\dagger(\varphi)$, $a(\varphi)$, $c^\dagger(\varphi)$ und $c(\varphi)$ dicht definiert, abgeschlossen, relativ beschränkt zu $\sqrt{\mathcal{N}}$ und zueinander adjungiert,
$$\big(a(\varphi)\big)^* \;=\; a^\dagger(\varphi)\,, \qquad \big(c(\varphi)\big)^* \;=\; c^\dagger(\varphi)\,. \tag{VI.27}$$
wir benutzen deshalb von nun an nur noch a^* und c^* statt $a^\dagger$ und $c^\dagger$.
- Sind $d := \dim[\mathfrak{h}] \in \mathbb{N}$ oder $d = \infty$ und $\{\varphi_1, \ldots, \varphi_d\} \subseteq \mathfrak{h}$ eine ONB, so ist
$$\varphi_{k(1)} \wedge \ldots \wedge \varphi_{k(n)} \;=\; c^*(\varphi_{k(1)}) \cdots c^*(\varphi_{k(n)})\Omega\,, \tag{VI.28}$$
für jedes $n \in \mathbb{N}$ und $1 \leq k(1) < k(2) < \ldots < k(n) \leq d$, d.h.
$$\big\{c^*(\varphi_{k(1)}) \cdots c^*(\varphi_{k(n)})\Omega \;\big|\; n \in \mathbb{N}_0\,,\ 1 \leq k(1) < \ldots < k(n) \leq d\big\} \;\subseteq\; \mathfrak{F}_f(\mathfrak{h}) \tag{VI.29}$$
ist eine ONB in $\mathfrak{F}_f(\mathfrak{h})$.
- Ist der 1-Teilchen-Hilbert-Raum $\mathfrak{h}$ endlich-dimensional, $\dim[\mathfrak{h}] = d < \infty$, so ist auch der fermionische Fock-Raum über $\mathfrak{h}$ endlich-dimensional, nämlich $\dim[\mathfrak{F}_f(\mathfrak{h})] = 2^d$.
- Seien $d := \dim[\mathfrak{h}] \in \mathbb{N}$ oder $d = \infty$ und $\{\varphi_1, \ldots, \varphi_d\} \subseteq \mathfrak{h}$ eine ONB. Seien weiterhin $\underline{n} = (n_1, n_2, \ldots, n_d) \in \mathbb{N}_0^d$ mit $\sum_{k=1}^d n_k < \infty$. Dann sind
$$\mathcal{S}\big(\varphi_1^{\otimes n_1} \otimes \cdots \otimes \varphi_d^{\otimes n_d}\big) \;=\; a^*(\varphi_1)^{n_1} \cdots a^*(\varphi_d)^{n_d}\Omega \tag{VI.30}$$
und
$$\left\{ \frac{a^*(\varphi_1)^{n_1} \cdots a^*(\varphi_d)^{n_d}\Omega}{\sqrt{n_1!\, n_2! \, \cdots \, n_d!}} \;\middle|\; (n_1, \ldots, n_d) \in \mathbb{N}_0^d\,,\ n_1 + \ldots + n_d \;<\; \infty \right\} \;\subseteq\; \mathfrak{F}_b(\mathfrak{h}) \tag{VI.31}$$
eine ONB in $\mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})$.
- Der bosonische Fock-Raum über $\mathfrak{h}$ ist stets unendlich-dimensional. Sind beispielsweise $d = 1$ und $\mathfrak{h} = \mathbb{C}\cdot\varphi$ mit $\|\varphi\| = 1$, so ist $\{(n!)^{-1/2}\, a^*(\varphi)^n\Omega\}_{n=0}^\infty \subseteq \mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})$ eine ONB in $\mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})$.

VI.3. Kanonische Vertauschungsrelationen: CCR und CAR

Wir kommen nun zu den wichtigen kanonischen Vertauschungsrelationen (CCR) und den kanonischen Anti-Vertauschungsrelationen (CAR), mit deren Hilfe sich viele Rechnungen und Abschätzungen auf dem bosonischen Fockraum $\mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})$ bzw. dem fermionischen Fockraum $\mathfrak{F}_f(\mathfrak{h})$ substanziell vereinfachen lassen.

Satz VI.5 (CCR)**.** *Die bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren erfüllen die **kanonischen Vertauschungsrelationen (CCR)**, d.h. für alle $\varphi, \psi \in \mathfrak{h}$ gelten*
$$[a^*(\varphi)\,,\, a^*(\psi)] \;=\; [a(\varphi)\,,\, a(\psi)] \;=\; 0\,, \qquad [a(\varphi), a^*(\psi)] \;=\; \langle\varphi|\psi\rangle \cdot \mathbb{1}\,, \tag{VI.32}$$
*auf $\mathcal{D}_{\mathcal{N}} \cap \mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})$, wobei $[a,b] := ab - ba$. Außerdem sind die bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren eine **Fock-Darstellung** der CCR, da sie*
$$a(\varphi)\Omega \;=\; 0\,, \tag{VI.33}$$
für alle $\varphi \in \mathfrak{h}$ erfüllen.

Satz VI.6 (CAR)**.** *Die fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren erfüllen die* ***kanonischen Anti-Vertauschungsrelationen (CAR)****, d.h. für alle $\varphi, \psi \in \mathfrak{h}$ gelten*

$$\{c^*(\varphi)\,,\, c^*(\psi)\} \;=\; \{c(\varphi)\,,\, c(\psi)\} \;=\; 0\,, \qquad \{c(\varphi), c^*(\psi)\} \;=\; \langle\varphi|\psi\rangle \cdot \mathbb{1}\,, \tag{VI.34}$$

auf $\mathcal{D}_\mathcal{N} \cap \mathfrak{F}_f(\mathfrak{h})$, wobei $\{a, b\} := ab + ba$. Außerdem sind die fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren eine ***Fock-Darstellung*** *der CAR, da sie*

$$c(\varphi)\Omega \;=\; 0\,, \tag{VI.35}$$

für alle $\varphi \in \mathfrak{h}$ erfüllen.

Bemerkungen und Beispiele.

- Ist $U \in \mathcal{B}[\mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})]$ ein unitärer Operator, $U^{-1} = U^*$, so erfüllen mit $b^*(\varphi) := Ua^*(\varphi)U^*$ auch $\mathfrak{h} \ni \varphi \mapsto b^*(\varphi), b(\varphi)$ die kanonischen Vertauschungsrelationen. Allerdings ist dies im Allgemeinen keine Fock-Darstellung, da $b(\varphi)[U\Omega] = 0$ für alle $\varphi \in \mathfrak{h}$ und nicht $b(\varphi)\Omega = 0$ gilt.
- Ist $f \in \mathfrak{h}$, so erfüllen mit $d^*(\varphi) := a^*(\varphi) + \langle f|\varphi\rangle$ auch $\mathfrak{h} \ni \varphi \mapsto d^*(\varphi), d(\varphi)$ die kanonischen Vertauschungsrelationen. Auch dies ist für $f \neq 0$ keine Fock-Darstellung, da $d(\varphi)\Omega = \langle\varphi|f\rangle\Omega \neq 0$ für alle $\varphi \in \mathfrak{h} \setminus (\mathbb{C} \cdot f)^\perp$.
- Die bosonischen Erzeugungsoperatoren $a^*(\varphi)$ und Vernichtungsoperatoren $a(\varphi)$ sind auf $\mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})$ unbeschränkt, aber die fermionischen Erzeugungsoperatoren $c^*(\varphi)$ und Vernichtungsoperatoren $c(\varphi)$ sind auf $\mathfrak{F}_f(\mathfrak{h})$ beschränkt, und zwar ist

$$\|c^*(\varphi)\|_{\mathrm{op}} \;=\; \|c(\varphi)\|_{\mathrm{op}} \;=\; \|\varphi\|_\mathfrak{h}\,, \tag{VI.36}$$

  wie man leicht aus den CAR gewinnt.
- Eine besondere Rolle in der Quantenfeldtheorie spielen die *Bogolubov-Tranformationen. Bosonische Bogolubov-Tranformationen* sind unitäre Transformationen $U \in \mathcal{B}[\mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})]$, die affin linear in Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren sind, d.h. für die es beschränkte Operatoren $u \in \mathcal{B}(\mathfrak{h})$ und $v \in \mathcal{L}^2(\mathfrak{h})$ und ein $f \in \mathfrak{h}$ so gibt, dass

$$Ua^*(\varphi)U^* \;=\; a^*(u\varphi) + a(j[v\varphi]) + \langle f|\varphi\rangle\,, \tag{VI.37}$$

  für alle $\varphi \in \mathfrak{h}$ gilt, wobei $j : \mathfrak{h} \to \mathfrak{h}$ eine antilineare Involution ist, $j^2 = \mathbb{1}_\mathfrak{h}$.
- *Fermionische Bogolubov-Tranformationen* sind unitäre Transformationen $U \in \mathcal{B}[\mathfrak{F}_f(\mathfrak{h})]$, die affin in Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren sind, d.h. für die es beschränkte Operatoren $u \in \mathcal{B}(\mathfrak{h})$ und $v \in \mathcal{L}^2(\mathfrak{h})$ so gibt, dass

$$Uc^*(\varphi)U^* \;=\; c^*(u\varphi) + c(j[v\varphi])\,, \tag{VI.38}$$

  für alle $\varphi \in \mathfrak{h}$ gilt, wobei $j : \mathfrak{h} \to \mathfrak{h}$ abermals eine antilineare Involution ist, $j^2 = \mathbb{1}_\mathfrak{h}$.

VI.4. Die Zweite Quantisierung von 1-Teilchen-Operatoren

Definition VI.7. Seien $\mathfrak{h}$ ein Hilbert-Raum und $(\omega, \mathfrak{d}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{h}]$ ein dicht definierter, abgeschlossener linearer Operator auf $\mathfrak{h}$.

(i) Wir definieren $d\Gamma^{(0)}(\omega)\Omega = 0$ und $\big(d\Gamma^{(k)}(\omega)\,,\,\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}^{(k)}[\mathfrak{d}]\big), \big(\Gamma^{(k)}(\omega)\,,\,\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}^{(k)}[\mathfrak{d}]\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}^{(k)}(\mathfrak{h})]$ für $k \in \mathbb{N}$ durch lineare Fortsetzung von

$$d\Gamma^{(k)}(\omega)\big[\varphi_1 \otimes \cdots \otimes \varphi_k\big] \;:=\; \sum_{j=1}^{k} \varphi_1 \otimes \cdots \otimes \varphi_{j-1} \otimes [\omega\varphi_j] \otimes \varphi_{j+1} \otimes \cdots \otimes \varphi_k\,, \tag{VI.39}$$

$$\Gamma^{(k)}(\omega)\big[\varphi_1 \otimes \cdots \otimes \varphi_k\big] \;:=\; [\omega\varphi_1] \otimes \cdots \otimes [M\varphi_k]\,. \tag{VI.40}$$

(ii) Wir definieren die **Zweite Quantisierung** $\boldsymbol{\big(d\Gamma(\omega)\,,\,\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}[\mathfrak{d}]\big), \big(\Gamma(\omega)\,,\,\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}[\mathfrak{d}]\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}(\mathfrak{h})]}$ **von** $\boldsymbol{(\omega, \mathfrak{d})}$ durch

$$d\Gamma(\omega) \;:=\; \bigoplus_{n=0}^{\infty} d\Gamma^{(n)}(\omega)\,, \tag{VI.41}$$

$$\Gamma(\omega) \;:=\; \bigoplus_{n=0}^{\infty} \Gamma^{(n)}(\omega)\,. \tag{VI.42}$$

Bemerkungen und Beispiele.

- Die Zweite Quantisierungen $d\Gamma$ und Γ erhalten die Teilchenzahl und lassen den bosonischen und den fermionischen Fock-Raum -als Unterraum des Fock-Raums- jeweils invariant, d.h. für jeden Operator $(\omega, \mathfrak{d})$ gilt auf $\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}(\mathfrak{d})$

$$d\Gamma(\omega)\,\mathcal{N} \;=\; \mathcal{N}\,d\Gamma(\omega)\,, \qquad \Gamma(\omega)\,\mathcal{N} \;=\; \mathcal{N}\,\Gamma(\omega)\,, \tag{VI.43}$$

$$d\Gamma(\omega)\,\mathcal{S} \;=\; \mathcal{S}\,d\Gamma(\omega)\,, \qquad \Gamma(\omega)\,\mathcal{S} \;=\; \mathcal{S}\,\Gamma(\omega)\,, \tag{VI.44}$$

$$d\Gamma(\omega)\,\mathcal{A} \;=\; \mathcal{A}\,d\Gamma(\omega)\,, \qquad \Gamma(\omega)\,\mathcal{A} \;=\; \mathcal{A}\,\Gamma(\omega)\,. \tag{VI.45}$$

- Sind $a, b \in \mathcal{B}[\mathfrak{h}]$ beschränkte Operatoren, so gelten

$$\big[d\Gamma(a)\,,\,d\Gamma(b)\big] \;= d\Gamma\big([a,b]\big)\,, \tag{VI.46}$$

$$\Gamma(a)\,\Gamma(b) \;= \Gamma(a\,b)\,, \tag{VI.47}$$

  auf $\mathcal{D}_{\mathcal{N}}$, d.h. die Zweite Quantisierung $d\Gamma$ erhält Kommutatoren und die Zweite Quantisierung Γ erhält Produkte.

- Inwieweit sich (VI.48) oder (VI.49) auf unbeschränkte Operatoren a und b übertragen lassen, ist stark kontextabhängig und schwer allgemein zu formulieren.
- Wir haben in Kapitel III bereits Schrödinger-Operatoren $h = -\Delta + V(x)$ auf $\mathcal{D}_h \subseteq \mathfrak{h} := L^2(\mathbb{R}^d)$ auf Selbstadjungiertheit untersucht und festgestellt, dass diese unter geeigneten Annahmen an $V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ ein Standardspektrum der Form $\sigma(h) = \sigma_{\mathrm{disc}}(h)\dot\cup\sigma_{\mathrm{ess}}(h)$ mit isolierten, nach unten beschränkten, negativen Eigenwerten $\{e_0, e_1, e_2, \ldots\} \subseteq \mathbb{R}^-$ jeweils endlicher Multiplizität und essentiellem Spektrum $\sigma_{\mathrm{ess}}(h) = \mathbb{R}_0^+$ auf der nichtnegativen Halbachse besitzen. Diese Schrödinger-Operatoren sind die Erzeuger der durch die Schrödinger-Gleichung

$$\forall\, t \in \mathbb{R}: \quad i\,\partial_t\psi_t \;=\; h\psi_t\,, \quad \psi_t|_{t=0} = \psi_0 \tag{VI.48}$$

gegebenen Dynamik

$$\forall\, t \in \mathbb{R}: \quad \psi_t \;=\; \exp[-ith]\,\psi_0 \tag{VI.49}$$

eines ($n = 1$) nichtrelativistischen quantenmechanischen Teilchens in $\mathbb{R}^d$, das sich im Potenzialfeld V in $\mathbb{R}^d$ bewegt.

- Betrachten wir nun ein System $n \geq 2$ gleiche solcher Teilchen, so werden ihre quantenmechanischen Zustände durch normierte Vektoren im Tensorproduktraum $\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h}) = \mathfrak{h}^{\otimes n} = L^2(\mathbb{R}^{dN})$ dargestellt. Stehen die Teilchen nicht in Wechselwirkung miteinander, so sind ihre Bewegungen unabhängig voneinander. Bezeichnet $\psi_0^{(n)} \in \mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h})$ einen normierten Anfangsvektor, so wird die Dynamik nun durch den Schrödinger-Gleichung

$$\forall\, t \in \mathbb{R}: \quad i\,\partial_t \psi_t^{(n)}(x_1,\ldots,x_n) \;=\; h^{(n)}\psi_t^{(n)}(x_1,\ldots,x_n)\,, \quad \psi_t^{(n)}|_{t=0} = \psi_0^{(n)} \tag{VI.50}$$

auf $\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h})$ bestimmt. Dabei ist der Schrödinger-Operator $\big(h^{(n)}(\omega)\,,\,\mathfrak{F}^{(n)}_{\mathrm{fin}}[\mathcal{D}_h]\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h})]$ durch

$$h^{(n)} \;:=\; \sum_{j=1}^{n} \mathbb{1}^{\otimes(j-1)} \otimes h \otimes \mathbb{1}^{\otimes(n-j)} \tag{VI.51}$$

definiert, d.h. konkret durch

$$\big[h^{(n)}\psi^{(n)}\big](x_1,\ldots,x_n) \;=\; \sum_{j=1}^{n} \Big[\big(-\Delta_{x_j} + V(x)\big)\psi^{(n)}\Big](x_1,\ldots,x_n)\,. \tag{VI.52}$$

Die n-Teilchen-Schrödinger-Gleichung (VI.50) wird durch

$$\forall\, t \in \mathbb{R}: \quad \psi_t^{(n)} \;=\; \exp\big[-ith^{(n)}\big]\,\psi_0^{(n)} \;=\; \Big(\bigotimes_{j=1}^{n} \exp[-ith]\Big)\,\psi_0^{(n)} \tag{VI.53}$$

gelöst.

- Ein wesentlicher konzeptioneller Unterschied der Quantenmechanik zur klassischen Mechanik ist die Tatsache, dass quantenmechanische Zustände auch Superpositionen von Vektoren zulassen – insbesondere auch solche zu verschiedenen Teilchenzahlen. Im Allgemeinen wird deshalb ein System (unbestimmt) vieler gleicher Teilchen durch normierte Vektoren $\Psi_t = (\psi_t^{(n)})_{n=0}^{\infty} \in \mathfrak{F}(\mathfrak{h})$ beschrieben, die der Schrödinger-Gleichung

$$\forall\, t \in \mathbb{R}: \quad i\,\partial_t \Psi_t \;=\; \mathrm{d}\Gamma(h)\Psi_t \;=\; \big(h^{(n)}\psi_t^{(n)}\big)_{n=0}^{\infty} \tag{VI.54}$$

und der Vorgabe eines Anfangswerts beschrieben, wobei $\big(\mathrm{d}\Gamma(h),\,\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}[\mathcal{D}_h]\big)$ die Zweite Quantisierung von h ist. Die Lösung der Vielteilchen-Schrödinger-Gleichung erhält man durch den anderen Teil $\big(\Gamma(e^{-ith}),\,\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}[\mathcal{D}_h]\big)$ der Zweiten Quantisierung, nämlich

$$\forall\, t \in \mathbb{R}: \quad \Psi_t \;=\; \exp\big[-it\mathrm{d}\Gamma(h)\big]\,\Psi_0 \;=\; \Gamma\big(e^{-ith}\big)\,\Psi_0\,. \tag{VI.55}$$

- Die Notation $\mathrm{d}\Gamma(h)$ und $\Gamma(e^{-ith})$ geht auf Nelson zurück. Glg. (VI.55) spiegelt sehr schön die ursprüngliche Intention für die Namensgebung wider: $t \mapsto \Gamma(e^{-ith})$ ist eine stark stetige unitäre Gruppe auf $\mathfrak{F}(\mathfrak{h})$ und $\mathrm{d}\Gamma(h)$ ihr (infinitesimaler) Erzeuger, was auch durch das „d“ in „dΓ“ angedeutet wird.

Diese Beobachtung des Zusammenhangs zwischen $\mathrm{d}\Gamma$ und Γ führt auch auf den Beweis des folgenden Lemmas

Satz VI.8. *Seien $\mathfrak{h}$ ein Hilbert-Raum und $(\omega, \mathfrak{d}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{h}]$ ein wesentlich selbstadjungierter Operator auf $\mathfrak{h}$. Dann ist auch seine Zweite Quantisierung $\big(\mathrm{d}\Gamma(\omega)\,,\, \mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}[\mathfrak{d}]\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}(\mathfrak{h})]$ wesentlich selbstadjungiert.*

Beweis. Wir verwenden den Satz I.8 von Stone, demgemäß die wesentliche Selbstadjungiertheit eines dicht definierten, abschließbaren Operators $(A, \mathcal{D}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ gleichwertig mit der Aussage ist, dass sein Abschluss $(\overline{A}, \overline{\mathcal{D}}) \supseteq (A, \mathcal{D})$ eine C_0-Gruppe $\{e^{-it\overline{A}}\}_{t\in\mathbb{R}}$ unitärer Operatoren auf $\mathfrak{H}$ erzeugt.

Da $\mathfrak{d} \subseteq \mathfrak{h}$ dicht ist, ist auch $\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}[\mathfrak{d}] \subseteq \mathfrak{F}(\mathfrak{h})$ dicht, s. (VI.23)(VI.24). Folglich sind $(\omega, \mathfrak{d}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{h}]$ und $\big(\mathrm{d}\Gamma(\omega)\,,\, \mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}[\mathfrak{d}]\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}(\mathfrak{h})]$ beide dicht definiert.

Da $(\omega, \mathfrak{d})$ wesentlich selbstadjungiert ist, ist $(\omega, \mathfrak{d})$ symmetrisch. Die impliziert sofort die Symmetrie von $\big(\mathrm{d}\Gamma(\omega)\,,\, \mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}[\mathfrak{d}]\big)$ und daraus folgt nach Lemma I.5 *(v)* auch dessen Abschließbarkeit.

Sei nun $\{v_t := e^{-it\bar{\omega}}\}_{t\in\mathbb{R}} \subseteq \mathcal{B}[\mathfrak{h}]$ die vom Abschluss $(\bar{\omega}, \overline{\mathfrak{d}}) \supseteq (\omega, \mathfrak{d})$ von $(\omega, \mathfrak{d})$ erzeugte C_0-Gruppe unitärer Operatoren auf $\mathfrak{h}$. Wir definieren durch $U_t := \Gamma(v_t)$ eine Familie $\{U_t\}_{t\in\mathbb{R}} \subseteq \mathcal{B}[\mathfrak{F}(\mathfrak{h})]$ beschränkter Operatoren auf $\mathfrak{F}(\mathfrak{h})$. Man prüft leicht nach, dass $\Gamma(a)^* = \Gamma(a^*)$ für jeden beschränkten Operator $a \in \mathcal{B}[\mathfrak{h}]$ gilt. Also gilt auch $U_t^* = \Gamma(v_t)^* = \Gamma(v_t^*)$, was zusammen mit (VI.49) auf

$$U_t^* \, U_t \;=\; \Gamma(v_t^*)\, \Gamma(v_t) \;=\; \Gamma(v_t^* \, v_t) \;=\; \Gamma(\mathbb{1}_{\mathfrak{h}}) \;=\; \mathbb{1}_{\mathfrak{F}(\mathfrak{h})} \tag{VI.56}$$

führt. Analog erhält man $U_t U_t^* = \mathbb{1}_{\mathfrak{F}(\mathfrak{h})}$ und damit dann die Unitarität von U_t.

Sei $\Psi \in \mathfrak{F}(\mathfrak{h})$. Dann gibt es zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $\Psi_{\mathrm{fin}} \in \mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}[\mathfrak{d}]$ so, dass $\|\Psi - \Psi_{\mathrm{fin}}\|_{\mathfrak{F}(\mathfrak{h})} \leq \varepsilon$. Nach Definition von $\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}[\mathfrak{d}]$ gibt es ein $L \in \mathbb{N}$ und $\psi_1, \ldots, \psi_L \in \mathfrak{d}$ sowie Koeffizienten $c^{(n)} : (\mathbb{Z}_1^L)^n \to D_{\mathbb{C}}(0, L)$ für $n \in \mathbb{Z}_0^L$ so, dass

$$\Psi_{\mathrm{fin}} \;=\; \sum_{n=0}^{L} \; \sum_{k(1),\ldots,k(n)=1}^{L} c^{(n)}[k(1), \ldots, k(n)] \; \psi_{k(1)} \otimes \cdots \otimes \psi_{k(n)} \,. \tag{VI.57}$$

Da $\{v_t\}_{t\in\mathbb{R}}$ eine C_0-Gruppe ist, ist $\lim_{t\to 0}\{v_t \psi_k\} = \psi_k$, für alle $k \in \mathbb{Z}_1^L$. Damit gilt

$$\begin{aligned} \lim_{t\to 0} \big\{ U_t \Psi_{\mathrm{fin}} \big\} \;&=\; \sum_{n=0}^{L} \; \sum_{k(1),\ldots,k(n)=1}^{L} c^{(n)}[k(1), \ldots, k(n)] \; \lim_{t\to 0} \big\{ (v_t \psi_{k(1)}) \otimes \cdots \otimes (v_t \psi_{k(n)}) \big\} \\ &=\; \sum_{n=0}^{L} \; \sum_{k(1),\ldots,k(n)=1}^{L} c^{(n)}[k(1), \ldots, k(n)] \; \psi_{k(1)} \otimes \cdots \otimes \psi_{k(n)} \;=\; \Psi_{\mathrm{fin}} \,. \end{aligned} \tag{VI.58}$$

Wir erhalten daraus und aus der Unitarität von U_t sowie der Dreiecksungleichung, dass

$$\limsup_{t\to 0} \|U_t\Psi - \Psi\| \;\leq\; 2\,\|\Psi - \Psi_{\mathrm{fin}})\| \;+\; \limsup_{t\to 0} \|U_t\Psi_{\mathrm{fin}} - \Psi_{\mathrm{fin}}\| \;\leq\; 2\,\varepsilon\,, \tag{VI.59}$$

und im Limes $\varepsilon \to 0$ auch $\lim_{t\to 0} U_t\Psi = \Psi$, also die starke Stetigkeit von $t \mapsto U_t$ bei $t = 0$ und vermöge der Gruppeneigenschaft damit auch für alle $t \in \mathbb{R}$.

Es folgt, dass $\{U_t\}_{t\in\mathbb{R}} \subseteq \mathcal{B}[\mathfrak{F}(\mathfrak{h})]$ eine C_0-Gruppe unitärer Operatoren auf $\mathfrak{F}(\mathfrak{h})$ ist, dessen Erzeuger $(H, \mathcal{D}_H) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}(\mathfrak{h})]$ nach Satz I.7 von Stone selbstadjungiert ist. Ist $\Psi_{\mathrm{fin}} \in \mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}[\mathfrak{d}]$ wie in (VI.57), so erhalten wir ähnlich wie in (VI.58) zunächst

$$\begin{aligned} &U_t\Psi_{\mathrm{fin}} - \Psi_{\mathrm{fin}} \;= \\ &\sum_{n=0}^{L} \sum_{k(1),\ldots,k(n)=1}^{L} c^{(n)}[k(1),\ldots,k(n)]\big\{(v_t\psi_{k(1)}) \otimes\cdots\otimes (v_t\psi_{k(n)}) \;-\; \psi_{k(1)}\otimes\cdots\otimes\psi_{k(n)}\big\}\,, \end{aligned} \tag{VI.60}$$

und weiter

$$\begin{aligned} &\lim_{t\to 0}\left\{\frac{1}{t}\big[(v_t\psi_{k(1)}) \otimes\cdots\otimes (v_t\psi_{k(n)}) \;-\; \psi_{k(1)}\otimes\cdots\otimes\psi_{k(n)}\big]\right\} \\ &\quad= \sum_{j=1}^{n} \lim_{t\to 0}\left\{(v_t\psi_{k(1)}) \otimes\cdots\otimes (v_t\psi_{k(j-1)}) \otimes \left(\frac{v_t\psi_{k(n)} - \psi_{k(n)}}{t}\right) \otimes \psi_{k(j+1)}\otimes\cdots\otimes\psi_{k(n)}\right\} \\ &\quad= \sum_{j=1}^{n} \psi_{k(1)} \otimes\cdots\otimes \psi_{k(j-1)} \otimes \big(-i\omega\,\psi_{k(n)}\big) \otimes \psi_{k(j+1)}\otimes\cdots\otimes\psi_{k(n)}\,, \end{aligned} \tag{VI.61}$$

wobei wir die starke Stetigkeit von v_t, den Satz von Stone, angewandt auf v_t, und die Selbstadjungiertheit von $\bar{\omega}$ auf $\bar{\mathfrak{d}}$ und die Übereinstimmung von $\bar{\omega}$ und ω auf $\mathfrak{d} \ni \psi_k$ verwenden. Setzen wir (VI.61) in (VI.60) ein, so erhalten wir

$$\lim_{t\to 0}\left\{\frac{U_t\Psi_{\mathrm{fin}} - \Psi_{\mathrm{fin}}}{t}\right\} \;=\; -i\mathrm{d}\Gamma(\omega)\,\Psi_{\mathrm{fin}}\,. \tag{VI.62}$$

Aus (VI.62) folgt, dass $\Psi_{\mathrm{fin}} \in \mathcal{D}_H$ und $H\Psi_{\mathrm{fin}} = \mathrm{d}\Gamma(\omega)\Psi_{\mathrm{fin}}$ gilt. Da $\Psi_{\mathrm{fin}} \in \mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}(\mathfrak{d})$ beliebig gewählt werden kann, folgt, dass $(H, \mathcal{D}_H)$ eine selbstadjungierte Fortsetzung von $\big(\mathrm{d}\Gamma(\omega), \mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}(\mathfrak{d})\big)$ und letzterer Operator damit wesentlich selbstadjungiert ist. □

Die Operatoren $\mathrm{d}\Gamma(h)$ und $\Gamma(e^{-ith})$ lassen zwar jeweils die n-Teilchen-Hilbert-Räume $\mathfrak{F}^{(n)}(\mathfrak{h})$ invariant, trotzdem ist es bequem und auch aus analytischen Gründen vorteilhaft (aber eben nicht zwingend notwendig), die Erzeuger $\mathrm{d}\Gamma(h)$ durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren auszudrücken.

Satz VI.9. *Seien $\mathfrak{h}$ ein Hilbert-Raum, $(\omega, \mathfrak{d}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{h}]$ ein wesentlich selbstadjungierter Operator auf $\mathfrak{h}$ und $\mathfrak{b} = \{\varphi_k\}_{k=1}^{\infty} \subseteq \mathfrak{d}$ eine ONB in $\mathfrak{h}$.*

(i) Dann genügt die Zweite Quantisierung $\big(\mathrm{d}\Gamma(\omega)\,,\, \mathcal{S}(\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}[\mathfrak{d}])\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})]$ der Gleichung

$$\mathrm{d}\Gamma(\omega) \;=\; \sum_{k,\ell=1}^{\infty} \langle\varphi_k \,|\, \omega\,\varphi_\ell\rangle\; a^*(\varphi_k)\, a(\varphi_\ell)\,. \tag{VI.63}$$

(ii) Dann genügt die Zweite Quantisierung $\big(\mathrm{d}\Gamma(\omega)\,,\,\mathcal{A}(\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}[\mathfrak{d}])\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}_f(\mathfrak{h})]$ *der Gleichung*

$$\mathrm{d}\Gamma(\omega) \;=\; \sum_{k,\ell=1}^{\infty} \langle \varphi_k \,|\, \omega\, \varphi_\ell \rangle\, c^*(\varphi_k)\, c(\varphi_\ell)\,. \tag{VI.64}$$

Beweis. Wir zeigen nur (VI.64), und dafür reicht es, diese Identität für jedes $n \in \mathbb{N}$ auf Vektoren der Form $\varphi_{k(1)} \wedge \cdots \wedge \varphi_{k(n)}$ für $\varphi_{k(1)}, \ldots, \varphi_{k(n)} \in \mathfrak{b}$ zu zeigen. O.B.d.A. können wir der Einfachheit halber $k(1) = 1, \ldots, k(n) = n$ annehmen. Außerdem verwenden wir, dass $\varphi_1 \wedge \cdots \wedge \varphi_n c^*(\varphi_1) \cdots c^*(\varphi_n)\Omega$ gilt.

Zunächt beobachten wir, dass gemäß der CAR und mit $c(\varphi_\ell)\Omega = 0$

$$\begin{aligned}
&c^*(\varphi_k)\, c(\varphi_\ell)\; c^*(\varphi_1)\, c^*(\varphi_2)\, c^*(\varphi_3) \cdots c^*(\varphi_n)\Omega \\
&\quad = c^*(\varphi_k)\, c(\varphi_\ell) c^*(\varphi_1)\, c^*(\varphi_2)\, c^*(\varphi_3) \cdots c^*(\varphi_n)\Omega \;-\; c^*(\varphi_1)\, c^*(\varphi_2)\, c^*(\varphi_3) \cdots c^*(\varphi_n)\, c^*(\varphi_k)\, c(\varphi_\ell)\Omega \\
&\quad = \sum_{j=1}^{n} c^*(\varphi_1) \cdots c^*(\varphi_{j-1}) \left[c^*(\varphi_k)\, c(\varphi_\ell)\;,\; c^*(\varphi_j) \right] c^*(\varphi_{j+1}) \cdots c^*(\varphi_n)\Omega \\
&\quad = \sum_{j=1}^{n} \langle \varphi_\ell | \varphi_j \rangle\; c^*(\varphi_1) \cdots c^*(\varphi_{j-1})\, c^*(\varphi_k)\, c^*(\varphi_{j+1}) \cdots c^*(\varphi_n)\Omega\,.
\end{aligned} \tag{VI.65}$$

Also ist

$$\begin{aligned}
&\sum_{k,\ell=1}^{\infty} \langle \varphi_k \,|\, \omega\, \varphi_\ell \rangle\; c^*(\varphi_k)\, c(\varphi_\ell)\; c^*(\varphi_1) \cdots c^*(\varphi_n)\Omega \\
&\quad = \sum_{j=1}^{n} c^*(\varphi_1) \cdots c^*(\varphi_{j-1}) \left(\sum_{k,\ell=1}^{\infty} c^*(\varphi_k)\, \langle \varphi_k \,|\, \omega\, \varphi_\ell \rangle\, \langle \varphi_\ell | \varphi_j \rangle \right) c^*(\varphi_{j+1}) \cdots c^*(\varphi_n)\Omega\,.
\end{aligned} \tag{VI.66}$$

Andererseits folgt aus der Linearität der Abbildung $\varphi \mapsto c^*(\varphi)$, dass

$$\begin{aligned}
\sum_{k,\ell=1}^{\infty} c^*(\varphi_k)\, \langle \varphi_k \,|\, \omega\, \varphi_\ell \rangle\, \langle \varphi_\ell | \varphi_j \rangle \;&= c^* \!\left(\sum_{k,\ell=1}^{\infty} \langle \varphi_k \,|\, \omega\, \varphi_\ell \rangle\, \langle \varphi_\ell | \varphi_j \rangle\, \varphi_k \right) \;=\; c^* \!\left(\sum_{k=1}^{\infty} \langle \varphi_k \,|\, \omega\, \varphi_j \rangle\, \varphi_k \right) \\
&= c^*(\omega\, \varphi_j)\,,
\end{aligned} \tag{VI.67}$$

d.h.

$$
\begin{aligned}
&\sum_{k,\ell=1}^{\infty} \langle \varphi_k \,|\, \omega\, \varphi_\ell \rangle \, c^*(\varphi_k)\, c(\varphi_\ell)\; c^*(\varphi_1) \cdots c^*(\varphi_n)\Omega \\
&\qquad = \sum_{j=1}^{n} c^*(\varphi_1) \cdots c^*(\varphi_{j-1})\, c^*(\omega\, \varphi_j)\, c^*(\varphi_{j+1}) \cdots c^*(\varphi_n)\Omega \\
&\qquad = \mathcal{A}^{(n)} \bigg(\sum_{j=1}^{n} \varphi_1 \otimes \cdots \otimes \varphi_{j-1} \otimes (\omega\, \varphi_j) \otimes \varphi_{j+1} \otimes \cdots \otimes \varphi_n \bigg) \\
&\qquad = \mathcal{A}^{(n)} \Big(\mathrm{d}\Gamma^{(n)}(\omega) \big[\varphi_1 \otimes \cdots \otimes \varphi_n \big] \Big) \qquad\qquad \text{(VI.68)} \\
&\qquad = \mathrm{d}\Gamma^{(n)}(\omega) \Big[\mathcal{A}^{(n)} \big(\varphi_1 \otimes \cdots \otimes \varphi_n \big) \Big] \;=\; \mathrm{d}\Gamma^{(n)}(\omega) \big[\varphi_1 \wedge \cdots \wedge \varphi_n \big] \, ,
\end{aligned}
$$

wobei wir im vorletzten Schritt verwenden, dass $\mathrm{d}\Gamma^{(n)}(\omega)$ gemäß (VI.43)-(VI.45) die Teilchenzahl erhält und mit der Projektion $\mathcal{A}^{(n)}$ vertauscht. $\square$

Besitzt der Operator ω aus Satz VI.9 eine ONB $\mathfrak{b} = \{\varphi_k\}_{k=1}^{\infty} \subseteq \mathfrak{d}$ aus Eigenvektoren, so nimmt die Zweite Quantisierung (VI.63) bzw. (VI.64) eine besonders einfache Gestalt an. Dies formulieren wir im folgenden Korollar.

Korollar VI.10. *Seien $\mathfrak{h}$ ein Hilbert-Raum, $(\omega, \mathfrak{d}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{h}]$ ein selbstadjungierter Operator auf $\mathfrak{h}$. Existiert eine ONB $\mathfrak{b} = \{\varphi_k\}_{k=1}^{\infty} \subseteq \mathfrak{d}$ in $\mathfrak{h}$ aus Eigenvektoren von ω, sodass $\omega\varphi_k = \lambda_k \varphi_k$, so gelten*

$$
\mathrm{d}\Gamma(\omega) \;=\; \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \, a^*(\varphi_k)\, a(\varphi_k) \, , \qquad \text{(VI.69)}
$$

für $\big(\mathrm{d}\Gamma(\omega) \, , \, \mathcal{S}(\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}[\mathfrak{d}])\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})]$ *und*

$$
\mathrm{d}\Gamma(\omega) \;=\; \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \, c^*(\varphi_k)\, c(\varphi_k) \, , \qquad \text{(VI.70)}
$$

für $\big(\mathrm{d}\Gamma(\omega) \, , \, \mathcal{A}(\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}[\mathfrak{d}])\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}_f(\mathfrak{h})]$.

VI.5. Punktweise Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Für viele physikalische Systeme ist der 1-Teilchen-Hilbert-Raum der Raum $\mathfrak{h} = L^2(\mathbb{R}^d)$ komplexer quadratintegrabler Funktionen über dem Konfigurationsraum $\mathbb{R}^d$, und die wichtigsten Operatoren sind Multiplikationsoperatoren wie Potenziale V, die für $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ durch

$[V\psi](x) := V(x)\psi(x)$ definiert sind, und Differenzialoperatoren wie $-\Delta$, die als Multiplikationsoperator in der Fourierdarstellung wirken, $\mathcal{F}[-\Delta\psi](p) = p^2\mathcal{F}[\psi](p)$. Diese für die Anwendung zentralen Operatoren besitzen keine ONB aus Eigenvektoren, sondern nur sogenannte uneigentliche Eigenvektoren, wie $\psi_k(x) = (2\pi)^{-d/2}\, e^{-ik\cdot x}$, die zwar die Eigenwertgleichung $[-\Delta\psi_k](x) = k^2\psi_k(x)$ punktweise erfüllen, aber nicht quadratintegrabel und somit keine Hilbert-Raum-Elemente sind.

Ignoriert man diesen Punkt, so wird man von (VI.69) auf

$$\mathrm{d}\Gamma(-\Delta) \;=\; \int_{\mathbb{R}^d} k^2\, \hat{a}_k^*\, \hat{a}_k\, d^dk \tag{VI.71}$$

für die bosonische Zweite Quantisierung von $\big(-\Delta, C_0^\infty(\mathbb{R}^d)\big) \in \mathfrak{L}[L^2(\mathbb{R}^d)]$ geführt. [Eine entsprechende Gleichung gilt auch im fermionischen Fall.] Die Wirkung von $\hat{a}_k$ für festes $k \in \mathbb{R}^d$ auf $n+1$-Teilchen-Vektoren muss dann durch

$$\big[\hat{a}_k\psi^{(n+1)}\big](x_1,\ldots,x_n) \;:=\; \frac{1}{\sqrt{n+1}}\sum_{j=1}^{n+1}\int e^{ik\cdot y}\, \psi^{(n)}(x_1,\ldots,x_{j-1},y,x_j,\ldots,x_n)\, \frac{d^dy}{(2\pi)^{d/2}} \tag{VI.72}$$

festgelegt werden. Man sieht sofort, dass die rechte Seite für genügend reguläre Funktionen definiert ist; so ist offensichtlich $\hat{a}_k : \mathcal{S}[\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}(\mathcal{S}_d(\mathbb{R}^d))] \to \mathcal{S}[\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}(\mathcal{S}_d(\mathbb{R}^d))]$ auf endlichen Vektoren, deren Komponenten Schwartzsche Testfunktionen $\mathcal{S}_d(\mathbb{R}^d)$ sind, dicht definiert und bildet diese in sich ab. Das zentrale Problem mit dieser Definition von $\hat{a}_k$ ist jedoch, dass $\big(\hat{a}_k, \mathcal{S}[\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}(\mathcal{S}_d(\mathbb{R}^d))]\big) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}_b(L^2(\mathbb{R}^d))]$ nicht abschließbar ist, s. Übungsaufgabe 01.2. Dies hat nach Lemma I.5 zur Folge, dass der adjungierte Operator $\big(\hat{a}_k^*, \mathrm{dom}[\hat{a}_k^*]\big)$ nicht dicht definiert ist. Hier gilt gemäß (VI.72)

$$\big[\hat{a}_k^*\psi^{(n)}\big](x_1,\ldots,x_{n+1}) \;:=\; \frac{1}{\sqrt{n+1}}\sum_{j=1}^{n+1}\frac{e^{-ik\cdot x_j}}{(2\pi)^{d/2}}\, \psi^{(n)}(x_1,\ldots,x_{j-1},x_{j+1},\ldots,x_{n+1})\,, \tag{VI.73}$$

und weil die rechte Seite nie quadratintegrabel ist sogar konkret $\mathrm{dom}[\hat{a}_k^*] = \{0\}$ – egal, wie regulär man $\psi^{(n)}$ wählt! Dass die Definition von $\hat{a}_k$ nur unter starken Regularitätsannahmen und die Definition von $\hat{a}_k^*$ sogar unmöglich ist, ist besonders ärgerlich, da diese in der theoretischen Physik überall verwendet werden. Es gibt zahlreiche alternative Konstruktionen, die jedoch alle kompliziert und umständlich sind.

Wir wählen hier die Interpretation von a_x und a_x^* als **operatorwertige Distribution**, d.h. wir definieren die Familien $\{a_x\}_{x\in\mathbb{R}^d}$ und $\{a_x^*\}_{x\in\mathbb{R}^d}$ durch

$$\forall\,\varphi \in \mathcal{S}_d(\mathbb{R}^d): \quad a(\varphi) \;=:\; \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\varphi(x)}\, a_x\, d^dx\,, \quad a^*(\varphi) \;=:\; \int_{\mathbb{R}^d} \varphi(x)\, a_x^*\, d^dx\,, \tag{VI.74}$$

also als formale operatorwertige Distributionskerne. Mit ihnen werden die CCR auf dem Fock-Raum zu

$$\forall\, x,y \in \mathbb{R}^d: \quad [a_x, a_y] \;=\; [a_x^*, a_y^*] \;=\; 0\,, \quad [a_x, a_y^*] \;=\; \delta(x-y)\,, \quad a_x\Omega = 0\,, \tag{VI.75}$$

wobei diese Gleichungen formal und so zu verstehen sind, dass sie erst durch Integration über quadratintegrable oder noch reguläre Funktionen zu sinnvollen mathematischen Aussagen werden. Ist man sich dieser Einschränkung bewusst und überinterpretiert sie nicht, so sind die Identitäten (VI.75) für praktische Berechnungen überaus nützlich.

Für eine Schwartzsche Testfunktion ist $\varphi(x) = (2\pi)^{-d/2} \int e^{ik\cdot x}\, \hat\varphi(k)\, d^d k$, und wir erhalten aus

$$\int_{\mathbb{R}^d} \hat\varphi(k)\, \hat a_k^*\, d^d k \;:=\; a^*(\varphi) \;=\; \int_{\mathbb{R}^d} \varphi(x)\, a_x^*\, d^d x \;=\; \iint_{\mathbb{R}^d} \hat\varphi(k)\, e^{ik\cdot x}\, a_x^*\, \frac{d^d k\, d^d x}{(2\pi)^{d/2}}\,, \tag{VI.76}$$

(nur formal, da Fubini hier nicht anwendbar ist) dass

$$\hat a_k^* \;=\; \int e^{ik\cdot x}\, a_x^*\, \frac{d^d x}{(2\pi)^{d/2}} \;=\; \mathcal{F}[a^*_{(\cdot)}](-k)\,, \tag{VI.77}$$

wobei $\mathcal{F}$ die (formale) Fourier-Transformation notiert. Weiterhin durch formales Adjungieren

$$\hat a_k \;=\; \int e^{-ik\cdot x}\, a_x\, \frac{d^d x}{(2\pi)^{d/2}} \;=\; \mathcal{F}^*[a_{(\cdot)}](-k)\,, \tag{VI.78}$$

in Übereinstimmung mit

$$\int_{\mathbb{R}^d} \overline{\hat\varphi(k)}\, \hat a_k\, d^d k \;:=\; a(\varphi) \;=\; \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\varphi(x)}\, a_x\, d^d x \;=\; \iint_{\mathbb{R}^d} \overline{\hat\varphi(k)}\, e^{-ik\cdot x}\, a_x\, \frac{d^d k\, d^d x}{(2\pi)^{d/2}}\,. \tag{VI.79}$$

Die bosonischen und fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ermöglichen es, die Struktur des bosonischen Fock-Raums $\mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})$ und des fermionischen Fock-Raums $\mathfrak{F}_f(\mathfrak{h})$ mit ihren unterliegenden n-Teilchen-Hilbert-Räumen $\mathfrak{F}_b^{(n)}(\mathfrak{h})$ bzw. $\mathfrak{F}_f^{(n)}(\mathfrak{h})$ völlig zu vergessen und alle Rechnungen nur auf der totalen Menge

$$\mathfrak{D}_b \;:=\; \big\{ a^*(\varphi_1)\cdots a^*(\varphi_n)\Omega \;\big|\; n\in\mathbb{N}_0,\ \varphi_1,\ldots,\varphi_n \in \mathfrak{h} \big\} \;\subseteq\; \mathfrak{F}_b(\mathfrak{h}) \quad \text{bzw.} \tag{VI.80}$$

$$\mathfrak{D}_f \;:=\; \big\{ c^*(\varphi_1)\cdots c^*(\varphi_n)\Omega \;\big|\; n\in\mathbb{N}_0,\ \varphi_1,\ldots,\varphi_n \in \mathfrak{h} \big\} \;\subseteq\; \mathfrak{F}_f(\mathfrak{h}) \tag{VI.81}$$

durchzuführen und anschließend mit linearer und dann stetiger Fortsetzung zu argumentieren.

Im Fall, dass $\mathfrak{h} = L^2(\mathbb{R}^d)$ ist man in der theoretischen Physik wenig zimperlich, überträgt (VI.80) [und analog auch (VI.81), wir beschränken uns jetzt im Weiteren aber auf den bosonischen Fall] auf die punktweisen Erzeugungsoperatoren a_x^* und $\hat a_k^*$ und berechnet die Wirkung von Operatoren nur auf Vektoren der Form

$$\begin{aligned} \mathfrak{D}_b^{(x)} \;&:=\; \big\{ a^*_{x(1)}\cdots a^*_{x(n)}\Omega \;\big|\; n\in\mathbb{N}_0,\ x(1),\ldots,x(n)\in\mathbb{R}^d \big\} \quad \text{und} \\ \mathfrak{D}_b^{(k)} \;&:=\; \big\{ \hat a^*_{k(1)}\cdots \hat a^*_{k(n)}\Omega \;\big|\; n\in\mathbb{N}_0,\ k(1),\ldots,k(n)\in\mathbb{R}^d \big\}\,. \end{aligned} \tag{VI.82}$$

Dabei wird außer acht gelassen, dass $a^*_{x(1)}\cdots a^*_{x(n)}\Omega$ und $\hat a^*_{k(1)}\cdots \hat a^*_{k(n)}\Omega$ gar keine Elemente des Fock-Raums $\mathfrak{F}_b(L^2(\mathbb{R}^d))$ sind.

Es gibt jedoch eine mathematisch sinnvolle Interpretation von (VI.82), die wir jetzt skizzieren. Dazu rufen wir nochmals die Konstruktion des Fock-Raums $\mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})$ speziell im Fall $\mathfrak{h} = L^2(\mathbb{R}^d)$

in Erinnerung: Für $n = 0$ ist $\mathfrak{F}_b^{(0)}(L^2(\mathbb{R}^d)) = \mathbb{C} \cdot \Omega$, und für $n \geq 1$ ist

$$\mathfrak{F}_b^{(n)}(L^2(\mathbb{R}^d)) \;=\; \Big\{ \psi^{(n)} \in L^2[(\mathbb{R}^d)^n] \;\Big|\; \forall \pi \in \mathcal{S}_n \; \forall k_1, \ldots, k_n \in \mathbb{R}^d : \quad \psi^{(n)}(k_{\pi(1)}, \ldots, k_{\pi(n)}) \;=\; \psi^{(n)}(k_1, \ldots, k_n) \Big\} \tag{VI.83}$$

mit Skalarprodukt

$$\big\langle \varphi^{(n)} \big| \psi^{(n)} \big\rangle_{\mathfrak{F}_b^{(n)}(L^2(\mathbb{R}^d))} \;=\; \int \overline{\varphi^{(n)}(k^{(n)})}\, \psi^{(n)}(k^{(n)})\, dk^{(n)} , \tag{VI.84}$$

wobei wir die neue Notation

$$k^{(n)} \;:=\; (k_1, \ldots, k_n) \;\in\; (\mathbb{R}^d)^n \quad \text{und} \quad \int f(k^{(n)})\, dk^{(n)} \;:=\; \int_{(\mathbb{R}^d)^n} f(k_1, \ldots, k_n)\, d^d k_1 \cdots d^d k_n \tag{VI.85}$$

verwenden. Der bosonische Fock-Raum $\mathfrak{F}_b(L^2(\mathbb{R}^d))$ ist der Hilbert-Raum der Folgen

$$\mathfrak{F}_b(L^2(\mathbb{R}^d)) \;=\; \Big\{ \Psi := \big(\psi^{(n)}\big)_{n=0}^{\infty} \;\Big|\; \forall\, n \in \mathbb{N}_0 : \; \psi^{(n)} \in \mathfrak{F}_b^{(n)} , \;\; \langle \Psi | \Psi \rangle_{\mathfrak{F}_b(L^2(\mathbb{R}^d))} < \infty \Big\} , \tag{VI.86}$$

wobei das Skalarprodukt auf $\mathfrak{F}_b(L^2(\mathbb{R}^d))$ für $\Phi := \big(\varphi^{(n)}\big)_{n=0}^{\infty}$ und $\Psi := \big(\psi^{(n)}\big)_{n=0}^{\infty}$ durch

$$\langle \Phi | \Psi \rangle_{\mathfrak{F}_b(L^2(\mathbb{R}^d))} \;:=\; \sum_{n=0}^{\infty} \big\langle \varphi^{(n)} \big| \psi^{(n)} \big\rangle_{\mathfrak{F}_b^{(n)}(L^2(\mathbb{R}^d))} \tag{VI.87}$$

definiert ist. Seien nun

$$\Phi \;=\; \big(\varphi^{(0)}\Omega,\, \varphi^{(1)}, \ldots, \varphi^{(M)},\, 0,\, 0, \ldots \big) , \;\; \Psi \;=\; \big(\psi^{(0)}\Omega,\, \psi^{(1)}, \ldots, \psi^{(N)},\, 0,\, 0, \ldots \big) \tag{VI.88}$$

zwei endliche Vektoren in $\mathcal{S}[\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}(L^2(\mathbb{R}^d))]$ und weiterhin

$$A_\Phi \;:=\; \sum_{m=0}^{M} \int \varphi^{(m)}(k^{(m)})\, \frac{\hat{a}^*(k^{(m)})}{\sqrt{m!}}\, dk^{(m)} , \quad A_\Psi \;:=\; \sum_{n=0}^{N} \int \psi^{(n)}(k^{(n)})\, \frac{\hat{a}^*(k^{(n)})}{\sqrt{n!}}\, dk^{(n)} , \tag{VI.89}$$

wobei

$$\hat{a}^*(k^{(n)}) \;:=\; \hat{a}^*_{k_n}\, \hat{a}^*_{k_{n-1}} \cdots \hat{a}^*_{k_1} \quad \text{und} \quad \hat{a}(\tilde{k}^{(m)}) \;:=\; \hat{a}_{\tilde{k}_1}\, \hat{a}_{\tilde{k}_2} \cdots \hat{a}_{\tilde{k}_m} . \tag{VI.90}$$

Für $m \geq n$ berechnen wir mit Hilfe der CCR, dass

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{\tilde{k}_1} \cdots \hat{a}_{\tilde{k}_m}\, \hat{a}^*_{k_n} \cdots \hat{a}^*_{k_1} \Omega \;&=\; \sum_{\nu(1)=1}^{n} \delta(\tilde{k}_m - k_{\nu(1)})\, \hat{a}_{\tilde{k}_1} \cdots \hat{a}_{\tilde{k}_{m-1}}\, \hat{a}^*_{k_n} \cdots \cancel{\hat{a}^*_{k_{\nu(1)}}} \cdots \hat{a}^*_{k_1} \Omega \\
&=\; \sum_{\nu(2)=1}^{n} \sum_{\nu(1)=1}^{n} \delta^{\perp}_{\nu(1),\nu(2)}\, \delta(\tilde{k}_{m-1} - k_{\nu(2)})\, \delta(\tilde{k}_m - k_{\nu(1)}) \\
&\qquad\qquad \hat{a}_{\tilde{k}_1} \cdots \hat{a}_{\tilde{k}_{m-2}}\, \hat{a}^*_{k_n} \cdots \cancel{\hat{a}^*_{k_{\nu(1)}}} \cdots \cancel{\hat{a}^*_{k_{\nu(2)}}} \cdots \hat{a}^*_{k_1} \Omega \\
&=\; \sum_{\nu(n)=1}^{n} \cdots \sum_{\nu(1)=1}^{n} \Big(\prod_{1 \leq i < j \leq n} \delta^{\perp}_{\nu(i),\nu(j)} \Big) \Big(\prod_{j=1}^{n} \delta(\tilde{k}_{m-j+1} - k_{\nu(j)}) \Big)\, \hat{a}_{\tilde{k}_1} \cdots \hat{a}_{\tilde{k}_{m-n-1}} \Omega \\
&=\; \sum_{\nu \in \mathcal{S}_n} \Big(\prod_{j=1}^{n} \delta(\tilde{k}_{m-j+1} - k_{\nu(j)}) \Big)\, \hat{a}_{\tilde{k}_1} \cdots \hat{a}_{\tilde{k}_{m-n-1}} \Omega ,
\end{aligned} \tag{VI.91}$$

wobei $\delta_{i,j}^{\perp} := 1 - \delta_{i,j}$ und wir im letzten Schritt verwenden, dass die paarweise verschiedenen n-Tupel $\nu(1), \ldots, \nu(n) \in \mathbb{Z}_1^n$ gerade die Permutationen $\nu : \mathbb{Z}_1^n \to \mathbb{Z}_1^n$ sind. Für $m > n$ folgt daraus

$$\langle \hat{a}^*(\tilde{k}^{(m)})\Omega | \hat{a}^*(k^{(n)})\Omega \rangle \; = \; \langle \Omega | \hat{a}(\tilde{k}^{(m)}) \, \hat{a}^*(k^{(n)})\Omega \rangle \; = \; 0 \, , \tag{VI.92}$$

was sich analog auch für $m < n$ ergibt. Also ist

$$\langle \hat{a}^*(\tilde{k}^{(m)})\Omega | \hat{a}^*(k^{(n)})\Omega \rangle \; = \; \delta_{m,n} \sum_{\nu \in \mathcal{S}_n} \left(\prod_{j=1}^{n} \delta(\tilde{k}_{n-j+1} - k_{\nu(j)}) \right) \; = \; \delta_{m,n} \sum_{\pi \in \mathcal{S}_n} \left(\prod_{j=1}^{n} \delta(\tilde{k}_j - k_{\pi(j)}) \right) . \tag{VI.93}$$

Dies setzen wir in $\langle A_\Phi \Omega | A_\Psi \Omega \rangle$ ein und erhalten

$$\begin{aligned} \langle A_\Phi \Omega | A_\Psi \Omega \rangle \; &= \; \sum_{m,n=0}^{M+N} \int \frac{\overline{\varphi^{(m)}(\tilde{k}^{(m)})}}{\sqrt{m!}} \, \frac{\psi^{(n)}(k^{(n)})}{\sqrt{n!}} \, \langle \hat{a}^*(\tilde{k}^{(m)})\Omega | \hat{a}^*(k^{(n)})\Omega \rangle \, dk^{(n)} \, d\tilde{k}^{(m)} \\ &= \; \sum_{n=0}^{M \wedge N} \frac{1}{n!} \sum_{\pi \in \mathcal{S}_n} \int \overline{\varphi^{(n)}(k_{\pi(1)}, \ldots, k_{\pi(n)})} \, \psi^{(n)}(k_1, \ldots, k_n) \, dk^{(n)} \\ &= \; \sum_{n=0}^{M \wedge N} \frac{1}{n!} \sum_{\pi \in \mathcal{S}_n} \int \overline{\varphi^{(n)}(k_1, \ldots, k_n)} \, \psi^{(n)}(k_1, \ldots, k_n) \, dk^{(n)} \, , \end{aligned} \tag{VI.94}$$

wobei wir im letzten Schritt die Symmetrie von $\varphi^{(n)}$ unter Permutationen der Argumente benutzen. Also ist

$$\langle A_\Phi \Omega | A_\Psi \Omega \rangle \; = \; \sum_{n=0}^{M \wedge N} \int \overline{\varphi^{(n)}(k_1, \ldots, k_n)} \, \psi^{(n)}(k_1, \ldots, k_n) \, dk^{(n)} \; = \; \langle \Phi | \Psi \rangle \, , \tag{VI.95}$$

d.h. wir können Φ mit $A_\Phi \Omega$ und Ψ mit $A_\Psi \Omega$ identifizieren, etwa

$$\Psi \; = \; A_\Psi \Omega \; = \; \sum_{n=0}^{\infty} \int \frac{\psi^{(n)}(k^{(n)})}{\sqrt{n!}} \, \hat{a}^*(k^{(n)})\Omega \, dk^{(n)} \, . \tag{VI.96}$$

Im Sinne solcher Integrale, wie (VI.96), können wir $\left\{ \hat{a}^*(k^{(n)})\Omega \middle| n \in \mathbb{N}_0, \; k^{(n)} \in [\mathbb{R}^d]^n \right\}$ als totale Menge im bosonischen Fock-Raum $\mathfrak{F}_b(L^2(\mathbb{R}^d))$ betrachten und Operatoren allein durch ihre Wirkung auf $\hat{a}^*(k^{(n)})\Omega$ zu studieren.

Wir überprüfen nun (VI.71) in etwas allgemeinerer Form, d.h. für Fouriermultplikatoren ω. Ist $\Psi = \big(\psi^{(0)}\Omega, \, \psi^{(1)}, \ldots, \psi^{(N)}, \, 0, \, 0, \ldots \big) \in \mathcal{S}[\mathfrak{F}_{\mathrm{fin}}(\mathcal{S}_d)]$, so ist

$$\mathrm{d}\Gamma(\omega)\Psi \; = \; \big(\hat{\psi}^{(0)}\Omega, \, \hat{\psi}^{(1)}, \ldots, \hat{\psi}^{(N)}, \, 0, \, 0, \ldots \big) \, , \tag{VI.97}$$

mit

$$\hat{\psi}^{(n)}(k^{(n)}) \; = \; \omega(k^{(n)}) \cdot \psi^{(n)}(k^{(n)}) \, , \quad \omega(k^{(n)}) \; := \; \sum_{\nu=1}^{n} \omega(k_\nu) \, . \tag{VI.98}$$

Andererseits sind mit

$$\mathrm{d}\Gamma(\omega) \;=\; \int \omega(k)\, \hat{a}_k^*\, a_k\, d^d k \tag{VI.99}$$

und den CCR auch

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}\Gamma(\omega)\, a^*(k^{(n)})\Omega \;&=\; \int \omega(k)\, \hat{a}_k^*\, a_k\, a_{k_n}^* \cdots a_{k_1}^* \Omega\, d^d k \\
&= \sum_{\nu=1}^{n} \int \omega(k)\, \delta(k - k_\nu)\, a_{k_n}^* \cdots a_{k_{\nu+1}}^*\, \hat{a}_k^*\, a_{k_{\nu-1}}^* \cdots a_{k_1}^* \Omega\, d^d k \\
&= \sum_{\nu=1}^{n} \int \omega(k_\nu)\, \delta(k - k_\nu)\, a_{k_n}^* \cdots a_{k_{\nu+1}}^*\, \hat{a}_{k_\nu}^*\, a_{k_{\nu-1}}^* \cdots a_{k_1}^* \Omega\, d^d k \\
&= \left(\sum_{\nu=1}^{n} \int \omega(k_\nu) \right) a_{k_n}^* \cdots a_{k_1}^* \Omega \;=\; \omega(k^{(n)})\, a^*(k^{(n)})\Omega\,,
\end{aligned} \tag{VI.100}$$

was nach Multiplikation mit $(n!)^{-1/2}\psi^{(n)}(k^{(n)})$, Integration über $k^{(n)}$ und anschließender Summation auf (VI.97) und (VI.98) führt.

VII. Physikalisches Modell und effektive Theorie

Wir kommen nun zur Definition und Anwendung von *Renormierungstransformationen.* In der Physik werden diese häufig als *Renormierungsgruppe* bezeichnet, weshalb auch wir kurz von *RG-Transformationen* sprechen werden. Ihre konkrete Formulierung ist kontextabhängig, deshalb führen wir zuerst das *Spin-Boson-Modell* aus der Physik ein, für das wir RG-Transformationen definieren.

VII.1. Das Spin-Boson-Modell, nichtwechselwirkender Fall und Standarddarstellung

Das einfachste nichttriviale Modell eines Teilchensystems, das in Wechselwirkung mit einem (bosonischen) Quantenfeld steht, ist das **Spin-Boson-Modell**. Es beschreibt die Dynamik eines Atoms mit zwei Niveaus, d.h. einem atomaren Grundzustand der Energie e_0 und einem angeregten Zustand der Energie $e_1 > e_0$, das an ein quantisiertes Bosonenfeld gekoppelt ist. Dieses Bosonenfeld stellt eine vereinfachte Form des Photonenfeldes dar, und wir bezeichnen es deshalb im Weiteren auch als *Photonenfeld.*

Der Hilbert-Raum des Atom-Photon-Systems ist das Tensorprodukt

$$\mathfrak{H} \; := \; \mathfrak{H}_{\mathrm{at}} \otimes \mathfrak{F} \,, \tag{VII.1}$$

des Hilbert-Raums $\mathfrak{H}_{\mathrm{at}} = \mathbb{C}^2$ des 2-Niveau-Atoms und des bosonischen Fock-Raums $\mathfrak{F} := \mathfrak{F}_b(\mathfrak{h})$ über den Ein-Photonenraum $\mathfrak{h} := L^2(\mathbb{R}^3)$.

Der Hamilton-Operator H_{at}, der normierte Grundzustandsvektor $\varphi_{\mathrm{at}}^{(\downarrow)}$ und der normierte angeregte Eigenvektor $\varphi_{\mathrm{at}}^{(\uparrow)}$ des 2-Niveau-Atoms sind gegeben durch

$$H_{\mathrm{at}} \; := \; \begin{pmatrix} e_1 & 0 \\ 0 & e_0 \end{pmatrix} , \quad \varphi_{\mathrm{at}}^{(\downarrow)} \; := \; \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} , \quad \varphi_{\mathrm{at}}^{(\uparrow)} \; := \; \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} . \tag{VII.2}$$

Der Hamiltonian des Photonenfeldes ist der selbstadjungierte Operator $(H_{\mathrm{ph}}, \mathcal{D}_{\mathrm{ph}}) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{F}]$, wobei

$$H_{\mathrm{ph}} \; := \; \int \omega(k) \, a_k^* \, a_k \, d^3k \tag{VII.3}$$

mit der Photonendispersionsrelation $\omega(k) := |k|$, die sich für masselose relativistische Teilchen durch $|k| = \sqrt{k^2 + m^2}|_{m=0}$ ergibt, ist und $\{a_k, a_k^*\}_{k \in \mathbb{R}^3}$ die Fock-Darstellung der CCR auf $\mathfrak{F}$.

Außerdem ist

$$\mathcal{D}_{\mathrm{ph}} \;:=\; \Big\{ \big(\psi^{(n)}\big)_{n=0}^{\infty} \in \mathfrak{F} \;\Big|\; |\psi^{(0)}|^2 \,+\, \sum_{n=1}^{\infty} \int \Big(\sum_{\nu=1}^{n} \omega(k_\nu) \Big)^2 \big|\psi^{(n)}(k^{(n)})\big|^2 \, dk^{(n)} \;<\; \infty \Big\} \tag{VII.4}$$

der natürliche Definitionsbereich von H_{ph}, wenn $H_{\mathrm{ph}} = \mathrm{d}\Gamma(\omega)$ als Multiplikationsoperator realisiert wird.

Die Dynamik des Atom-Photon-Systems wird erzeugt durch den Hamilton-Operator

$$H_g \;:=\; H_0 \,+\, gW \tag{VII.5}$$

$$H_0 \;:=\; H_{\mathrm{at}} \otimes \mathbb{1} \,+\, \mathbb{1} \otimes H_{\mathrm{ph}}\,, \tag{VII.6}$$

wobei die Wechselwirkung von der Form

$$W \;:=\; \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \big[a^*(G) \,+\, a(G) \big] \tag{VII.7}$$

ist und wir annehmen, dass die *Kopplungsfunktion* $G \in L^2(\mathbb{R}^3)$ folgenden Schranken genügt,

$$\Lambda_1^2 \;:=\; \int \big(1 + \omega(k)^{-1} \big) \, |G(k)|^2 \, d^3k \;<\; \infty\,, \tag{VII.8}$$

$$\Lambda_2 \;:=\; \sup_{k \in \mathbb{R}^3} \big\{ \omega(k)^{1/2-\mu/2} \, |G(k)| \big\} \;<\; \infty\,. \tag{VII.9}$$

Dabei ist $\mu \geq 0$ eine feste nichtnegative Zahl.

Der **nichtwechselwirkende Spin-Boson-Hamiltonian** ist der selbstadjungierte Operator $(H_0, \mathcal{D}_0) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ mit $\mathcal{D}_0 = \mathbb{C}^2 \otimes \mathcal{D}_{\mathrm{ph}}$. Gemäß Gleichung (VII.29) ist $H_0 = H_{\mathrm{at}} \otimes \mathbb{1}_{\mathrm{ph}} + \mathbb{1}_{\mathrm{at}} \otimes H_{\mathrm{ph}}$. Um die spektralen Eigenschaften von H_0 zu verstehen, betrachten wir zunächst (endlich-dimensionale) Matrizen.

Seien dazu $A = A^* \in \mathcal{B}[\mathfrak{H}_A]$ und $B = B^* \in \mathcal{B}[\mathfrak{H}_B]$ zwei selbstadjungierte Matrizen auf endlich-dimensionalen Hilbert-Räumen $\dim(\mathfrak{H}_A) = m \in \mathbb{N}$ und $\dim(\mathfrak{H}_B) = n \in \mathbb{N}$ und ONB $\{\varphi_\mu^{(A)}\}_{\mu=1}^m \subseteq \mathfrak{H}_A$, $\{\varphi_\nu^{(B)}\}_{\nu=1}^n \subseteq \mathfrak{H}_B$ aus Eigenvektoren mit zugehörigen Eigenwerten $\lambda_\mu^{(A)}, \lambda_\nu^{(B)} \in \mathbb{R}$, sodass $A\varphi_\mu^{(A)} = \lambda_\mu^{(A)}\varphi_\mu^{(A)}$ und $B\varphi_\nu^{(B)} = \lambda_\nu^{(B)}\varphi_\nu^{(B)}$. Ist $H \in \mathcal{B}[\mathfrak{h}_A \otimes \mathfrak{h}_B]$ der Form $H = A \otimes \mathbb{1}_B \,+\, \mathbb{1}_A \otimes B$, so ist $\{\phi_{\mu,\nu}\}_{\mu \in \mathbb{Z}_1^m, \nu \in \mathbb{Z}_1^n} \subseteq \mathfrak{h}_A \otimes \mathfrak{h}_B$ mit $\phi_{\mu,\nu} := \varphi_\mu^{(A)} \otimes \varphi_\nu^{(B)}$ eine ONB aus Eigenvektoren der selbstadjungierten Matrix H, nämlich $H\phi_{\mu,\nu} = (\lambda_\mu^{(A)} + \lambda_\nu^{(B)})\phi_{\mu,\nu}$, wie man leicht nachrechnet. Für Matrizen ist das Spektrum von $A \otimes \mathbb{1}_B + \mathbb{1}_A \otimes B$ also gegeben durch die mengentheoretische Summe des Spektrums von A und des Spektrums von B,

$$\sigma(A \otimes \mathbb{1}_B \,+\, \mathbb{1}_A \otimes B) \;=\; \sigma(A) \,+\, \sigma(B) \;:=\; \big\{ \lambda^{(A)} + \lambda^{(B)} \;\big|\; \lambda^{(A)} \in \sigma(A) \quad \lambda^{(B)} \in \sigma(B) \big\}\,. \tag{VII.10}$$

Glg. (VII.10) gilt auch für allgemeine selbstadjungierte Operatoren A und B, wenn man auf der rechten Seite noch den Abschluss (in $\mathbb{R}$) bildet [**?**, Ch. VIII.10]: Sind $A = A^* \in \mathcal{B}[\mathfrak{H}_A]$ und $B = B^* \in \mathcal{B}[\mathfrak{H}_B]$ zwei beschränkte selbstadjungierte Operatoren auf separablen komplexen Hilbert-Räumen $\mathfrak{H}_A$ bzw. $\mathfrak{H}_B$, so ist

$$\sigma(A \otimes \mathbb{1}_B \,+\, \mathbb{1}_A \otimes B) \;=\; \overline{\sigma(A) \,+\, \sigma(B)}\,. \tag{VII.11}$$

Wir wenden dies auf $A = H_{\mathrm{at}}$ und $B = H_{\mathrm{ph}}$ an und erhalten mit $\sigma(H_{\mathrm{at}}) = \{e_0, e_1\}$ und $\sigma(H_{\mathrm{ph}}) = \mathbb{R}_0^+$, dass

$$\sigma(H_0) \; = \; [e_0\,, \infty) \cup [e_1\,, \infty) \; = \; [e_0\,, \infty)\,. \tag{VII.12}$$

Dabei sind e_0 und e_1 Eigenwerte am Rand bzw. in der Mitte des kontinuierlichen Spektrums, da

$$H_0(\varphi_{\mathrm{at},\downarrow} \otimes \Omega) \; = \; e_0(\varphi_{\mathrm{at},\downarrow} \otimes \Omega) \quad \text{und} \quad H_0(\varphi_{\mathrm{at},\uparrow} \otimes \Omega) \; = \; e_1(\varphi_{\mathrm{at},\uparrow} \otimes \Omega)\,. \tag{VII.13}$$

Aus Sicht der in vorigen Kapiteln dargelegten Spektralanalyse selbstadjungierter Operatoren, wie etwa Schrödinger-Operatoren, stellen sich nun in natürlicher Weise folgende Fragen:

(a) Ist das zugehörige wechselwirkende Spin-Boson-Modell mathematisch wohldefiniert? Konkreter, ist H_g für $g \neq 0$ auch selbstadjungiert und halbbeschränkt?

(b) Falls (a) positiv beantwortet werden kann, ist dann die zugehörige Grundzustandsenergie $\inf \sigma(H_g)$ ein Eigenwert, oder löst sich das 2-Niveau-Atom durch Kopplung an das Photonenfeld auf?

(c) Falls (a) und (b) positiv beantwortet werden können, wird dann der angeregte Zustand bei Energie e_1 instabil und zu einer Resonanz, d.h. einem Zustand mit endlicher Lebensdauer?

Alle diese Fragen sind in den letzten drei Jahrzehnten ausführlich untersucht und in vielen Varianten beantwortet worden. Insbesondere wurden die obigen Eigenschaften (a)-(c) unter der Annahme von (VII.7) und (VII.8) für strikt positives $\mu > 0$ gezeigt. Interessanterweise lassen sich (a)-(c) auch für $\mu = 0$ etablieren, siehe [**?**, **?**, **?**].

In dieser Vorlesung wollen wir zunächst die Frage (a) beantworten und zeigen, dass $(W, \mathcal{D}_0)$ eine infinitesimale Störung von $(H_0, \mathcal{D}_0)$ ist, womit wir sofort die Selbstadjungiertheit und Halbbeschränktheit von $(H_g, \mathcal{D}_0) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ erhalten.

Anschließend wenden wir uns der Frage (b) zu, ob die Grundzustandsenergie $\inf \sigma(H_g)$ ein Eigenwert ist. Hier kommt als wesentliche neue Schwierigkeit hinzu, dass der zugehörige ungestörte Eigenwert $e_0 = \inf \sigma_{\mathrm{ess}}(H_0)$ nicht isoliert vom wesentlichen Spektrum von H_0 ist. Wir können also nicht die in Kapitel IV dargelegte Methode der Dunford-Cauchy-Integrale zur Konstruktion der Grundzustandsprojektion anwenden. Aus dem gleichen Grund schägt auch die Anwendung von Satz V.4 fehl, da in diesem Fall $\delta = \mathrm{dist}[e_0\,, \sigma(H_0) \setminus \{e_0\}] = 0$ ist. Die zum Ziel führende Methode zur Beantwortung von (b), die wir hier beschreiben, ist die mit Hilfe der Feshbach-Schur-Abbildung konstruierte RG-Transformation. Wir folgen hier [**?**, **?**].

Wir reduzieren nun noch das oben eingeführte Spin-Boson-Modell auf die **Standarddarstellung**, in der $e_0 = 0$ und $e_1 = 1$ sind. Dazu definieren wir die unitäre *Dilatation* $u_\eta \in \mathcal{B}[\mathfrak{h}]$ *um den Faktor* $\eta > 0$ durch

$$[u_\eta \psi](k) \; := \; \eta^{3/2} \psi(\eta k) \tag{VII.14}$$

und beobachten, dass

$$[u_\eta\, \omega\, \psi](k) \; = \; \eta^{3/2}\, \omega(\eta k)\, \psi(\eta k) \; = \; \eta\, \omega(k)\, [u_\eta \psi](k)\,, \tag{VII.15}$$

da $\omega(k) = |k|$, also

$$u_\eta \circ \omega \circ u_\eta^* \; = \; \eta \cdot \omega\,. \tag{VII.16}$$

Weiterhin ist auch $\Gamma[u_\eta] : \mathfrak{F} \to \mathfrak{F}$ unitär mit

$$\Gamma[u_\eta] \circ a(\varphi) \circ \Gamma[u_\eta]^* \;=\; a(u_\eta \varphi) \quad \text{und} \quad \Gamma[u_\eta] \circ a^*(\varphi) \circ \Gamma[u_\eta]^* \;=\; a^*(u_\eta \varphi)\,, \tag{VII.17}$$

und wir erhalten

$$\Gamma[u_\eta] \circ H_{\mathrm{ph}} \circ \Gamma[u_\eta]^* \;=\; \Gamma[u_\eta] \circ \mathrm{d}\Gamma[\omega] \circ \Gamma[u_\eta]^* \;=\; \mathrm{d}\Gamma[u_\eta \circ \omega \circ u_\eta^*] \;=\; \eta\, \mathrm{d}\Gamma[\omega] \;=\; \eta\, H_{\mathrm{ph}}\,. \tag{VII.18}$$

Wenden wir nun die unitäre Transformation $U_\eta := \mathbb{1}_{\mathbb{C}}^2 \otimes \Gamma[u_\eta] \in \mathcal{B}[\mathfrak{H}]$ auf H_g an, so erhalten wir

$$U_\eta\, H_g U_\eta^* \;= H_{0,\eta} \;+\; e_0 \;+\; g W_\eta\,, \tag{VII.19}$$

$$H_{0,\eta} \;:=\; \begin{pmatrix} e_1 - e_0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \mathbb{1}_{\mathfrak{F}} \;+\; \mathbb{1}_{\mathbb{C}}^2 \otimes \eta H_{\mathrm{ph}} \tag{VII.20}$$

$$W_\eta \;:=\; \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \big(a^*(G_\eta) + a(G_\eta) \big)\,, \tag{VII.21}$$

$$G_\eta(k) \;:= \eta^{3/2}\, G(\eta k)\,. \tag{VII.22}$$

Speziell für die Wahl $\eta := (e_1 - e_0)$ erhalten wir damit

$$\widehat{H}_g \;:=\; U_\eta\, (H_g - e_0)\, U_\eta^* \;=\; (e_1 - e_0)\, \big(\widetilde{H}_0 \;+\; g \widetilde{W} \big)\,, \tag{VII.23}$$

$$\widetilde{H}_0 \;:=\; \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \mathbb{1}_{\mathfrak{F}} \;+\; \mathbb{1}_{\mathbb{C}}^2 \otimes H_{\mathrm{ph}} \tag{VII.24}$$

$$\widetilde{W} \;:=\; \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \big(a^*(\widetilde{G}) + a(\widetilde{G}) \big)\,, \tag{VII.25}$$

$$\widetilde{G}(k) \;:= (e_1 - e_0)^{-1/2}\, G[(e_1 - e_0)\, k]\,. \tag{VII.26}$$

Durch Verschiebung des Energienullpunkts um e_0 und anschließender Anwendung einer unitären Dilatation um $\eta := e_1 - e_0$, mit deren Hilfe die photonische Energieeinheit der atomaren Übergangsenergie $e_1 - e_0$ angeglichen wird, können wir also im Weiteren ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, dass

$$e_0 \;=\; 0 \quad \text{und} \quad e_1 \;=\; 1 \tag{VII.27}$$

sind. Diese Annahme werden wir im Folgenden stets voraussetzen und zur alten Notation zurückkehren, d.h. wir betrachten

$$H_g \;= H_0 \;+\; g W\,, \tag{VII.28}$$

$$H_0 \;:=\; \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \mathbb{1}_{\mathfrak{F}} \;+\; \mathbb{1}_{\mathbb{C}}^2 \otimes H_{\mathrm{ph}} \tag{VII.29}$$

$$W \;:=\; \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \big(a^*(G) + a(G) \big)\,, \tag{VII.30}$$

wobei G den Schranken (VII.8) und (VII.9) genügt (die nun noch von $e_1 - e_0$ abhängen, was wir aber nicht weiter verfolgen).

VII.2. Relative Beschränkheit der Wechselwirkung

Als Erstes zeigen wir, dass W eine infinitesimale Störung von H_0 ist. Wir lassen im Weiteren triviale Tensorfaktoren meist aus und schreiben A und B statt $\mathbb{1} \otimes A$ bzw. $B \otimes \mathbb{1}$, falls dies nicht zu Verwechselungen führen kann.

Lemma VII.1.

$$\left\| W \, (H_{\mathrm{ph}} + 1)^{-1/2} \right\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; 2\Lambda_1 \,, \tag{VII.31}$$

und insbesondere ist W eine infinitesimale Störung von H_0.

Beweis. Für $\psi \in \mathfrak{H}_{\mathrm{fin}}$ folgt aus der der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung

$$\begin{aligned} \left\| a(G) \, (H_{\mathrm{ph}} + 1)^{-1/2} \psi \right\|_{\mathfrak{F}}^2 &= \left\| \int \left\{ G^*(k) \, a(k) \, (H_{\mathrm{ph}} + 1)^{-1/2} \, \psi \right\} d^3k \right\|_{\mathfrak{F}}^2 \\ &\leq \left(\int |G(k)| \, \left\| a_k \, (H_{\mathrm{ph}} + 1)^{-1/2} \psi \right\|_{\mathfrak{F}} d^3k \right)^2 \\ &\leq \left(\int \frac{|G(k)|^2}{\omega(k)} \, d^3k \right) \left(\int \omega(k) \, \left\| a_k \, (H_{\mathrm{ph}} + 1)^{-1/2} \psi \right\|_{\mathfrak{F}}^2 d^3k \right). \end{aligned} \tag{VII.32}$$

Da weiterhin

$$\int \omega(k) \, \| a_k \, \varphi \|_{\mathfrak{F}}^2 \, d^3k \;=\; \left\langle \varphi \,\middle|\, \int \omega(k) \, a_k^* \, a_k \, d^3k \, \varphi \right\rangle \;=\; \langle \varphi \,|\, H_{\mathrm{ph}} \varphi \rangle \;=\; \left\| H_{\mathrm{ph}}^{1/2} \varphi \right\|_{\mathfrak{F}}^2 \tag{VII.33}$$

gilt, ist

$$\int \omega(k) \, \left\| a_k \, (H_{\mathrm{ph}} + 1)^{-1/2} \psi \right\|_{\mathfrak{F}}^2 d^3k \;=\; \left\| H_{\mathrm{ph}}^{1/2} \, (H_{\mathrm{ph}} + 1)^{-1/2} \psi \right\|_{\mathfrak{F}}^2 \;\leq\; \|\psi\|_{\mathfrak{F}}^2 \,, \tag{VII.34}$$

und wir erhalten

$$\left\| a(G) \, (H_{\mathrm{ph}} + 1)^{-1/2} \psi \right\|_{\mathfrak{F}}^2 \;\leq\; \left(\int \frac{|G(k)|^2}{\omega(k)} \, d^3k \right) \|\psi\|_{\mathfrak{F}}^2 \,. \tag{VII.35}$$

Weiterhin ist

$$\begin{aligned} \| a^*(G) \, \varphi \|_{\mathfrak{F}}^2 &= \langle \varphi \,|\, a(G) \, a^*(G) \, \varphi \rangle \;=\; \big\langle \varphi \,\big|\, \big(\langle G | G \rangle \;+\; a^*(G) \, a(G) \big) \, \varphi \big\rangle \\ &= \|G\|_{\mathfrak{h}}^2 \, \|\varphi\|_{\mathfrak{H}}^2 \;+\; \| a(G) \, \varphi \|_{\mathfrak{F}}^2 \,, \end{aligned} \tag{VII.36}$$

also

$$\begin{aligned} \left\| a^*(G) \, (H_{\mathrm{ph}} + 1)^{-1/2} \psi \right\|_{\mathfrak{F}}^2 &= \|G\|_{\mathfrak{h}}^2 \, \left\| (H_{\mathrm{ph}} + 1)^{-1/2} \psi \right\|_{\mathfrak{F}}^2 \;+\; \left\| a(G) \, (H_{\mathrm{ph}} + 1)^{-1/2} \psi \right\|_{\mathfrak{F}}^2 \\ &\leq \|G\|_{\mathfrak{h}}^2 \, \|\psi\|_{\mathfrak{F}}^2 \;+\; \left\| a(G) \, (H_{\mathrm{ph}} + 1)^{-1/2} \psi \right\|_{\mathfrak{F}}^2 . \end{aligned} \tag{VII.37}$$

Aus (VII.35), (VII.37) und

$$\left\| \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\|_{\mathcal{B}[\mathbb{C}^2]} \leq 1 \tag{VII.38}$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} \left\| W\,(H_{\mathrm{ph}}+1)^{-1/2}\psi \right\|_{\mathfrak{F}} &\leq \left\| a^*(G)\,(H_{\mathrm{ph}}+1)^{-1/2}\psi \right\|_{\mathfrak{F}} + \left\| a(G)\,(H_{\mathrm{ph}}+1)^{-1/2}\psi \right\|_{\mathfrak{F}} \\ &\leq 2\left(\int \left[1+\omega(k)^{-1}\right] |G(k)|^2\, d^3k \right)^{1/2} \|\psi\|_{\mathfrak{F}}\,, \end{aligned} \tag{VII.39}$$

was (VII.31) beweist. Für $E > |e_1| + |e_0| + 1$ folgt dann noch, dass $H_0 + E \geq H_{\mathrm{ph}} + e_0 + E \geq \frac{1}{2}E > \frac{1}{2}$ und daher

$$\left\| W\,(H_0+E)^{-1} \right\|_{\mathrm{op}} \leq \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{E}} \left\| W\,(H_{\mathrm{ph}}+1)^{-1/2} \right\|_{\mathrm{op}} \leq \frac{4\,\Lambda_1}{\sqrt{E}} \to 0\,, \tag{VII.40}$$

für $E \to \infty$, was zeigt, dass W eine infinitesimale Störung von H_0 ist. □

Wir bemerken, dass damit $(H_g, \mathcal{D}_0) \in \mathfrak{L}[\mathfrak{H}]$ nach dem Satz III.2 von Kato-Rellich selbstadjungiert und halbbeschränkt ist.

Bevor wir die Freiheitsgrade hoher Photonenenergien mit Hilfe der Feshbach-Schur-Abbildung eliminieren, wollen wir Lemma VII.1 noch etwas verbessern. Im zu untersuchenden Kontext ist die Verwendung von Abschätzungen im Sinne quadratischer Formen vorteilhafter. Das heißt nicht, dass wir nicht Operatornormen abschätzen, sondern vielmehr, dass wir jeweils eine halbe Potenz der Resolvente von $(H_{\mathrm{ph}}+\varepsilon)^{1/2}$ auf beiden Seiten von W symmetrisch verteilen und die Norm von $(H_{\mathrm{ph}}+\varepsilon)^{-1/2}W(H_{\mathrm{ph}}+\varepsilon)^{-1/2}$ statt der von $W(H_{\mathrm{ph}}+\varepsilon)^{-1}$ abzuschätzen. Dazu zeigen wir zunächst

Lemma VII.2. *Für alle $\varepsilon > 0$ ist*

$$\left\| R_\varepsilon^{1/2}\, W\, R_\varepsilon^{1/2} \right\|_{\mathrm{op}} \leq \frac{2\Lambda_1}{\sqrt{\varepsilon}}\,, \quad \textit{wobei} \quad R_\varepsilon := (H_{\mathrm{ph}}+\varepsilon)^{-1}\,. \tag{VII.41}$$

Beweis. Wir bemerken zunächst, dass die Beschränktheit des Operators $R_\varepsilon^{1/2} W R_\varepsilon^{1/2}$ schon aus Lemma VII.1 folgt – wenngleich mit der Normschranke $\mathcal{O}(\Lambda_1\varepsilon^{-1})$, die für kleine $\varepsilon > 0$ durch die behauptete Schranke (VII.41) um einen Faktor $\sqrt{\varepsilon}$ verbessert wird. Damit ist aber $R_\varepsilon^{1/2} W R_\varepsilon^{1/2}$ auch selbstadjungiert, und seine Operatornorm stimmt mit seinem Spektralradius überein,

$$\left\| R_\varepsilon^{1/2}\, W\, R_\varepsilon^{1/2} \right\|_{\mathrm{op}} = \sup\left\{ \left\langle \psi \,\middle|\, R_\varepsilon^{1/2}\, W\, R_\varepsilon^{1/2}\psi \right\rangle \,\middle|\, \psi \in \mathfrak{H}_{\mathrm{fin}}\,,\ \|\psi\|_{\mathfrak{H}} = 1 \right\}. \tag{VII.42}$$

Für $\psi \in \mathfrak{H}_{\mathrm{fin}}$ ist

$$\left\langle \psi \,\middle|\, R_\varepsilon^{1/2}\, W\, R_\varepsilon^{1/2}\psi \right\rangle = 2\mathrm{Re}\left\langle \sigma^{(1)}\, R_\varepsilon^{1/2}\psi \,\middle|\, a(G)\, R_\varepsilon^{1/2}\psi \right\rangle, \tag{VII.43}$$

wobei $\sigma^{(1)} = \left(\begin{smallmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{smallmatrix}\right)$ die Pauli-Matrix in x-Richtung notiert. Aus der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung und (VII.38) folgt dann für normierte $\psi \in \mathfrak{H}_{\mathrm{fin}}$, dass

$$\left\langle \psi \,\middle|\, R_\varepsilon^{1/2} \, W \, R_\varepsilon^{1/2} \psi \right\rangle \;\leq\; 2 \left\| R_\varepsilon^{1/2} \psi \right\| \, \left\| a(G) \, R_\varepsilon^{1/2} \psi \right\| \;\leq\; \frac{2}{\sqrt{\varepsilon}} \left\| a(G) \, R_\varepsilon^{1/2} \psi \right\| . \tag{VII.44}$$

Wie in (VII.32) folgt dann

$$\left\| a(G) \, R_\varepsilon^{1/2} \psi \right\|_{\mathfrak{F}}^2 \;\leq\; \Lambda_1^2 \left(\int \omega(k) \, \left\| a_k \, R_\varepsilon^{1/2} \psi \right\|_{\mathfrak{F}}^2 \, d^3k \right) \;=\; \Lambda_1^2 \, \left\| H_{\mathrm{ph}}^{1/2} \, (H_{\mathrm{ph}} + \varepsilon)^{-1/2} \right\|_{\mathcal{B}[\mathfrak{F}]}^2 \;\leq\; \Lambda_1^2 \tag{VII.45}$$

und damit die behauptete Schranke. □

VII.3. Elimination der Hochenergie-Freiheitsgrade

Wir wählen nun eine feste Funktion $\theta \in C_0^\infty(\mathbb{R}_0^+; \mathbb{R}_0^+)$ mit folgenden Eigenschaften,

$$\theta \equiv 1 \;\text{ auf }\; [0, \tfrac{3}{4}) , \qquad \theta' \leq 0 , \qquad \theta \equiv 0 \;\text{ auf }\; [1, \infty) , \tag{VII.46}$$

d.h. θ ist eine geglättete charakteristische Funktion auf $[0,1]$. Anschließend definieren wir $\chi, \overline{\chi} \in C^\infty(\mathbb{R}_0^+; \mathbb{R}_0^+)$ durch

$$\chi(r) \;:=\; \sin\left[\tfrac{\pi}{2}\, \theta(r)\right] \quad \text{und} \quad \overline{\chi}(r) \;:=\; \cos\left[\tfrac{\pi}{2}\, \theta(r)\right] . \tag{VII.47}$$

Beachte, dass dann auch χ die Eigenschaften (VII.46) besitzt und dass $\chi^2(r) + \overline{\chi}^2(r) = 1$ für alle $r \geq 0$ gilt. Der Übergang von θ zu χ sichert aber insbesondere auch die Glattheit von $\overline{\chi} = \sqrt{1 - \chi^2}$, was für $\sqrt{1 - \theta^2}$ im Allgemeinen falsch ist.
Anschließend wählen wir eine feste Zahl

$$0 \;<\; \rho \;\leq\; \frac{1}{32} \tag{VII.48}$$

und definieren $\chi_\rho = \chi_\rho^*, \overline{\chi}_\rho = \overline{\chi}_\rho^* \in \mathcal{B}[\mathfrak{H}]$ durch

$$\chi_\rho \;:=\; P_{\mathrm{at},\downarrow} \otimes \chi(H_{\mathrm{ph}}/\rho) , \quad \overline{\chi}_\rho \;:=\; P_{\mathrm{at},\uparrow} \otimes \mathbb{1}_{\mathfrak{F}} \;+\; P_{\mathrm{at},\downarrow} \otimes \overline{\chi}(H_{\mathrm{ph}}/\rho) , \tag{VII.49}$$

sodass $\chi_\rho^2 + \overline{\chi}_\rho^2 = \mathbb{1}_{\mathfrak{H}}$. Dabei sind

$$P_{\mathrm{at},\downarrow} \;:=\; \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad P_{\mathrm{at},\uparrow} \;:=\; \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{VII.50}$$

die Projektionen auf den atomaren Grundzustand und den angeregten atomaren Zustand. (Wir ignorieren hier, dass $P_{\mathrm{at},\uparrow} = H_{\mathrm{at}}$.) Weiterhin bezeichnen wir mit $\overline{P}_\rho$ die orthogonale Projektion auf $\mathrm{Ran}(\overline{\chi}_\rho) \subseteq \mathfrak{H}$ und beobachten, dass

$$\overline{\chi}_\rho \;=\; \overline{P}_\rho \overline{\chi}_\rho \;=\; \overline{\chi}_\rho \overline{P}_\rho \;\leq\; \overline{P}_\rho \;\leq\; P_{\mathrm{at},\uparrow} \otimes \mathbb{1}_{\mathfrak{F}} \;+\; P_{\mathrm{at},\downarrow} \otimes \mathbb{1}[H_{\mathrm{ph}} \geq \tfrac{3}{4}\rho] . \tag{VII.51}$$

Lemma VII.3. *Für* $\lambda \in (-\frac{1}{4}\rho, \frac{1}{4}\rho)$ *ist*

$$\overline{P}_\rho \, (H_0 - \lambda) \, \overline{P}_\rho \;\geq\; \tfrac{2}{7}(H_{\mathrm{ph}} + \rho) \, \overline{P}_\rho \,, \tag{VII.52}$$

und $H_0 - \lambda$ *ist beschränkt invertibel auf* $\mathrm{Ran}(\overline{\chi}_\rho)$ *mit*

$$\frac{\overline{P}_\rho}{H_0 - \lambda} \;\leq\; \frac{2}{\rho} \, \overline{P}_\rho \, . \tag{VII.53}$$

Beweis. Offensichtlich kommutieren χ_ρ, $\overline{\chi}_\rho$, $\overline{P}_\rho$ und H_0 paarweise, und es ist

$$\begin{aligned} \overline{P}_\rho \, (H_0 - \lambda) \, \overline{P}_\rho \;&= P_{\mathrm{at},\uparrow} \otimes (1 - \lambda + H_{\mathrm{ph}}) \;+\; P_{\mathrm{at},\downarrow} \otimes (H_{\mathrm{ph}} - \lambda) \, \overline{P} \\ &\geq P_{\mathrm{at},\uparrow} \otimes (H_{\mathrm{ph}} + \tfrac{1}{2}) \;+\; P_{\mathrm{at},\downarrow} \otimes \big(\tfrac{2}{7} H_{\mathrm{ph}} + \tfrac{15}{28}\rho - \lambda\big) \, \overline{P} \\ &\geq \tfrac{2}{7}(H_{\mathrm{ph}} + \rho) \, \overline{P}_\rho \, , \end{aligned} \tag{VII.54}$$

wobei wir $H_{\mathrm{ph}} \geq 0$ und $H_{\mathrm{ph}} \geq \frac{3}{4}\rho$ auf $\mathrm{Ran}(\overline{\chi})$ verwenden. Da $\frac{1}{2}\rho < \frac{3}{4}\rho - \lambda < 1 - \lambda$ gilt, impliziert (VII.54) auch die quadratische Formschranke (VII.52), die ihrerseits (VII.53) trivial nach sich zieht. □

Lemmata VII.2 und VII.3 sind auch die wesentliche Ingredienzien des Beweises, dass $(H_g - \lambda, H_0 - \lambda)$ ein FS-Paar und die Feshbach-Schur-Abbildung F_{χ_ρ} darauf anwendbar sind.

Lemma VII.4. *Für* $\lambda \in (-\frac{1}{4}\rho, \frac{1}{4}\rho)$ *und* $|g| \leq \rho^{1/2}(21\Lambda_1)^{-1}$ *ist* $H_0 + g\overline{\chi}_\rho W \overline{\chi}_\rho - \lambda$ *auf* $\mathrm{Ran}(\overline{\chi}_\rho)$ *beschränkt invertibel mit*

$$\Big\| \overline{\chi}_\rho \, (H_0 + g\overline{\chi}_\rho W \overline{\chi}_\rho - \lambda)^{-1} \, \overline{\chi}_\rho \Big\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; \frac{3}{\rho} \, . \tag{VII.55}$$

Beweis. Wir entwickeln die Resolvente in (VII.55) zunächst in eine formale Neumannreihe,

$$\begin{aligned} \overline{\chi}_\rho \, (H_0 + g\overline{\chi}_\rho W \overline{\chi}_\rho - \lambda)^{-1} \, \overline{\chi}_\rho \;&=\; \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{\overline{\chi}_\rho^2}{H_0 - \lambda} \bigg\{ (-gW) \Big(\frac{\overline{\chi}_\rho^2}{H_0 - \lambda} \Big) \bigg\}^\ell \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \Big(\frac{\overline{\chi}_\rho}{(H_0 - \lambda)^{1/2}} \Big) \bigg\{ \Big(\frac{\overline{\chi}_\rho}{(H_0 - \lambda)^{1/2}} \Big) (-gW) \Big(\frac{\overline{\chi}_\rho}{(H_0 - \lambda)^{1/2}} \Big) \bigg\}^\ell \Big(\frac{\overline{\chi}_\rho}{(H_0 - \lambda)^{1/2}} \Big) , \end{aligned} \tag{VII.56}$$

deren Normkonvergenz sich aus Lemma VII.2 und (VII.53) ergibt,

$$\bigg\| \Big(\frac{\overline{\chi}_\rho}{(H_0 - \lambda)^{1/2}} \Big) (-gW) \Big(\frac{\overline{\chi}_\rho}{(H_0 - \lambda)^{1/2}} \Big) \bigg\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; \frac{7g}{2} \, \| R_\rho^{1/2} \, W \, R_\rho^{1/2} \|_{\mathrm{op}} \;\leq\; \frac{7g \, \Lambda_1}{\rho^{1/2}} \;\leq\; \frac{1}{3} \, . \tag{VII.57}$$

Die behauptete Normschranke erhalten wir dann unter Berücksichtigung von (VII.52),

$$\Big\| \overline{\chi}_\rho \, (H_0 + g\overline{\chi}_\rho W \overline{\chi}_\rho - \lambda)^{-1} \, \overline{\chi}_\rho \Big\|_{\mathrm{op}} \;\leq\; \Big(\frac{2}{\rho} \Big)^{1/2} \Big(\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{3} \Big) \Big(\frac{2}{\rho} \Big)^{1/2} \;=\; \frac{3}{\rho} \, . \tag{VII.58}$$

□

Lemma VII.5. *Seien* $\rho \in (0, \frac{1}{32})$, $\lambda \in (-\frac{1}{4}\rho, \frac{1}{4}\rho)$ *und* $|g| \leq \rho^{1/2}(21\Lambda_1)^{-1}$, *wobei* Λ_1 *in* (VII.8) *definiert ist. Dann ist* $(H_g - \lambda, H_0 - \lambda)$ *ein Feshbach-Schur-Paar und sein Bild unter der Feshbach-Schur-Abbildung* F_{χ_ρ} *ist der durch*

$$P_{\mathrm{at},\downarrow} \otimes \big(\widetilde{H}^{(0)}(\lambda) - \lambda\big) \;=:\; F_{\chi_\rho}(H_g - \lambda, H_0 - \lambda) \tag{VII.59}$$

gegebene beschränkte Operator $\widetilde{H}^{(0)}(\lambda)$ *auf* $\mathrm{Ran}\mathbb{1}[H_{\mathrm{ph}} < 1] \subseteq \mathfrak{F}$ *mit*

$$\begin{aligned}
&\widetilde{H}^{(0)}(\lambda) \\
&:= H_{\mathrm{ph}} \;-\; \sum_{\ell=0}^{\infty} g^{2(\ell+1)}\, \chi_\rho\, \phi(G)\, \big[\bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, \phi(G)\, \bar{R}_\downarrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, \phi(G)\big]^\ell \bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, \phi(G)\, \chi_\rho \\
&= H_{\mathrm{ph}} \;-\; g^2\, \chi_\rho\, \phi(G)\, \bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, \phi(G)\, \chi_\rho \qquad\qquad \text{(VII.60)} \\
&\quad -\; g^4\, \chi_\rho\, \phi(G)\, \bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, \phi(G)\, \bar{R}_\downarrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, \phi(G)\, \bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, \phi(G)\, \chi_\rho \\
&\quad -\; g^6\, \chi_\rho\, \phi(G)\, \bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, \phi(G)\, \bar{R}_\downarrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, \phi(G)\, \bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda) \\
&\qquad\qquad \cdot \phi(G)\, \bar{R}_\downarrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, \phi(G)\, \bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, \phi(G)\, \chi_\rho \\
&\quad +\; \ldots\,,
\end{aligned}$$

wobei $\phi(G) := a^*(G) + a(G)$ *und* $\bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda), \bar{R}_\downarrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda) \in \mathcal{B}[\mathfrak{H}_{\mathrm{red}}]$ *die Resolventen*

$$\bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda) \;:=\; \frac{1}{1 + H_{\mathrm{ph}} - \lambda} \quad \textit{und} \quad \bar{R}_\downarrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda) \;:=\; \frac{\overline{\chi}_\rho^2}{H_{\mathrm{ph}} - \lambda} \tag{VII.61}$$

notieren.

Beweis. Nach Lemma VII.4 ist $(H_g - \lambda, H_0 - \lambda)$ ein Feshbach-Schur-Paar und die Anwendung der Feshbach-Schur-Abbildung F_{χ_ρ} ergibt

$$\begin{aligned}
F_{\chi_\rho}(H_g - \lambda, H_0 - \lambda) &= P_{\mathrm{at},\downarrow}\big(H_{\mathrm{ph}} \;+\; g\chi_\rho W \chi_\rho\big) \;-\; g^2\, \chi_\rho W \overline{\chi}_\rho (H_0 + g\overline{\chi}_\rho W \overline{\chi}_\rho - \lambda)^{-1} \overline{\chi}_\rho W \chi_\rho \\
&= P_{\mathrm{at},\downarrow} \otimes H_{\mathrm{ph}} \;-\; \sum_{k=1}^{\infty} (-g)^k\, \chi_\rho W \left(\frac{\overline{\chi}_\rho^2}{H_0 - \lambda}\, W \right)^{k-1} \chi_\rho\,. \qquad \text{(VII.62)}
\end{aligned}$$

Es sind aber $\sigma^{(1)} P_{\mathrm{at},\downarrow} = P_{\mathrm{at},\uparrow}$ und $\sigma^{(1)} P_{\mathrm{at},\uparrow} = P_{\mathrm{at},\downarrow}$ und deshalb $W = P_{\mathrm{at},\downarrow} W P_{\mathrm{at},\uparrow} + P_{\mathrm{at},\uparrow} W P_{\mathrm{at},\downarrow}$. Deshalb tragen nur gerade $k \in 2\mathbb{N}$ zur Summe in (VII.62) bei, d.h.

$$\begin{aligned}
&F_{\chi_\rho}(H_g - \lambda, H_0 - \lambda) \;=\; P_{\mathrm{at},\downarrow} \otimes H_{\mathrm{ph}} \;- \qquad\qquad \text{(VII.63)} \\
&\quad \sum_{\ell=0}^{\infty} g^{2(\ell+1)}\, \chi_\rho W P_{\mathrm{at},\uparrow} \left(\frac{\overline{\chi}_\rho^2}{H_0 - \lambda}\, P_{\mathrm{at},\uparrow} W P_{\mathrm{at},\downarrow}\, \frac{\overline{\chi}_\rho^2}{H_0 - \lambda}\, P_{\mathrm{at},\downarrow} W P_{\mathrm{at},\uparrow} \right)^\ell \frac{\overline{\chi}_\rho^2}{H_0 - \lambda}\, P_{\mathrm{at},\uparrow} W \chi_\rho\,,
\end{aligned}$$

woraus sich sofort die Behauptung ergibt. □

VII.4. Normalform des effektiven Hamiltonians

Wir wollen als Nächstes den Operator $\widetilde{H}^{(0)}$ (modulo Funktionen von H_{ph}) normalordnen und seinen Vakuumerwartungwert als Korrektur der Grundzustandsenergie extrahieren. Dazu machen wir eine Vorbetrachtung. Wir verwenden die Notation $a^+(f) := a^*(f)$ und $a_k^+ := a_k^*$ für Erzeugungs- und $a^-(f) := a(f)$ und $a_k^- := a_k$ für Vernichtungsoperatoren und bemerken, dass der erste Beitrag der Wechselwirkung in (VII.60) gegeben ist durch

$$\chi_\rho\, \phi(G)\, \bar{R}_\uparrow(\lambda)\, \phi(G)\, \chi_\rho \;=\; \sum_{\sigma,\tau=\pm} g^2\, \chi(H_{\mathrm{ph}}/\rho)\, V^{(2)}_{\sigma,\tau}\, \chi(H_{\mathrm{ph}}/\rho)\,, \quad \text{mit} \tag{VII.64}$$

$$V^{(2)}_{\sigma,\tau} \;:=\; a^\sigma(G)\,(1 + H_{\mathrm{ph}} - \lambda)^{-1} a^\tau(G)\,. \tag{VII.65}$$

Wir berechnen die Terme $V^{(2)}_{\sigma,\tau}$ mit Hilfe der Pull-Through-Formel (siehe Übungsaufgabe) und der CCR. Wir erhalten

$$V^{(2)}_{+,-} \;=\; \int a^+_{k_1}\, \frac{G(k_1)\,\overline{G(k_2)}}{1 - \lambda + H_{\mathrm{ph}}}\, a^-_{k_2}\, d^3k_1\, d^3k_2\,, \tag{VII.66}$$

$$V^{(2)}_{+,+} \;=\; \int a^+_{k_1}\, \frac{G(k_1)\,G(k_2)}{1 - \lambda + H_{\mathrm{ph}}}\, a^+_{k_2}\, d^3k_1\, d^3k_2 \;=\; \int a^+_{k_1}\, a^+_{k_2}\, \frac{G(k_1)\,G(k_2)}{1 - \lambda + H_{\mathrm{ph}} + \omega(k_2)}\, d^3k_1\, d^3k_2\,,$$

$$V^{(2)}_{-,-} \;=\; \int \frac{\overline{G(k_1)\,G(k_2)}}{1 - \lambda + H_{\mathrm{ph}} + \omega(k_1)}\, a^-_{k_1}\, a^-_{k_2}\; d^3k_1\, d^3k_2\,, \tag{VII.67}$$

$$\begin{aligned} V^{(2)}_{-,+} \;&=\; \int a^-_{k_1}\, \frac{\overline{G(k_1)}\,G(k_2)}{1 - \lambda + H_{\mathrm{ph}}}\, a^+_{k_2}\, d^3k_1\, d^3k_2 \;=\; \int a^-_{k_1}\, a^+_{k_2}\, \frac{\overline{G(k_1)}\,G(k_2)}{1 - \lambda + H_{\mathrm{ph}} + \omega(k_2)}\, d^3k_1\, d^3k_2 \\ &=\; \int \big[a^+_{k_2}\, a^-_{k_1} \;+\; \delta(k_1 - k_2)\big]\, \frac{\overline{G(k_1)}\,G(k_2)}{1 - \lambda + H_{\mathrm{ph}} + \omega(k_2)}\, d^3k_1\, d^3k_2 \\ &=\; \int a^+_{k_2}\, \frac{\overline{G(k_1)}\,G(k_2)}{1 - \lambda + H_{\mathrm{ph}} + \omega(k_1) + \omega(k_2)}\, a^-_{k_1}\, d^3k_1\, d^3k_2 \;+\; \int \frac{|G(k)|^2\, d^3k}{1 - \lambda + H_{\mathrm{ph}} + \omega(k)}\,. \end{aligned} \tag{VII.68}$$

Wir können also (VII.65) schreiben als

$$g^2\, \chi_\rho\, \phi(G)\, \bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, \phi(G)\, \chi_\rho \;=\; \chi_\rho\, \big(W^{(2)}_{0,0}[\lambda, H_{\mathrm{ph}}] \;+\; W^{(2)}_{1,1}[\lambda] \;+\; W^{(2)}_{2,0}[\lambda] \;+\; W^{(2)}_{0,2}[\lambda]\big)\, \chi_\rho\,, \tag{VII.69}$$

wobei $W^{(2)}_{0,0}[\lambda, H_{\mathrm{ph}}]$ mit dem Funktionalkalkül für den selbstadjungierten Operator angewandt auf die Funktion

$$W^{(2)}_{0,0}[\lambda, r] \;=\; \int \frac{g^2\, |G(k)|^2\, d^3k}{1 - \lambda + r + \omega(k)} \tag{VII.70}$$

definiert ist. Weiterhin sind

$$W^{(2)}_{m,n}[\lambda] \;=\; \int a^*(k^{(m)})\, w_{m,n}[\lambda, H_{\mathrm{ph}}, K^{(m,n)}]\, a(\tilde{k}^{(n)})\, dK^{(m,n)}\,, \tag{VII.71}$$

wobei wir die Notationen

$$k^{(m)} := (k_1, \dots, k_m)\,, \quad dk^{(m)} := d^3k_1 \cdots d^3k_m\,, \tag{VII.72}$$

$$\tilde{k}^{(n)} := (\tilde{k}_1, \dots, \tilde{k}_n)\,, \quad d\tilde{k}^{(n)} := d^3\tilde{k}_1 \cdots d^3\tilde{k}_n\,, \tag{VII.73}$$

$$K^{(m,n)} := \big(k^{(m)}, \tilde{k}^{(n)}\big)\,, \quad dK^{(m,n)} := dk^{(m)}\, d\tilde{k}^{(n)}\,, \tag{VII.74}$$

$$a^*(k^{(m)}) := a^*_{k_1} \cdots a^*_{k_m}\,, \quad a(\tilde{k}^{(n)}) := a_{\tilde{k}_1} \cdots a_{\tilde{k}_n} \tag{VII.75}$$

verwenden. Die Integralkerne sind Operatoren, die abermals durch den Funktionalkalkül für H_{ph} punktweise für fast alle $K^{(m,n)}$ durch die Funktionen $w_{m,n}[\lambda, r, K^{(m,n)}]$ definiert sind, wobei

$$w_{2,0}[\lambda, r, k^{(2)}] := \frac{g^2\, G(k_1)\, G(k_2)}{1 - \lambda + r + \omega(k_2)}\,, \qquad w_{0,2}[\lambda, r, \tilde{k}^{(2)}] := \frac{g^2\, \overline{G(\tilde{k}_1)\, G(\tilde{k}_2)}}{1 - \lambda + r + \omega(\tilde{k}_1)}\,, \tag{VII.76}$$

$$w_{1,1}[\lambda, r, k, \tilde{k}] := \frac{g^2\, G(k)\, \overline{G(\tilde{k})}}{1 - \lambda + r + \omega(k) + \omega(\tilde{k})} + \frac{g^2\, G(k)\, \overline{G(\tilde{k})}}{1 - \lambda + r}\,. \tag{VII.77}$$

Wir wollen dies nun verallgemeinern und $\widetilde{H}^{(0)}(\lambda)$ in der Form

$$\widetilde{H}^{(0)}[\lambda] = \widetilde{W}^{(0)}_{0,0}[\lambda, H_{\mathrm{ph}}] + \sum_{M+N \geq 1} \chi_\rho\, \widetilde{W}^{(0)}_{M,N}[\lambda]\, \chi_\rho \tag{VII.78}$$

darstellen, wobei $\widetilde{W}^{(0)}_{0,0}[\lambda, H_{\mathrm{ph}}]$ ein durch das Funktionalkalkül für H_{ph} aus einer Funktion $\widetilde{W}^{(0)}_{0,0}[\lambda, r]$ gewonnener Operator und $\widetilde{W}^{(0)}_{M,N}[\lambda]$ Wechselwirkungsoperatoren sind, die für $M, N \in \mathbb{N}_0$ mit $M + N \geq 1$ vor der Gestalt

$$\widetilde{W}^{(0)}_{M,N}[\lambda] = \int a^*(k^{(M)})\, \widetilde{w}^{(0)}_{M,N}[\lambda, H_{\mathrm{ph}}, K^{(M,N)}]\, a(\tilde{k}^{(N)})\, dK^{(M,N)}\,, \tag{VII.79}$$

sind. Dafür müssen wir die Rechnungen in (VII.66)-(VII.68) zur die Behandlung beliebiger Produkte verallgemeinern. Dies geschieht in den folgenden Aussagen, wobei wir mit $\langle X \rangle_\Omega := \langle \Omega | X \Omega \rangle$ Vakuumserwartungswerte abkürzen, wieder die Notation a^+ für Erzeugungs- und a^- für Vernichtungsoperatoren verwenden und vereinbaren, dass für eine endliche Menge $A \subseteq \mathbb{Z}$ ganzer Zahlen das Produkt

$$\prod_{i \in A} m(i) := m(i_1)\, m(i_2) \cdots m(i_L) \tag{VII.80}$$

in aufsteigender Indexreihenfolge zu verstehen ist, d.h. dass $|A| = L$, $A = \{i_1, i_2, \dots, i_L\}$ und $i_1 < i_2 < \dots < i_L$ gelten.

Lemma VII.6. *Seien $A \subseteq \mathbb{Z}$ eine endliche Menge ganzer Zahlen, $k : A \to \mathbb{R}^3$ und $\sigma : A \to \{-, +\}$. Zu $B \subseteq A$ definieren wir die Mengen $B_\pm := \{i \in B | \sigma(i) = \pm\}$ und das* ***Wick-geordnete Produkt***

$$:\!\Big(\prod_{i \in B} a^{\sigma(i)}_{k_i}\Big)\!: := \Big(\prod_{i \in B_+} a^+_{k_i}\Big)\Big(\prod_{j \in B_-} a^-_{k_j}\Big)\,. \tag{VII.81}$$

Dann ist

$$\prod_{i \in A} a_{k_i}^{\sigma(i)} = \sum_{B \subseteq A} \Big\langle \prod_{i \in A \setminus B} a_{k_i}^{\sigma(i)} \Big\rangle_\Omega \, {:}\Big(\prod_{i \in B} a_{k_i}^{\sigma(i)} \Big){:}$$
$$= \sum_{B \subseteq A} \prod_{i \in B_+} a_{k_i}^{+} \Big\langle \prod_{i \in A \setminus B} a_{k_i}^{\sigma(i)} \Big\rangle_\Omega \prod_{j \in B_-} a_{k_j}^{\sigma(j)} \,. \tag{VII.82}$$

Beweis. Siehe Übungsaufgabe. □

Es ist instruktiv, die Aussage des Lemmas VII.6 an Beispielen zu illustrieren. Für die Terme in (VII.66)-(VII.68) ist $A = \{1, 2\}$ und für $V_{\sigma,\tau}^{(2)}$ sind $\sigma(1) = \sigma$ und $\sigma(2) = \tau$. Nach Lemma VII.6 sind dann

$$a_{k_1}^{+} a_{k_2}^{+} = \langle 1 \rangle_\Omega \, {:}a_{k_1}^{+} a_{k_2}^{+}{:} + \langle a_{k_1}^{+} \rangle_\Omega \, {:}a_{k_2}^{+}{:} + \langle a_{k_2}^{+} \rangle_\Omega \, {:}a_{k_1}^{+}{:} + \langle a_{k_1}^{+} a_{k_2}^{+} \rangle_\Omega$$
$$= {:}a_{k_1}^{+} a_{k_2}^{+}{:} \tag{VII.83}$$

und genauso $a_{k_1}^{-} a_{k_2}^{-} = {:}a_{k_1}^{-} a_{k_2}^{-}{:}$ und $a_{k_1}^{+} a_{k_2}^{-} = {:}a_{k_1}^{+} a_{k_2}^{-}{:}$, aber

$$a_{k_1}^{-} a_{k_2}^{+} = \langle 1 \rangle_\Omega \, {:}a_{k_1}^{-} a_{k_2}^{+}{:} + \langle a_{k_1}^{-} \rangle_\Omega \, {:}a_{k_2}^{+}{:} + \langle a_{k_2}^{+} \rangle_\Omega \, {:}a_{k_1}^{-}{:} + \langle a_{k_1}^{-} a_{k_2}^{+} \rangle_\Omega$$
$$= a_{k_2}^{+} a_{k_1}^{-} + \langle a_{k_1}^{-} a_{k_2}^{+} \rangle_\Omega = a_{k_2}^{+} a_{k_1}^{-} + \delta(k_1 - k_2) \,. \tag{VII.84}$$

Aus Lemma VII.6 gewinnen wir folgende Aussage für die Normalordnung von Produkten modulo H_{ph}.

Lemma VII.7. *Seien $A \subseteq \mathbb{Z}$ eine endliche Menge ganzer Zahlen, $k : A \to \mathbb{R}^3$, $\sigma : A \to \{-, +\}$ und $\{f_i\}_{i \in A}$ eine Familie beschränkter und messbarer Funktionen $f_j : \mathbb{R}_0^+ \to \mathbb{C}$. Dann ist*

$$\prod_{i \in A} \big\{ a_{k_i}^{\sigma(i)} \, f_i[H_{\mathrm{ph}}] \big\} = \tag{VII.85}$$
$$\sum_{B \subseteq A} \Big(\prod_{i \in B_+} a_{k_i}^{+} \Big) \Big\langle \prod_{j \in A} \Big\{ \big(a_{k_j}^{\sigma(j)} \big)^{\mathbb{1}[j \notin B]} f_j\big[H_{\mathrm{ph}} + r + \Sigma_{B_+, B_-}^{(j)}(k) \big] \Big\} \Big\rangle_\Omega \Big|_{r = H_{\mathrm{ph}}} \Big(\prod_{j \in B_-} a_{k_j}^{\sigma(j)} \Big) \,.$$

wobei $B_\pm := \big\{ i \in B \big| \, \sigma(i) = \pm \big\}$ und

$$\Sigma_{B_+, B_-}^{(j)}(k) := \sum_{i \in B_+, \, i > j} \omega(k_i) + \sum_{i \in B_-, \, i \le j} \omega(k_i) \,. \tag{VII.86}$$

Beweis. Zum Beweis benutzen wir die Pull-Through-Formel vorwärts und rückwärts. Dies ist zulässig, wenn wir f_i durch Null auf $\mathbb{R}^-$ fortsetzen. Damit und mit Lemma VII.7 erhalten wir

$$\begin{aligned}
\prod_{i\in A}\{a_{k_i}^{\sigma(i)}\,f_i[H_{\rm ph}]\} \;&=\; \Big(\prod_{i\in A} a_{k_i}^{\sigma(i)}\Big)\Big(\prod_{j\in A} f_j\Big[H_{\rm ph}+\sum_{i\in A,\,i>j}\sigma(i)\omega(k_i)\Big]\Big) \qquad\text{(VII.87)}\\
&= \sum_{B\subseteq A}\Big(\prod_{i\in B_+} a_{k_i}^{+}\Big)\Big\langle \prod_{i\in A\setminus B} a_{k_i}^{\sigma(i)}\Big\rangle_\Omega \Big(\prod_{i\in B_-} a_{k_\ell}^{-}\Big)\Big(\prod_{j\in A} f_j\Big[H_{\rm ph}+\sum_{i\in A,\,i>j}\sigma(i)\omega(k_i)\Big]\Big)\\
&= \sum_{B\subseteq A}\Big(\prod_{i\in B_+} a_{k_i}^{+}\Big)\Big\langle \prod_{i\in A\setminus B} a_{k_i}^{\sigma(i)}\Big\rangle_\Omega\\
&\qquad \Big(\prod_{j\in A} f_j\Big[H_{\rm ph}+\sum_{i\in A,\,i>j}\sigma(i)\omega(k_i)+\sum_{i\in B_-}\omega(k_i)\Big]\Big)\Big(\prod_{i\in B_-} a_{k_i}^{-}\Big)\,.
\end{aligned}$$

Nun beobachten wir, dass $\langle\Phi|f_j[H_{\rm ph}+r]\Omega\rangle = \langle\Phi|\Omega\rangle f_j[r]$ und somit $\langle\Phi|\Omega\rangle f_j[H_{\rm ph}] = \langle\Phi|f_j[H_{\rm ph}+r]\Omega\rangle|_{r=H_{\rm ph}}$, um die f_j in den Vakuumerwartungwert zu verschieben,

$$\begin{aligned}
&\Big\langle \prod_{i\in A\setminus B} a_{k_i}^{\sigma(i)}\Big\rangle_\Omega \Big(\prod_{j\in A} f_j\Big[H_{\rm ph}+\sum_{i\in A,\,i>j}\sigma(i)\omega(k_i)+\sum_{i\in B_-}\omega(k_i)\Big]\Big) \qquad\text{(VII.88)}\\
&= \Big\langle \prod_{i\in A\setminus B} a_{k_i}^{\sigma(i)} \prod_{j\in A} f_j\Big[H_{\rm ph}+r+\sum_{i\in A,\,i>j}\sigma(i)\omega(k_i)+\sum_{i\in B_-}\omega(k_i)\Big]\Big\rangle_\Omega\Big|_{r=H_{\rm ph}}\\
&= \Big\langle \prod_{i\in A} \big(a_{k_i}^{\sigma(i)}\big)^{\mathbb{1}[i\notin B]} \prod_{j\in A} f_j\Big[H_{\rm ph}+r+\sum_{i\in A,\,i>j}\sigma(i)\omega(k_i)+\sum_{i\in B_-}\omega(k_i)\Big]\Big\rangle_\Omega\Big|_{r=H_{\rm ph}}\\
&= \Big\langle \prod_{j\in A}\Big\{ \big(a_{k_j}^{\sigma(j)}\big)^{\mathbb{1}[j\notin B]} f_j\Big[H_{\rm ph}+r+\\
&\qquad\qquad \sum_{i\in A,\,i>j}\sigma(i)\omega(k_i)+\sum_{i\in B_-}\omega(k_i)-\sum_{i\in A\setminus B,\,i>j}\sigma(i)\omega(k_i)\Big]\Big\}\Big\rangle_\Omega\Big|_{r=H_{\rm ph}}\,.
\end{aligned}$$

Schließlich ist

$$\begin{aligned}
&\sum_{i\in A,\,i>j}\sigma(i)\omega(k_i)+\sum_{i\in B_-}\omega(k_i)-\sum_{i\in A\setminus B,\,i>j}\sigma(i)\omega(k_i) \qquad\text{(VII.89)}\\
&= \sum_{i\in B_-}\omega(k_i)+\sum_{i\in B,\,i>j}\sigma(i)\omega(k_i) \;=\; \sum_{i\in B_-}\omega(k_i)+\sum_{i\in B_+,\,i>j}\omega(k_i)-\sum_{i\in B_-,\,i>j}\omega(k_i)\\
&= \sum_{i\in B_-,i\le j}\omega(k_i)+\sum_{i\in B_+,\,i>j}\omega(k_i)\,,
\end{aligned}$$

was den Beweis vervollständigt. □

Wir wenden nun die Lemmata VII.6 und VII.7 auf das durch (VII.60) gegebene Bild von

$(H_g - \lambda, H_0 - \lambda)$ unter der Feshbach-Schur-Abbildung F_{χ_ρ}, d.h.

$$\widetilde{H}^{(0)}(\lambda) \tag{VII.90}$$

$$= H_{\mathrm{ph}} - \sum_{L=1}^{\infty} g^{2L} \chi_\rho \, \phi(G) \left[\bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda) \, \phi(G) \, \bar{R}_\downarrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda) \, \phi(G) \right]^{L-1} \bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda) \, \phi(G) \, \chi_\rho$$

an. Dazu führen wir noch etwas weitere Notation ein.
Sind $K \in \mathbb{N}$, $B \subseteq \mathbb{Z}_1^K$ und $\sigma : \mathbb{Z}_1^K \to \pm$, so verwenden wir wie vorher

$$B_\pm := B \cap \sigma^{-1}(\pm) \quad \text{und zusätzlich} \quad C_\pm := \big(\mathbb{Z}_1^K \setminus B\big) \cap \sigma^{-1}(\pm) \,, \tag{VII.91}$$

sodass $\mathbb{Z}_1^K$ als disjunkte Vereinigung $\mathbb{Z}_1^K = B_+ \dot\cup B_- \dot\cup C_+ \dot\cup C_-$ geschrieben werden kann. Zu $M, N \in \mathbb{N}_0$ definieren wir noch die Familie

$$\mathfrak{B}_{M,N} := \Big\{ (B_+, B_-) \in \mathfrak{P}(\mathbb{N}) \times \mathfrak{P}(\mathbb{N}) \;\Big|\; B_+ \cap B_- = \emptyset \,,\; |B_+| = M \,,\; |B_-| = N \Big\} \tag{VII.92}$$

der Paare disjunkter Teilmengen der natürlichen Zahlen mit M bzw. N Elementen. Damit erhalten die folgende normalgeordnete Form des effektiven Operators.

Lemma VII.8. *Seien $\rho \in (0, \frac{1}{32})$, $\lambda \in (-\frac{1}{4}\rho, \frac{1}{4}\rho)$ und $|g| \leq \rho^{1/2}(21\Lambda_1)^{-1}$, wobei Λ_1 in* (VII.8) *definiert ist. Dann ist der in* (VII.90) *bzw.* (VII.60) *definierte Operator $\widetilde{H}^{(0)}(\lambda)$ von der Form*

$$\widetilde{H}^{(0)}[\lambda] = \widetilde{W}_{0,0}^{(0)}[\lambda, H_{\mathrm{ph}}] + \sum_{M+N \geq 1} \widetilde{W}_{M,N}^{(0)}[\lambda] \,, \tag{VII.93}$$

wobei für $M, N \in \mathbb{N}_0$ und $M + N \geq 1$

$$\widetilde{W}_{M,N}^{(0)}[\lambda] = \int a^*(k^{(M)}) \, \widetilde{w}_{M,N}^{(0)}[\lambda, H_{\mathrm{ph}}, K^{(M,N)}] \, a(\tilde{k}^{(N)}) \, dK^{(M,N)} \,, \tag{VII.94}$$

mit

$$\widetilde{w}_{M,N}^{(0)}[\lambda, r, k^{(M)}, \tilde{k}^{(N)}] = \frac{1}{M! \, N!} \sum_{\pi \in \mathcal{S}_M} \sum_{\eta \in \mathcal{S}_N} \hat{w}_{M,N}^{(0)}[\lambda, r, k_{\pi(1)}, \ldots, k_{\pi(M)} \,, \tilde{k}_{\eta(1)}, \ldots, \tilde{k}_{\eta(N)}] \,, \tag{VII.95}$$

und

$$\hat{w}_{M,N}^{(0)}[\lambda, r, k^{(M)}, \tilde{k}^{(N)}] = G(k_1) \cdots G(k_M) \, \overline{G(\tilde{k}_1)} \cdots \overline{G(\tilde{k}_N)} \sum_{(B_+, B_-) \in \mathfrak{B}_{M,N}} \Bigg[\tag{VII.96}$$

$$\sum_{K \in 2\mathbb{N}, K \geq \max(B_+ \cup B_-)} g^K \left\langle \prod_{j=1}^{K} \Big\{ \big(\phi(G)\big)^{\mathbb{1}[j \notin B_+ \cup B_-]} \, \bar{R}_j \big[H_{\mathrm{ph}} + r + \Sigma_{B_+, B_-}^{(j)}(K^{(M,N)}) - \lambda \big] \Big\} \right\rangle_\Omega \Bigg] \,,$$

wobei

$$B_+ := \big\{ i \in B \big| \, \sigma(i) = + \big\} =: \{ i_1^+, \ldots, i_M^+ \} \,, \quad \textit{mit} \;\; i_1^+ < \cdots < i_M^+ \,, \tag{VII.97}$$

$$B_- := \big\{ i \in B \big| \, \sigma(i) = - \big\} =: \{ i_1^-, \ldots, i_N^- \} \,, \quad \textit{mit} \;\; i_1^- < \cdots < i_N^- \,, \tag{VII.98}$$

und

$$\Sigma^{(j)}_{B_+,B_-}(K^{(M,N)}) \;:=\; \sum_{m=1,\, i_m^- > j}^{M} \omega(k_m) \;+\; \sum_{n=1,\, i_n^+ \leq j}^{N} \omega(\tilde{k}_n)\,. \tag{VII.99}$$

Außerdem ist

$$\widetilde{W}^{(0)}_{0,0}[\lambda, r] \;=\; r \;+\; \sum_{K \in 2\mathbb{N}} g^K \Big\langle \prod_{j=1}^{K} \Big\{ \phi(G)\; \bar{R}_j\big[H_{\mathrm{ph}} + r - \lambda\big] \Big\} \Big\rangle_\Omega . \tag{VII.100}$$

Beweis. Die folgenden Reihenentwicklungen sind zunächst formal. Ihre Konvergenz in $\mathcal{B}[\mathrm{Ran}(\chi_\rho)]$ beweisen wir später. Wir notieren

$$\bar{R}_j(H_{\mathrm{ph}} - \lambda) \;:=\; \begin{cases} \bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda) & \text{falls } j \in 2\mathbb{Z}+1,, \\ \bar{R}_\downarrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda) & \text{falls } j \in 2\mathbb{Z}, \end{cases} \tag{VII.101}$$

und beobachten, dass wegen $\phi(G) = a^+(G) + a^-(G)$ für $L \in \mathbb{N}$

$$\begin{aligned}
&\chi_\rho\, \phi(G)\, \big[\bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, \phi(G)\, \bar{R}_\downarrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, \phi(G)\,\big]^{L-1} \bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, \phi(G)\, \chi_\rho \\
&= \sum_{\sigma : \mathbb{Z}_1^{2L} \to \pm} \chi_\rho\, a^{\sigma(1)}(G)\, \bar{R}_1(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, a^{\sigma(2)}(G)\, \bar{R}_2(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, a^{\sigma(3)}(G) \\
&\qquad\qquad \cdots\; a^{\sigma(2L-1)}(G)\, \bar{R}_{2L-1}(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, a^{\sigma(2L)}(G)\, \chi_\rho \\
&= \sum_{\sigma : \mathbb{Z}_1^{2L} \to \pm} \int d^3k_1 \cdots d^3k_{2L}\; G^{\sigma(1)}(k_1) \cdots G^{\sigma(2L)}(k_{2L}) \\
&\qquad\qquad \chi_\rho\, a^{\sigma(1)}_{k_1}\, \bar{R}_1(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, a^{\sigma(2)}_{k_2}\, \bar{R}_2(H_{\mathrm{ph}} - \lambda) \cdots\; a^{\sigma(2L-1)}_{k_{2L-1}}\, \bar{R}_{2L}(H_{\mathrm{ph}} - \lambda)\, a^{\sigma(2L)}_{k_{2L}}\, \chi_\rho
\end{aligned} \tag{VII.102}$$

gilt, wobei $G^+(k) := G(k)$ und $G^-(k) := \overline{G(k)}$. Gemäß Lemma VII.7 ist

$$\begin{aligned}
&\prod_{\ell=1}^{2L} \big\{ a^{\sigma(\ell)}_{k_\ell}\, \bar{R}_\ell(H_{\mathrm{ph}} - \lambda) \big\} \;= \\
&\sum_{B \subseteq \mathbb{Z}_1^{2L}} \Big(\prod_{i \in B_+} a^+_{k_i} \Big) \Big\langle \prod_{j=1}^{2L} \Big\{ \big(a^{\sigma(j)}_{k_j}\big)^{\mathbb{1}[j \notin B]}\, \bar{R}_j\big[H_{\mathrm{ph}} + r + \Sigma^{(j)}_{B_+,B_-}(k) - \lambda\big] \Big\} \Big\rangle_\Omega \Big|_{r = H_{\mathrm{ph}}} \Big(\prod_{j \in B_-} a^{\sigma(j)}_{k_j} \Big),
\end{aligned} \tag{VII.103}$$

mit $B_\pm := B \cap \sigma^{-1}(\pm)$ und $\Sigma^{(j)}_{B_+,B_-}(k) = \sum_{i \in B_-,\, i \leq j} \omega(k_i) + \sum_{i \in B_+,\, i > j} \omega(k_i)$. Setzen wir dies in

(VII.102) ein und das Resultat anschließend in (VII.90), so erhalten wir

$$
\begin{aligned}
&-\widetilde{H}^{(0)}(\lambda) \;+\; H_{\mathrm{ph}} \\
&\quad= \sum_{L=1}^{\infty} g^{2L}\, \chi_\rho\, \phi(G) \left[\bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}}-\lambda)\, \phi(G)\, \bar{R}_\downarrow(H_{\mathrm{ph}}-\lambda)\, \phi(G)\right]^{L-1} \bar{R}_\uparrow(H_{\mathrm{ph}}-\lambda)\, \phi(G)\, \chi_\rho \\
&\quad= \sum_{L=1}^{\infty} g^{2L} \sum_{\sigma:\mathbb{Z}_1^{2L}\to\pm} \int d^3k_1 \cdots d^3k_{2L}\; G^{\sigma(1)}(k_1)\cdots G^{\sigma(2L)}(k_{2L}) \\
&\qquad\qquad \chi_\rho\, a_{k_1}^{\sigma(1)}\, \bar{R}_1(H_{\mathrm{ph}}-\lambda)\, a_{k_2}^{\sigma(2)}\, \bar{R}_2(H_{\mathrm{ph}}-\lambda)\cdots\, a_{k_{2L-1}}^{\sigma(2L-1)}\, \bar{R}_{2L}(H_{\mathrm{ph}}-\lambda)\, a_{k_{2L}}^{\sigma(2L)}\, \chi_\rho \\
&\quad= \sum_{L=1}^{\infty} g^{2L} \sum_{\sigma:\mathbb{Z}_1^{2L}\to\pm} \sum_{B\subseteq\mathbb{Z}_1^{2L}} \int d^3k_1 \cdots d^3k_{2L}\; G^{\sigma(1)}(k_1)\cdots G^{\sigma(2L)}(k_{2L})\; \chi_\rho \left(\prod_{i\in B_+} a_{k_i}^{+}\right) \\
&\qquad \left\langle \prod_{j=1}^{2L} \left\{ \left(a_{k_j}^{\sigma(j)}\right)^{\mathbb{1}[j\notin B]}\, \bar{R}_j\left[H_{\mathrm{ph}} + r + \Sigma^{(j)}_{B_+,B_-}(k) - \lambda\right] \right\} \right\rangle_\Omega \Bigg|_{r=H_{\mathrm{ph}}} \left(\prod_{j\in B_-} a_{k_j}^{\sigma(j)}\right) \chi_\rho\,.
\end{aligned}
\tag{VII.104}
$$

Um die Notation für die folgenden Überlegungen etwas zu vereinfachen, führen wir zu $K \in \mathbb{N}$ und $\sigma : \mathbb{Z}_1^K \to \pm$ sowie $B \subseteq \mathbb{Z}_1^K$ zusätzlich zu den Mengen $B_\pm := B \cap \sigma^{-1}(\pm)$ auch ihre Komplemente $C_\pm := (\mathbb{Z}_1^K \setminus B) \cap \sigma^{-1}(\pm)$ ein, sodass $\mathbb{Z}_1^K$ als disjunkte Vereinigung $\mathbb{Z}_1^K = B_+ \dot\cup B_- \dot\cup C_+ \dot\cup C_-$ geschrieben werden kann. Weiterhin führen wir die Operatoren

$$
\begin{aligned}
&Z_K(B_+, B_-, C_+, C_-) \;:= \\
&\int d^3k_1 \cdots d^3k_K\;\; \chi_\rho \left(\prod_{i\in B_+} G(k_i)\, a_{k_i}^{+}\right) \left\langle \prod_{j=1}^{K} \left\{ \left(G(k_j)\, a_{k_j}^{+}\right)^{\mathbb{1}[j\in C_+]} \left(\overline{G(k_i)}\, a_{k_j}^{-}\right)^{\mathbb{1}[j\in C_-]} \right.\right. \\
&\qquad\qquad \left.\left. \bar{R}_j\left[H_{\mathrm{ph}} + r + +\Sigma^{(j)}_{B_+,B_-}(k) - \lambda\right] \right\} \right\rangle_\Omega \Bigg|_{r=H_{\mathrm{ph}}} \left(\prod_{j\in B_-} \overline{G(k_i)}\, a_{k_j}^{\sigma(j)}\right) \chi_\rho
\end{aligned}
\tag{VII.105}
$$

ein und erinnern an die in (VII.92) definierten Familien $\mathfrak{B}_{M,N}$. Damit beobachten wir, dass

$$
\begin{aligned}
-\widetilde{H}^{(0)}(\lambda) \;+\; H_{\mathrm{ph}} \;&=\; \sum_{K\in 2\mathbb{N}} g^K \sum_{B_+\dot\cup B_-\dot\cup C_+\dot\cup C_- = \mathbb{Z}_1^K} Z_K(B_+, B_-, C_+, C_-) \\
&= \sum_{M,N=0}^{\infty} \sum_{K\in 2\mathbb{N}} g^K \sum_{B_+\dot\cup B_-\dot\cup C_+\dot\cup C_- = \mathbb{Z}_1^K} \mathbb{1}\big(|B_+| = M\big)\, \mathbb{1}\big(|B_-| = N\big)\, Z_K(B_+, B_-, C_+, C_-) \\
&= \sum_{M,N=0}^{\infty} \sum_{(B_+,B_-)\in\mathfrak{B}_{M,N}} \sum_{K\in 2\mathbb{N}, K\geq \max(B_+\cup B_-)} \sum_{C_+\dot\cup C_- = \mathbb{Z}_1^K\setminus(B_+\cup B_-)} g^K\, Z_K(B_+, B_-, C_+, C_-)\,.
\end{aligned}
\tag{VII.106}
$$

Damit erhalten wir

$$
\begin{aligned}
&\hat{w}^{(0)}_{M,N}[\lambda, r, k^{(M)}, \tilde{k}^{(N)}] \\
&= G(k_1)\cdots G(k_M)\,\overline{G(\tilde{k}_1)}\cdots\overline{G(\tilde{k}_N)} \sum_{(B_+,B_-)\in\mathfrak{B}_{M,N}} \; \sum_{K\in 2\mathbb{N}, K\geq \max(B_+\cup B_-)} \; \sum_{C_+\dot{\cup}C_-=\mathbb{Z}_1^K\setminus(B_+\cup B_-)} \\
&\quad g^K \int \prod_{j\in C_+} d^3\xi_j \prod_{j\in C_-} d^3\tilde{\xi}_j \Big\langle \prod_{j=1}^K \Big\{ \big(G(\xi_j)\, a^+_{\xi_j}\big)^{\mathbb{1}[j\in C_+]} \big(\overline{G(\tilde{\xi}_i)}\, a^-_{\tilde{\xi}_j}\big)^{\mathbb{1}[j\in C_-]} \qquad \text{(VII.107)} \\
&\qquad \bar{R}_j\big[H_{\mathrm{ph}} + r + \Sigma^{(j)}_{B_+,B_-}(K^{(M,N)}) - \lambda\big]\Big\}\Big\rangle_\Omega . \\
&= G(k_1)\cdots G(k_M)\,\overline{G(\tilde{k}_1)}\cdots\overline{G(\tilde{k}_N)} \sum_{(B_+,B_-)\in\mathfrak{B}_{M,N}} \; \sum_{K\in 2\mathbb{N}, K\geq \max(B_+\cup B_-)} \; \sum_{C_+\dot{\cup}C_-=\mathbb{Z}_1^K\setminus(B_+\cup B_-)} \\
&\quad g^K \Big\langle \prod_{j=1}^K \Big\{ \big(a^*(G)\big)^{\mathbb{1}[j\in C_+]} \big(a(G)\big)^{\mathbb{1}[j\in C_-]}\, \bar{R}_j\big[H_{\mathrm{ph}} + r + \Sigma^{(j)}_{B_+,B_-}(K^{(M,N)}) - \lambda\big]\Big\}\Big\rangle_\Omega ,
\end{aligned}
$$

wobei B_+, B_- und $\Sigma^{(j)}_{B_+,B_-}(K^{(M,N)})$ gemäß (VII.97)-(VII.99) festgelegt sind. Insbesondere folgt aus $B_+ = B_- = \emptyset$, für $M = N = 0$, dass

$$
\begin{aligned}
&\widetilde{W}^{(0)}_{0,0}[\lambda, r] \qquad \text{(VII.108)} \\
&= r + \sum_{K\in 2\mathbb{N}} g^K \sum_{C_+\dot{\cup}C_-=\mathbb{Z}_1^K} \Big\langle \prod_{j=1}^K \Big\{ \big(a^*(G)\big)^{\mathbb{1}[j\in C_+]} \big(a(G)\big)^{\mathbb{1}[j\in C_-]}\, \bar{R}_j\Big[H_{\mathrm{ph}} + r - \lambda\Big]\Big\}\Big\rangle_\Omega .
\end{aligned}
$$

Aus (VII.107) und (VII.108) folgen (VII.96) und (VII.100) unmittelbar. □

Schließlich führen wir noch eine lineare Skalentransformation

$$
S_\rho : \mathcal{B}[\mathrm{Ran}(\mathbb{1}[H_{\mathrm{ph}} < \rho])] \;\to\; \mathcal{B}[\mathfrak{H}_{\mathrm{red}}]\,, \quad S_\rho[A] \;:=\; \frac{1}{\rho}\,\Gamma[u_\rho]\,A\,\Gamma[u_\rho]^* \qquad \text{(VII.109)}
$$

ein, wobei $\mathfrak{H}_{\mathrm{red}} := \mathrm{Ran}(\mathbb{1}[H_{\mathrm{ph}} < 1])$ der **reduzierte Hilbert-Raum** und u_ρ die in (VII.14) definierte unitäre Dilatation

$$
[u_\rho\psi](k) \;:=\; \rho^{3/2}\psi(\rho k) \qquad \text{(VII.110)}
$$

sind. Wegen $\Gamma[u_\rho]H_{\mathrm{ph}}\Gamma[u_\rho]^* = \rho H_{\mathrm{ph}}$ folgt sofort, dass

$$
S_\rho\big(W_{0,0}[H_{\mathrm{ph}}]\big) \;=\; \frac{1}{\rho}\,W_{0,0}[\rho H_{\mathrm{ph}}]\,. \qquad \text{(VII.111)}
$$

Setzen wir außerdem für $M + N \geq 1$

$$
\begin{aligned}
&S_\rho\Big(\int a^*(k^{(M)})\, w_{M,N}[H_{\mathrm{ph}}, K^{(M,N)}]\, a(\tilde{k}^{(N)})\, dK^{(M,N)}\Big) \qquad \text{(VII.112)} \\
&\qquad =: \int a^*(k^{(M)})\, s_\rho(w_{M,N})[H_{\mathrm{ph}}, K^{(M,N)}]\, a(\tilde{k}^{(N)})\, dK^{(M,N)} ,
\end{aligned}
$$

so prüft man leicht nach, dass

$$s_\rho(w_{M,N})[H_{\mathrm{ph}}, K^{(M,N)}] \; = \rho^{\frac{3}{2}(M+N)-1} \, w_{M,N}[\rho H_{\mathrm{ph}}, \, \rho K^{(M,N)}] \, . \tag{VII.113}$$

Wir definieren jetzt für $M + N \geq 1$

$$W^{(0)}_{M,N}[\lambda] \; := \; \int a^*(k^{(M)}) \, w^{(0)}_{M,N}[\lambda, H_{\mathrm{ph}}, K^{(M,N)}] \, a(\tilde{k}^{(N)}) \, dK^{(M,N)} \; := \; S_\rho\Big(\widetilde{W}^{(0)}_{M,N}[\lambda]\Big) \, . \tag{VII.114}$$

und für $M = N = 0$

$$W^{(0)}_{0,0}[\lambda, H_{\mathrm{ph}}] \; := \; S_\rho\Big(\widetilde{W}^{(0)}_{0,0}[\lambda, H_{\mathrm{ph}}]\Big) \; = \; \frac{1}{\rho} \, \widetilde{W}^{(0)}_{0,0}[\lambda, \rho H_{\mathrm{ph}}] \tag{VII.115}$$

sowie weiterhin

$$E^{(0)}[\lambda] \; := W^{(0)}_{0,0}[\lambda, 0] \; = \; \frac{1}{\rho} \, \widetilde{W}^{(0)}_{0,0}[\lambda, 0] \tag{VII.116}$$

$$T^{(0)}[\lambda, r] \; := W^{(0)}_{0,0}[\lambda, r] \; - \; W^{(0)}_{0,0}[\lambda, 0] \; = \; \frac{1}{\rho} \, \Big(\widetilde{W}^{(0)}_{0,0}[\lambda, \rho r] \; - \; \widetilde{W}^{(0)}_{0,0}[\lambda, 0]\Big) \tag{VII.117}$$

und erhalten mit folgenden Satz den effektiven Operator $H^{(0)}[\lambda]$, der dank der Feshbach-Schur-Abbildung in der Nähe von $e_0 (= 0)$ isospektral zu H_g ist.

Satz VII.9. *Seien $\rho \in (0, \frac{1}{32})$, $\lambda \in (-\frac{1}{4}\rho, \frac{1}{4}\rho)$ und $|g| \leq \rho^{1/2}(21\Lambda_1)^{-1}$, wobei Λ_1 in* (VII.8) *definiert ist. Seien weiterhin $\widetilde{H}^{(0)}[\lambda]$ der in* (VII.90) *bzw.* (VII.60) *definierte Operator und*

$$H^{(0)}[\lambda] \; := \; S_\rho\big(\widetilde{H}^{(0)}[\lambda]\big) \; \in \; \mathcal{B}[\mathfrak{H}_{\mathrm{red}}] \, . \tag{VII.118}$$

Dann ist

$$H^{(0)}[\lambda] \; = \; E^{(0)}[\lambda] \; + \; T^{(0)}[\lambda, H_{\mathrm{ph}}] \; + \sum_{M+N \geq 1} W^{(0)}_{M,N}[\lambda] \, , \tag{VII.119}$$

wobei für $M, N \in \mathbb{N}_0$ und $M + N \geq 1$

$$W^{(0)}_{M,N}[\lambda] \; = \; \int \chi_1 \, a^*(k^{(M)}) \, w^{(0)}_{M,N}[\lambda, H_{\mathrm{ph}}, K^{(M,N)}] \, a(\tilde{k}^{(N)}) \, \chi_1 \, dK^{(M,N)} \, , \tag{VII.120}$$

mit

$$w^{(0)}_{M,N}[\lambda, r, k^{(M)}, \tilde{k}^{(N)}] \; = \; \rho^{\frac{3}{2}(M+N)-1} \, G(\rho k_1) \cdots G(\rho k_M) \, \overline{G(\rho \tilde{k}_1)} \cdots \overline{G\rho(\tilde{k}_N)} \sum_{(B_+, B_-) \in \mathfrak{B}_{M,N}} \Bigg[$$
$$\sum_{K \in 2\mathbb{N}, K \geq \max(B_+ \cup B_-)} g^K \, \Big\langle \prod_{j=1}^{K} \Big\{ \big(\phi(G)\big)^{\mathbb{1}[j \notin B_+ \cup B_-]} \, \bar{R}_j \big[H_{\mathrm{ph}} + \rho r + \Sigma^{(j)}_{B_+, B_-}(K^{(M,N)}) - \lambda \big] \Big\} \Big\rangle_\Omega \Bigg] \, , \tag{VII.121}$$

wobei $B_+ = \{i_1^+, \dots, i_M^+\}$ *mit* $i_1^+ < \cdots < i_M^+$, $B_- = \{i_1^-, \dots, i_N^-\}$ *mit* $i_1^- < \cdots < i_N^-$ *und* $\Sigma^{(j)}_{B_+,B_-}(K^{(M,N)}) = \sum_{n=1,\, i_n^+ \leq j}^{N} \omega(\rho\tilde{k}_n) + \sum_{m=1,\, i_m^- > j}^{M} \omega(\rho k_m)$ *(s.* (VII.97)-(VII.99)*). Weiterhin sind*

$$E^{(0)}[\lambda] \;=\; \frac{1}{\rho} \sum_{K \in 2\mathbb{N}} g^K \Big\langle \prod_{j=1}^{K} \Big\{ \phi(G)\; \bar{R}_j\big[H_{\mathrm{ph}} - \lambda\big] \Big\} \Big\rangle_\Omega \tag{VII.122}$$

und

$$T^{(0)}[\lambda, r] \;= \tag{VII.123}$$

$$r \;+\; \frac{1}{\rho} \sum_{K \in 2\mathbb{N}} g^K \Big[\Big\langle \prod_{j=1}^{K} \Big\{ \phi(G)\; \bar{R}_j\big[H_{\mathrm{ph}} + \rho r - \lambda\big] \Big\} \Big\rangle_\Omega \;-\; \Big\langle \prod_{j=1}^{K} \Big\{ \phi(G)\; \bar{R}_j\big[H_{\mathrm{ph}} - \lambda\big] \Big\} \Big\rangle_\Omega \Big].$$

Im nächsten Kapitel definieren wir die Renormierungstransformation $\mathcal{R}_\rho$ auf $\mathcal{D} \subseteq \big\{(-\frac{1}{4}\rho, \frac{1}{4}\rho) \to \mathcal{B}[\mathfrak{H}_{\mathrm{red}}]\big\}$ und iterieren $\mathcal{R}_\rho$ auf dem Anfangswert $\big(\lambda \mapsto H^{(0)}[\lambda]\big) \in \mathcal{D}$.

VIII. Die Renormierungstransformation

Wir kommen nun zum Schlüsselbegriff der Vorlesung: der Renormierungstransformation. Diese ist eine Abbildung aus einem Raum von effektiven Hamilton-Operatoren in sich. In der theoretischen Physik ist dieser Raum als *space of Hamiltonians* oder *theory space* bekannt, und seine genaue mathematische Beschreibung bleibt meist im Vagen. Unsere erste Aufgabe ist die präzise Definition diese Raums als Banach-Teilraum des Raums der beschränkten Operatoren $\mathcal{B}[\mathfrak{H}_{\mathrm{red}}]$ auf dem reduzierten Hilbert-Raum $\mathfrak{H}_{\mathrm{red}}$.

VIII.1. Banachraum der effektiven Hamilton-Operatoren