

Zur Zwei-Cluster-Zerlegung eines drei-atomigen Moleküls

Diplomarbeit

an der TU Berlin,

betreut durch

Prof. Dr. Rainer Wüst

und

Prof. Dr. Markus Klein,

eingereicht von

Michael Voßbeck

am 05.Juni 1999.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, daß ich die vorliegende Arbeit eigenhändig und ohne fremde Hilfe angefertigt habe.

Berlin, den 05.06.1999

Michael Voßbeck

Danksagungen

Danken möchte ich

- Markus Klein, für die Auswahl des Themas,
- Rainer Wüst, der bei inhaltlichen Schwierigkeiten immer behilflich war,
- Thierry Jecko, ohne dessen unterstützende Hinweise diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Vielen Dank auch an Thomas Kaminski und Cornelia Ortlieb, die sehr kurzfristig noch beim Korrekturlesen geholfen haben.

Mein besonderer Dank gilt meinen Eltern Karla und Willi, die mich während meines gesamten Studiums toll unterstützt haben, und Karolin.

Inhaltsverzeichnis

1 Grundlagen	8
1.1 Bezeichnungen	8
1.2 Kinematik	11
2 Eigenschaften des elektronischen Operators	20
2.1 Zugelassene Potentiale und Definitionsbereiche der Operatoren . . .	20
2.2 Eigenschaften der Resolvente von $P_{el}(x)$	24
3 Die adiabatischen Operatoren	29
3.1 Eigenschaften der Projektionen in \mathcal{H}_c	29
3.2 Definition des adiabatischen Operators	39
4 Ausblick	50
4.1 Wellenoperatoren	50
4.2 Abhängigkeit vom Parameter \hbar	51
A Anhang	55
A.1 Transformation der freien Bewegung	55
A.2 Definitionsbereich des Operators der internen kinetischen Energie . .	60
A.3 Zwei Ungleichungen	63
A.4 Regularität der Resolvente von $P_{el}(x)$	65
A.5 Die Operatoren $\langle \cdot \rangle^\tau R_\zeta(x) \langle \cdot \rangle^{-\tau}$ und $\langle \cdot \rangle^\tau R_\zeta \langle \cdot \rangle^{-\tau}$	71

A.6	Ergänzung zum Beweis von Proposition 3.1.8	78
-----	--	----

Einleitung

In dieser Arbeit führen wir Betrachtungen zur Zwei-Cluster-Zerlegung eines dreiatomigen Moleküls durch.

Angeregt wurde diese Arbeit durch den Artikel von Klein, Martinez und Wang [KMW] (1993), in welchem für ein zwei-atomiges Molekül die mathematische Fundierung der Born-Oppenheimer-Approximation einer Zwei-Cluster-Zerlegung bewiesen wird.

In Anlehnung an diesen Artikel betrachten wir den Schrödinger-Operator P , der aus dem Energieoperator eines Moleküls mit 3 Kernen und N Elektronen,

$$\tilde{P}_\xi = -\frac{1}{2m_1}\Delta_{\xi_1} - \frac{1}{2m_2}\Delta_{\xi_2} - \frac{1}{2m_3}\Delta_{\xi_3} - \sum_{i=4}^{N+3} \frac{1}{2}\Delta_{\xi_i} + \sum_{i<j} V_{ij}(\xi_i - \xi_j)$$

durch Abspalten der Schwerpunktsbewegung hervorgeht.

Dabei bezeichnen ξ_1, ξ_2 und ξ_3 (beziehungsweise m_1, m_2 und m_3) die Positionen (beziehungsweise die Massen) der drei Kerne im Ortsraum \mathbb{R}^n , die $\xi_i, i \geq 4$, sind die Positionen der Elektronen. Die Einheiten sind derart gewählt, daß die Elektronenmassen und das Plancksche Wirkungsquantum \hbar gleich 1 sind.

In dieser Arbeit sind die Wechselwirkungspotentiale $V_{ij} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ausnahmslos glatte Funktionen, die inklusive ihrer partiellen Ableitungen beschränkt sind und im Unendlichen verschwinden. Unter dieser Voraussetzung läßt sich zeigen, daß P selbstadjungiert ist auf $\mathcal{D}(P) = H^2(\mathbb{R}^{n(N+2)})$ und wesentlich selbstadjungiert auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^{n(N+2)})$.

Wir wählen eine feste Clusterzerlegung $C = (C_1, C_2)$ von $\{1, \dots, N+3\}$, bei der dem Cluster C_1 der Kern 1 sowie n_1 Elektronen angehören sollen. Entsprechend befinden sich in C_2 die Kerne 2 und 3 sowie die restlichen $n_2 = N - n_1$ Elektronen.

Mit M_1 und M_2 bezeichnen wir die Massen der Cluster und definieren

$$h^2 = \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) .$$

Indem wir davon ausgehen, daß die Elektronenmasse klein gegenüber den Kernmassen ist und diese jeweils von gleicher Ordnung sind, ist es naheliegend, den Parameter \hbar als kleine Größe zu betrachten.

Wir werden im Verlauf der Arbeit sehen, daß sich der effektive Schrödinger-Operator P in der Form

$$P = -\hbar^2 \Delta_x + P^c + I_c$$

zerlegen läßt.

Dabei ist x der Abstand der beiden Cluster, und $-\hbar^2 \Delta_x$ beschreibt daher die kinetische Energie deren Relativbewegung. P^c ist der Operator der internen Energie der beiden getrennten Cluster und

$$I_c(\xi) = \sum_{i \in C_1, j \in C_2} V_{ij}(\xi_i - \xi_j)$$

ist das Interclusterpotential, welches die Wechselwirkung zwischen den Clustern beschreibt.

Die explizite Darstellung von I_c hängt entscheidend von der Wahl der Koordinaten ab. Unsere Koordinaten $(x, \tilde{y}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^{n(N+1)}$ sind so gewählt, daß die Abhängigkeit des Interclusterpotentials von der einfachen Form

$$I_c(x, \tilde{y}) = \sum_{i \in C_1, j \in C_2} V_{ij}(\pm x + L_{ij}(\tilde{y}) + L_h(\tilde{y}))$$

ist. Dabei sind L_{ij} und L_h lineare Abbildungen von $\mathbb{R}^{n(N+1)}$ nach \mathbb{R}^n , und es ist $\|L_h\| = O(\hbar^2)$.

Weiter definieren wir den elektronischen Operator

$$P_{el} = P^c + I_c,$$

von dem wir zeigen, daß er sich als direktes Integral über die Variable x mit den Faktoren $P_{el}(x) = P^c + I_c(x, \cdot)$ schreiben läßt. Dieses entspricht dem Vorgehen in [KMW].

Anschließend sehen wir, daß die Resolvente $R_\zeta(x) = (\zeta - P_{el}(x))^{-1}$ differenzierbar vom Parameter x abhängt. Weiter beweisen wir, daß die Ableitungen der Resolvente die Gestalt

$$\begin{aligned} & (\partial_x^\alpha R_\zeta)(x) \\ &= \sum_{l=1}^{|\alpha|} \sum_{\substack{\gamma_1 + \dots + \gamma_l = \alpha \\ 0 \neq \gamma_i \in \mathbb{N}_0^n}} c_{\gamma_1 \dots \gamma_l} R_\zeta(x) (\partial_x^{\gamma_1} I_c)(x) R_\zeta(x) (\partial_x^{\gamma_2} I_c)(x) R_\zeta(x) \dots R_\zeta(x) (\partial_x^{\gamma_l} I_c)(x) R_\zeta(x) \end{aligned}$$

haben.

Außerdem weisen wir nach, daß die $R_\zeta(x)$ im starken Sinn gegen den Operator $(\zeta - P^c)^{-1}$ konvergieren für $|x| \rightarrow \infty$, was zur Folge hat, daß die Elemente aus dem Spektrum von P^c Grenzwerte von Elementen aus den Spektren der $P_{el}(x)$ sind.

Wir fixieren dann einen Eigenwert E_0 von P^c . E_0 liege im diskreten Spektrum von P^c und habe die Vielfachheit m . Wir nehmen an, daß es genau m Kurven von Eigenwerten von $P_{el}(x)$, $\lambda_1(x), \dots, \lambda_m(x)$, die entsprechend ihrer Vielfachheit aufgeführt sind, gibt, die gegen E_0 konvergieren für $|x| \rightarrow \infty$.

Mit Π_0 und $\Pi(x)$ bezeichnen wir die Projektionen auf die entsprechenden Eigenräume. Als unser Hauptresultat können wir zeigen, daß unter der Voraussetzung $|\partial^\alpha V(\eta)| \leq d_\alpha \langle \eta \rangle^{-\rho-|\alpha|}$, ($\alpha \in \mathbb{N}_0^n, \eta \in \mathbb{R}^n$), gilt,

$$\|\partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0)\| = O(\langle x \rangle^{-\rho-|\alpha|}) \quad .$$

Die Idee des Beweises geht dabei auf die Doktorarbeit von Thierry Jecko zurück, der diese Aussage sogar mit einer Uniformität im Parameter h beweist. Der dortige Beweis ist allerdings nicht ganz korrekt und mußte ein wenig modifiziert werden. Der entscheidende Hinweis wurde aber auch hier von Thierry Jecko gegeben.

Dieses Ergebnis wird unter anderem dazu gebraucht, den adiabatischen und den nicht-adiabatischen Anteil von P sinnvoll zu definieren. Indem wir mit Π und Π_0 jene Projektionen im Raum $L^2(\mathbb{R}^{n(N+2)})$ bezeichnen, die durch die Wirkung von $\Pi(x), \Pi_0$ im Raum $L^2(\mathbb{R}_y^{n(N+1)})$ induziert werden, definieren wir

$$P^{AD} = \Pi P \Pi, \quad Q^{AD} = \hat{\Pi} P \hat{\Pi} \quad (\hat{\Pi} = 1 - \Pi).$$

Wir können schließlich zeigen, daß beide Operatoren auf $\mathcal{D}(P)$ selbstadjungiert sind und wesentlich selbstadjungiert auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^{n(N+2)})$.

Beim Beweis des Hauptresultates machen wir unter anderem Gebrauch von

$$\langle \cdot \rangle^\tau \partial_{y,z}^\alpha (P_{el}(x) + \zeta)^{-1} \partial_{y,z}^\beta \langle \cdot \rangle^{-\tau} \in \mathcal{B}(L^2(\mathbb{R}^{n(N+1)})) \quad (\tau > 0, x \in \mathbb{R}^n) \quad .$$

Teile dieser Aussage finden sich zwar auch in [RS4] (Lemma 1, S.172), aber der Beweis ist nur unvollständig. Wir zeigen die obige Aussage detailliert im Anhang.

Kapitel 1

Grundlagen

Im ersten Teil dieses Kapitels führen wir die von uns benutzten Bezeichnungen ein.

Der zweite Abschnitt beschäftigt sich mit der Koordinatenwahl, mit welcher wir die Zwei-Cluster-Zerlegung beschreiben. Wir definieren den Clusteroperator P^c und den elektronischen Operator P_{el} , von dem wir zeigen, daß er eine direkte Integralzerlegung gestattet.

1.1 Bezeichnungen

Es seien $n, N \in \mathbb{N}$. Wir betrachten ein Molekül, das aus 3 Kernen und N Elektronen, insgesamt also $\hat{N} := N + 3$ Teilchen, besteht, die jeweils aus einem Ortsraum \mathbb{R}^n stammen. Der Zustand des Moleküls wird in der Quantenmechanik beschrieben durch Funktionen ϕ des Hilbertraumes $\mathcal{H}^{tot} := L^2(\mathbb{R}^{n\hat{N}})$.

Die Massen und Koordinaten bezeichnen wir mit m_i und ξ_i für $i = 1, \dots, \hat{N}$. Es sind dabei ξ_1, ξ_2 und ξ_3 die Koordinaten der drei Kerne und entsprechend m_1, m_2 und m_3 deren (große) Massen. Wir betrachten lediglich die elektrische Wechselwirkung und wählen die Einheiten so, daß das Planck'sche Wirkungsquantum \hbar und die Elektronenmassen gleich 1 sind.

Die Energieobservable des Systems wird dann beschrieben durch den Schrödinger-Operator

$$\tilde{P}_\xi = - \sum_{i=1}^{\hat{N}} \frac{1}{2m_i} \Delta_{\xi_i} + V(\xi), \quad \xi = (\xi_1, \dots, \xi_{\hat{N}}) \quad . \quad (1.1)$$

Dabei ist

$$\tilde{P}_{\xi,0} = - \sum_{i=1}^{\hat{N}} \frac{1}{2m_i} \Delta_{\xi_i} \quad (1.2)$$

der Operator der freien Bewegung.

Das Potential V ist eine Summe von 2-Teilchen-Potentialen¹ $V_{ij} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ und hat die Form

$$V(\xi) = \sum_{1 \leq i < j \leq \hat{N}} V_{ij}(\xi_i - \xi_j) \quad . \quad (1.3)$$

Um das Aufbrechen des Moleküls in zwei Cluster zu beschreiben, führen wir folgende Zerlegung ein. Der erste Cluster bestehe aus dem ersten Kern zusammen mit n_1 Elektronen, der zweite Cluster aus den Kernen zwei und drei sowie den verbliebenen $n_2 := N - n_1$ Elektronen. Wir schreiben für diese Zerlegung $C = (C_1, C_2)$ und verwenden dabei die folgenden Bezeichnungen.

$$\begin{aligned} C_1 &:= (1, i_1, \dots, i_{n_1}) \\ \dot{C}_1 &:= C_1 \setminus \{1\} \\ C_2 &:= (2, 3, j_1, \dots, j_{n_2}) \\ \dot{C}_2 &:= C_2 \setminus \{2, 3\}, \end{aligned} \quad (1.4)$$

mit $i_1 < i_2 < \dots < i_{n_1}$ und $j_1 < j_2 < \dots < j_{n_2}$ sowie

$$\begin{aligned} \{i_1, \dots, i_{n_1}\} \cup \{j_1, \dots, j_{n_2}\} &= \{4, \dots, \hat{N}\}, \\ \{i_1, \dots, i_{n_1}\} \cap \{j_1, \dots, j_{n_2}\} &= \emptyset \quad . \end{aligned}$$

Weiter vereinbaren wir die Abkürzungen

$$\begin{aligned} i \sim_c j &:\Leftrightarrow i, j \text{ sind im gleichen Cluster} \\ i \not\sim_c j &:\Leftrightarrow i, j \text{ sind nicht im gleichen Cluster} \end{aligned} \quad (1.5)$$

Für die Gesamtmasse M des Moleküls und die Clustermassen M_1 und M_2 ergeben sich

$$\begin{aligned} M &= \sum_{i=1}^{\hat{N}} m_i, \\ M_1 &= \sum_{i \in C_1} m_i, \\ M_2 &= \sum_{i \in C_2} m_i \quad . \end{aligned}$$

¹In dieser Arbeit identifizieren wir jeweils die Funktionen mit denen von ihnen erzeugten Multiplikationsoperatoren

Wir definieren

$$h^2 := \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^{1/2} . \quad (1.6)$$

Da die Elektronenmassen klein sind im Vergleich zur Masse der Kerne, kann man h in natürlicher Weise als kleinen Parameter betrachten.

1.2 Kinematik

Die folgende Skizze soll unsere Koordinatenwahl illustrieren.

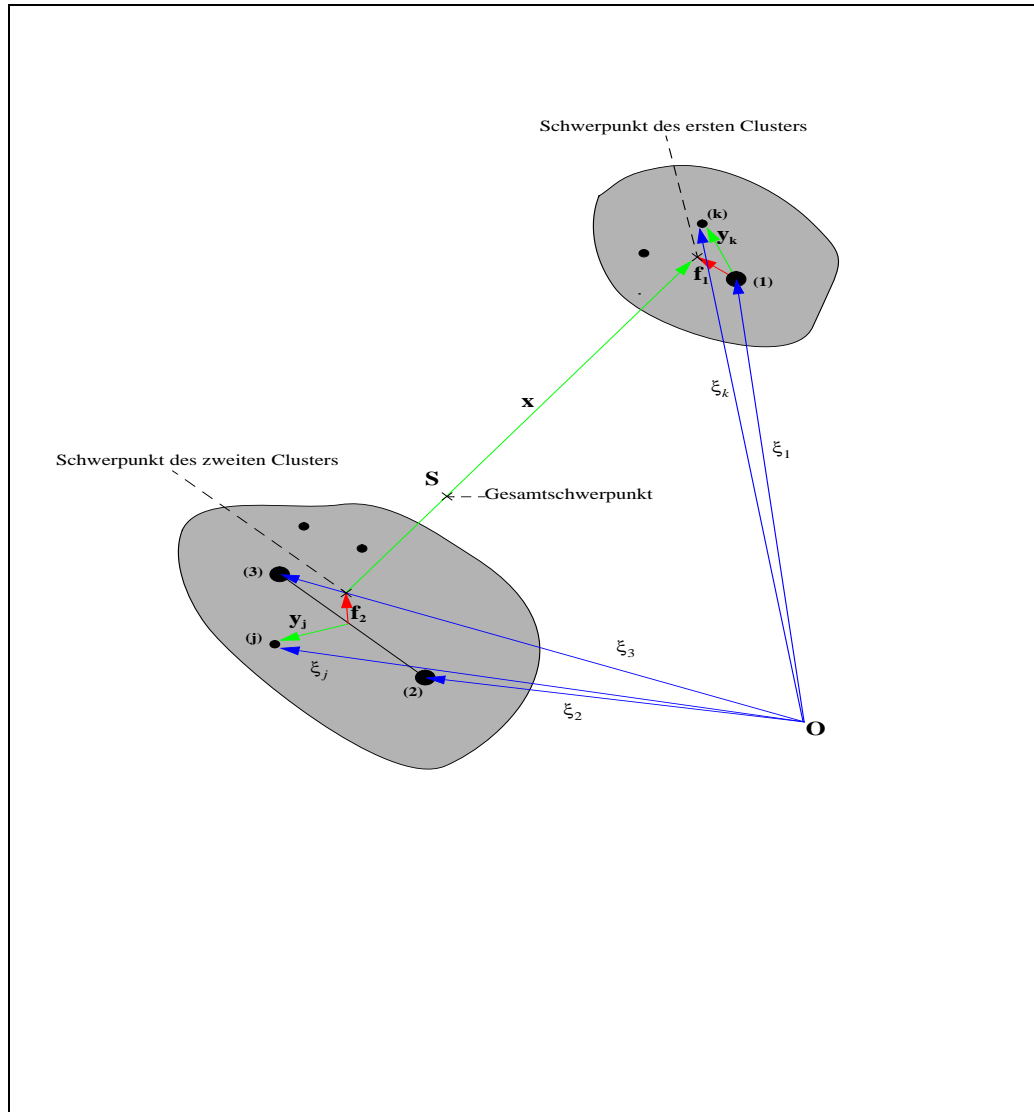


Abbildung 1.1: Skizze der Koordinaten

Um das Aufspalten des Moleküls in zwei Cluster zu beschreiben, ist es wichtig geeignete Koordinaten zu verwenden. Geeignet sind die Koordinaten für uns dann, wenn sich die Schwerpunktsbewegung abspalten läßt, der Abstand der beiden Cluster als neue Koordinate auftritt und die Abhängigkeit vom Parameter h nicht zu kompliziert wird. Unsere Wahl wird diese Vorstellungen erfüllen.

Im ersten Cluster verwenden wir sogenannte atomische Koordinaten, also die Abstände der Elektronen zum einzigen Kern.

Dagegen messen wir im zweiten Cluster den Abstand der Elektronen zum Schwerpunkt der beiden Kerne und haben dabei im Hinterkopf, daß dieser wegen der Massenverhältnisse fast mit dem Schwerpunkt des Clusters übereinstimmt. Als weitere interne Größe tritt hier der Kernabstand auf.

Wir merken an, daß man ebenfalls geclusterte Jacobi-Koordinaten hätte verwenden können, wie sie in [RA] (S.22 ff) benutzt werden, aber dann die h -Abhängigkeit in den Potentialen komplizierter geworden wäre.

Wir formulieren unsere Koordinatenauswahl in der folgenden Definition.

Definiton 1.2.1 :

Die Koordinatentransformation sei gegeben durch eine lineare Abbildung

$$A : R^{n\hat{N}} \longrightarrow R_s^n \oplus R_x^n \oplus R_{y,z}^{n(N+1)},$$

wobei gilt:

$$\left. \begin{aligned} s &:= \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{\hat{N}} m_i \xi_i, \\ x &:= \frac{1}{M_1} \sum_{i \in C_1} m_i \xi_i - \frac{1}{M_2} \sum_{i \in C_2} m_i \xi_i, \\ z &:= \xi_2 - \xi_3, \\ y_i &:= \xi_i - \xi_1 \quad (i \in \dot{C}_1), \\ y_i &:= \xi_i - \frac{1}{m_2 + m_3} (m_2 \xi_2 + m_3 \xi_3) \quad (i \in \dot{C}_2) \end{aligned} \right\} \quad (1.7)$$

und $y := (y_{i_1}, \dots, y_{i_{n_1}}, y_{j_1}, \dots, y_{j_{n_2}}) \in R^{nN}$.

Gelegentlich verwenden wir die Abkürzung

$$\tilde{y} := (y, z) \in R^{n(N+1)}$$

Die Abbildung A erzeugt gemäß $U(A) \circ \phi := \phi \circ A^{-1}$ ($\phi \in \mathcal{H}^{tot}$) eine unitäre Transformation des Zustandsraumes

$$\begin{aligned} U(A) : \mathcal{H}^{tot} &\longrightarrow L^2(\mathbb{R}_s^n) \otimes L^2(\mathbb{R}_x^n) \otimes L^2(\mathbb{R}_{yz}^{n(N+1)}) \\ &=: \mathcal{H}_s \otimes \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_c, \end{aligned}$$

und die Energieobservable wird dann durch den Operator

$$\tilde{P} = U(A) \circ \tilde{P}_\xi \circ U(A^{-1}) \quad (1.8)$$

beschrieben.

Mit \mathcal{H}_x bezeichnen wir den Hilbertraum, in welchem die Relativbewegung der beiden Cluster beschrieben wird. \mathcal{H}_c ist der Hilbertraum der Zustände der getrennten Cluster, dessen Elemente quadratintegrierbaren Funktionen sind, die alleine von den clusterinternen Koordinaten y und z abhängen. Man kann diesen Raum weiter zerlegen gemäß $\mathcal{H}_c = \mathcal{H}_{c_1} \otimes \mathcal{H}_{c_2}$, wie es bei [RA] gemacht wird. In dieser Arbeit machen wir davon allerdings keinen Gebrauch.

Im folgenden leiten wir die Darstellung von \tilde{P}_ξ in den Koordinaten (s, x, y, z) her, die schließlich in Korollar 1.2.5 gegeben wird.

Wir beginnen hierzu mit der folgenden Proposition, die die Transformation des Operators der freien Bewegung beschreibt.

Proposition 1.2.2 (Transformation der freien Bewegung) :

Für die lineare Transformation A ist

$$U(A) \circ \tilde{P}_{0,\xi} \circ U(A^{-1}) = -\frac{1}{2M} \Delta_s - h^2 \Delta_x + P_0^c \quad (1.9)$$

mit

$$\left. \begin{aligned} P_0^c &:= P_0^{c_1} + P_0^{c_2} \\ P_0^{c_1} &= -\sum_{i \in \dot{C}_1} \frac{1}{2} \Delta_{y_i} - \frac{1}{2m_1} \left(\sum_{i \in \dot{C}_1} \nabla_{y_i} \right)^2 \\ P_0^{c_2} &= -\left(\frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3} \right) \Delta_z - \sum_{i \in \dot{C}_2} \frac{1}{2} \Delta_{y_i} - \left(\frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3} \right) \left(\sum_{i \in \dot{C}_2} \nabla_{y_i} \right)^2 \end{aligned} \right\} (1.10)$$

Beweis:

Für den Beweis, der eher technischer Natur ist, verweisen wir auf den Anhang (siehe Proposition A.1.1). ■

Zur Transformation des Potentials betrachten wir die Identität

$$\begin{aligned} (U(A) \circ V \circ U(A^{-1})) \phi(\eta) &= [VU(A^{-1})\phi](A^{-1}\eta) \\ &= V(A^{-1}\eta)\phi(AA^{-1}\eta) \\ &= (V \circ A^{-1}) \phi(\eta) \quad (\eta \in \mathbb{R}^{n\hat{N}}) \quad . \end{aligned}$$

Danach hat das Potential in den neuen Koordinaten die Gestalt $V \circ A^{-1}$.

Wir werden an dieser Stelle aber nicht die Inverse von A ausrechnen, sondern die in den einzelnen V_{ij} auftretenden Teilchenabstände $\xi_i - \xi_j$ mittels Vektoraddition aus den neuen Koordinaten (s, x, y, z) berechnen.

Zum besseren Verständnis empfiehlt sich noch einmal ein Blick auf Abbildung 1.1.

Es seien S_1 und S_2 die Schwerpunkte der beiden Cluster.

Mit f_1 und f_2 messen wir den Abstand der Clusterschwerpunkte zum jeweiligen Schwerpunkt der großen Massen des Clusters,

$$\begin{aligned} f_1 &:= S_1 - \xi_1 \\ f_2 &:= S_2 - \frac{1}{m_2 + m_3} (m_2\xi_2 + m_3\xi_3) \quad . \end{aligned}$$

Diese beiden Größen werden im transformierten Potential auftreten und lassen sich recht einfach durch y und z ausdrücken, was wir im nächsten Lemma separat formuliert haben:

Lemma 1.2.3 :

Mit obigen Bezeichnungen ist

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{1}{m_1} \sum_{i \in \dot{C}_1} y_i, \\ f_2 &= \frac{1}{M_2} \sum_{i \in \dot{C}_2} y_i \quad . \end{aligned} \tag{1.11}$$

Beweis:

Wir beweisen die Behauptung nur für f_2 , denn der Beweis für f_1 verläuft entsprechend.

Es ist

$$\begin{aligned} f_2 &= \frac{1}{M_2} \sum_{i \in C_2} \xi_i - \frac{1}{m_2 + m_3} (m_2\xi_2 + m_3\xi_3) \\ &= \frac{1}{M_2} \sum_{i \in C_2} \xi_i - \frac{1}{M_2} \sum_{i \in C_2} \frac{m_i}{m_2 + m_3} (m_2\xi_2 + m_3\xi_3) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{M_2} \sum_{i \in \dot{C}_2} m_i \left(\xi_i - \frac{1}{m_2 + m_3} (m_2 \xi_2 + m_3 \xi_3) \right) \\
&\quad + \frac{1}{M_2} \underbrace{\left(m_2 \xi_2 + m_3 \xi_3 - (m_2 + m_3) \frac{1}{m_2 + m_3} (m_2 \xi_2 + m_3 \xi_3) \right)}_{=0} \\
&= \frac{1}{M_2} \sum_{i \in \dot{C}_2} y_i,
\end{aligned}$$

wobei wir beim Übergang zur letzten Zeile verwenden, daß die Elektronenmassen gleich 1 gesetzt worden waren. ■

Bereits die Anschauung suggeriert, daß der Schwerpunkt der großen Massen nahe beim Schwerpunkt des Clusters liegt, da man die Elektronenmassen gegenüber der Kernmasse fast vernachlässigen kann. Dieses kommt in obigem Lemma quantitativ zum Ausdruck, denn wie man sieht, sind diese Abstände von der Ordnung $O(h^2)$.

Die Berechnung der $\xi_i - \xi_j$ führen wir exemplarisch für zwei Elektronen und zwei Kerne aus verschiedenen Clustern durch. Die anderen Teilchenabstände ergeben sich, meist noch einfacher, durch analoge Rechnungen.

Es ist für $\xi_i \in \dot{C}_1$, $\xi_j \in \dot{C}_2$

$$\begin{aligned}
\xi_i - \xi_j &= (\xi_i - \xi_1) + (\xi_1 - S_1) + (S_1 - S_2) \\
&\quad + (S_2 - \frac{1}{m_2 + m_3} (m_2 \xi_2 + m_3 \xi_3)) + (\frac{1}{m_2 + m_3} (m_2 \xi_2 + m_3 \xi_3) - \xi_j) \\
&= y_i - f_1 + x + f_2 - y_j \\
&= x + y_i - y_j - \frac{1}{m_1} \sum_{i \in \dot{C}_1} y_i + \frac{1}{M_2} \sum_{i \in \dot{C}_2} y_i,
\end{aligned}$$

für ξ_1 und ξ_2 ergibt sich

$$\begin{aligned}
\xi_1 - \xi_2 &= (\xi_1 - S_1) + (S_1 - S_2) + (S_2 - \frac{1}{m_2 + m_3} (m_2 \xi_2 + m_3 \xi_3)) \\
&\quad + (\frac{1}{m_2 + m_3} (m_2 \xi_2 + m_3 \xi_3) - \xi_2) \\
&= -f_1 + x + f_2 - \frac{m_3}{m_2 + m_3} z \quad .
\end{aligned}$$

Damit gelangen wir zur Darstellung des Potentials in den neuen Koordinaten.

Proposition 1.2.4 :

Mit den Bezeichnungen dieses Kapitels gilt

$$U(A) \circ V \circ U(A^{-1}) = I^{c_1} + I^{c_2} + I_c \quad .$$

Dabei sind ²

$$\left. \begin{aligned} I^{c_1}(y, z) &= \sum_{i \in \dot{C}_1} V_{1i}(-y_i) + \sum_{\substack{i, j \in \dot{C}_1 \\ i < j}} V_{ij}(y_i - y_j) \\ I^{c_2}(y, z) &= \sum_{i \in \dot{C}_2} \left[V_{2i}\left(\frac{m_3}{m_2+m_3}z - y_i\right) + V_{3i}\left(\frac{-m_2}{m_2+m_3}z - y_i\right) \right] \\ &\quad + \sum_{\substack{i, j \in \dot{C}_2 \\ i < j}} V_{ij}(y_i - y_j) + V_{23}(z) \\ I_c(x, y, z) &= \sum_{i \in \dot{C}_2} V_{1i}(x - y_i - f_1 + f_2) \\ &\quad + \sum_{i \in \dot{C}_1} V_{2i}\left(-x + \frac{m_3}{m_2+m_3}z - y_i + f_1 - f_2\right) \\ &\quad + \sum_{i \in \dot{C}_1} V_{3i}\left(-x - \frac{m_2}{m_2+m_3}z - y_i + f_1 - f_2\right) \\ &\quad + \sum_{\substack{i \in \dot{C}_1, j \in \dot{C}_2 \\ i < j}} V_{ij}(x + y_i - y_j - f_1 + f_2) \\ &\quad + \sum_{\substack{i \in \dot{C}_2, j \in \dot{C}_1 \\ i < j}} V_{ij}(-x + y_i - y_j + f_1 - f_2) \\ &\quad + V_{12}\left(x - \frac{m_3}{m_2+m_3}z - f_1 + f_2\right) \\ &\quad + V_{13}\left(x + \frac{m_2}{m_2+m_3}z - f_1 + f_2\right) \end{aligned} \right\} \quad (1.12)$$

Zu diesem Ergebnis machen wir noch einige Anmerkungen.

Man sieht, daß der Gesamtschwerpunkt s nicht mehr auftritt. Dieses war auch nicht zu erwarten, da die Wechselwirkung nur von der relativen Lage zweier Teilchen abhängt.

Entsprechend der obigen Darstellung läßt sich das Potential aufspalten in die zwei Anteile $I^c := I^{c_1} + I^{c_2}$ und I_c .

In I^c , dem sogenannten *Intracusterpotential*, sind alle clusterinternen Wechselwirkungen zusammengefaßt. Es hängt nur von $(y, z) \in \mathcal{H}_c$ ab und ist deswegen eine

²Wir definieren hier I^{c_1}, I^{c_2} als Funktionen in $\mathbb{R}^{n(N+1)}$, I_c als Funktion in $\mathbb{R}^{n(N+2)}$. Keine dieser Funktionen hängt nämlich vom Schwerpunkt s ab, I^{c_1} und I^{c_2} sind überdies unabhängig vom Interclusterabstand x . Für das transformierte Potential müßten wir dann ganz präzise eigentlich schreiben $1_S \otimes 1_x \otimes (I^{c_1} + I^{c_2}) + 1_S \otimes I_c$, wobei 1_S und 1_x die Identität in $L^2(\mathbb{R}_S^n)$ beziehungsweise $L^2(\mathbb{R}_x^n)$ bezeichnen.

reellwertige Funktion auf $\mathbb{R}^{n(N+1)}$.

I_c heißt *Interclusterpotential* und umfaßt alle Wechselwirkungen von Teilchen aus verschiedenen Clustern und enthält den Interclusterabstand x als Parameter. Als Funktion ist I_c deswegen auf $\mathbb{R}^{n(N+2)}$ definiert.

Wie man sieht, existieren lineare Abbildungen $L_{ij} \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^{n(N+1)}; \mathbb{R}^n)$ mit der Eigenschaft

$$I_c(x) = \sum_{\substack{i \neq c_j \\ i < j}} V_{ij}(\pm x + L_{ij}) \quad . \quad (1.13)$$

Ein genauerer Blick zeigt, daß die Abhängigkeit vom Parameter h von einfacher Gestalt ist, denn genauso kann man mit linearen Abbildungen $\tilde{L}_{ij} \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^{n(N+1)}; \mathbb{R}^n)$ und $L_h \in \mathcal{B}(\mathbb{R}_y^{nN}; \mathbb{R}^n)$ schreiben,

$$I_c(x) = \sum_{\substack{i \neq c_j \\ i < j}} V_{ij}(\pm x + \tilde{L}_{ij}(\cdot) + L_h(\cdot)), \quad (1.14)$$

wobei jeweils das Pluszeichen vor dem x für $i \in C_1$ und das Minuszeichen für $i \in C_2$ gelten. Weiter ist $L_h = \pm(f_1 - f_2)$, und deswegen $\|L_h\| = O(h^2)$. Insbesondere von der ersten Darstellung werden wir in künftigen Abschätzungen noch mehrfach Gebrauch machen.

In der Folge wird es unter anderem um die Wirkung des Interclusterpotentials bei festem x auf Funktionen $\phi \in \mathcal{H}_c$ gehen. Wir schreiben dann häufig kürzer

$$I_c(x) := I_c(x, \cdot)$$

Den Schrödinger-Operator der Energie erhalten wir, indem wir die Ergebnisse aus den Propositionen 1.2.2 und 1.2.4 zusammenfassen:

Korollar 1.2.5 (Transformation des Schrödinger-Operators) :

In den Koordinaten (s, x, y, z) hat der Energieoperator die Gestalt

$$U(A) \circ \tilde{P}_\xi \circ U(A^{-1}) = -\frac{1}{2M} \Delta_s - h^2 \Delta_x + P_0^c + I^c + I_c \quad . \quad (1.15)$$

Entsprechend der Zerlegung des Zustandsraumes $\mathcal{H}^{tot} = \mathcal{H}_s \otimes \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_c$ erkennt man die einzelnen Anteile des Operators.

$-\frac{1}{2M} \Delta_s$ beschreibt die freie Bewegung des Gesamtschwerpunktes, $-h^2 \Delta_x$ steht für die Relativbewegung der beiden Cluster, und im verbleibenden Anteil $P_0^c + I^c + I_c$ sind die Bewegungen der Teilchen in den Clustern sowie deren elektrische Wechselwirkung zusammengefaßt.

Die freie Bewegung des Moleküls spielt physikalisch keine Rolle, sondern ist lediglich eine Frage des Bezugssystems. Daher ist es üblich, diesen Anteil des Schrödinger-Operators wegzulassen und lediglich den verbleibenden, effektiven Anteil zu untersuchen.

Wir führen dementsprechend die folgenden Abkürzungen ein.

Definiton 1.2.6 :

Es seien

$$\begin{aligned} P^c &:= P_0^c + I^c, \\ P_{el} &:= P^c + I_c, \\ P &:= -\hbar^2 \Delta_x + P_{el} \quad . \end{aligned} \tag{1.16}$$

P^c ist der Operator der getrennten Cluster, P_{el} wird elektronischer Operator³ genannt.

P heißt effektiver Schrödinger-Operator.

P^c beschreibt quantenmechanisch das System der getrennten und nicht wechselwirkenden Cluster und wirkt als Differentialoperator auf Funktionen $\phi \in \mathcal{H}_c$.

Der neue Grundraum nach dem Abspalten der Schwerpunktsbewegung ist der Hilbertraum

$$\mathcal{H} := \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_c \cong L^2\left(\mathbb{R}_{xyz}^{n(N+2)}\right), \tag{1.17}$$

in welchem die Definitionsbereiche von P_{el} und P liegen.

Die folgende Herangehensweise an den elektronischen Operator, die die Rolle des Interclusterabstands als Parameter hervorhebt, findet sich ebenso in [CDS], [Je], [KMW] und [RA] wieder.

Wegen der Isomorphie $\mathcal{H} \cong L^2(\mathcal{H}_x, dx; \mathcal{H}_c)$, dx sei das Lebesgue-Maß in \mathbb{R}^n , kann man gemäß [RS4] (Seite 280) \mathcal{H} als „konstantes direktes Fiberintegral“ mit den Fasern \mathcal{H}_c schreiben.

$$\mathcal{H}_{el} = \int_{\mathbb{R}^n}^{\oplus} \mathcal{H}_c dx \quad . \tag{1.18}$$

Nützlich wird diese Darstellung, weil der elektronische Operator zerlegbar ist, und man sich bei dessen Untersuchung im wesentlichen mit den Fasern $P_{el}(x)$ beschäftigen kann.

³In der Literatur ([CS1], [CS2], [CDS]) steht der Ausdruck „elektronischer Operator“ für einen parameterabhängigen Hamiltonoperator, der alleine die Bewegung der Elektronen in einem Molekül beschreibt. Der Parameter ist dabei der Kernabstand. Hier sind in P_{el} die Bewegungen aller Teilchen zusammengefaßt und der Parameter ist der Interclusterabstand. Wegen der Analogie behalten wir die Bezeichnung elektronischer Operator bei.

Lemma 1.2.7 :

Der elektronische Operator ist zerlegbar, und es gilt

$$P_{el} = \int_{\mathbb{R}^n}^{\oplus} P_{el}(x) dx \quad (1.19)$$

mit $P_{el}(x) = P^c + I_c(x)$.

Beweis:

Wir folgen beim Beweis der Herangehensweise in [RS4] (Seiten 282 ff.) und fassen dementsprechend $L^\infty(\mathcal{H}_x, dx; \mathbb{C})$ als jene Teilalgebra von $L^\infty(\mathcal{H}_x, dx; \mathcal{B}(\mathcal{H}_c))$ auf, deren Fasern ein Vielfaches der Identität sind.

Außerdem setzen wir voraus, daß wir für P_{el} einen Definitionsbereich $\mathcal{D}(P_{el})$ angeben können, auf dem dieser Operator selbstadjungiert ist⁴.

Wir wollen [RS4], Theorem XIII.84, anwenden und zeigen zunächst, daß der Operator P_{el} mit allen $f \in L^\infty(\mathcal{H}_x, dx; \mathbb{C})$ kommutiert.

Es seien dazu $\phi \in \mathcal{D}(P_{el})$ und $x \in \mathbb{R}^n$. Wir erhalten

$$\begin{aligned} (P_{el}f\phi)(x, \cdot) &= \underbrace{P_0^c f(x)}_{\in \mathbb{C}} \phi(x, \cdot) + (I^c + I_c(x)) \underbrace{f(x)}_{\in \mathbb{C}} \phi(x, \cdot) \\ &\stackrel{(1)}{=} f(x) P_0^c \phi(x, \cdot) + f(x) (I^c + I_c(x)) \phi(x, \cdot) \\ &= (f P_{el} \phi)(x, \cdot), \end{aligned}$$

wobei (1) gilt, weil in P_0^c nur nach den Variablen y, z und nicht nach x differenziert wird, und deshalb P_0^c mit der allein von x abhängigen, komplexwertigen Funktion $f(x)$ vertauscht. Die Potentiale I^c beziehungsweise $I_c(x)$ vertauschen als Multiplikationsoperatoren ohnehin mit $f(x)$.

Damit ist gezeigt, daß P_{el} und f miteinander vertauschen, und das gleiche gilt dann auch für $(P_{el} + i)^{-1}$ und f .

Auf diese beiden Operatoren wenden wir nun Theorem XIII.84 an und erkennen, daß der Operator $(P_{el} + i)^{-1}$ zerlegbar ist. Dann liefert uns [RS4], Theorem XIII.85, auch die Zerlegbarkeit von P_{el} .

Die Gestalt der einzelnen Fasern $P_{el}(x)$ ist offensichtlich. ■

Wir merken an, daß die Integraldarstellung lediglich eine andere Schreibweise für

$$(P_{el}\phi)(x, y, z) = \left[P_{el}(x)\phi(x, \cdot) \right](y, z) \quad (\phi \in \mathcal{D}(P_{el}))$$

ist.

⁴Wir werden im nächsten Kapitel einen geeigneten Definitionsbereich angeben

Kapitel 2

Eigenschaften des elektronischen Operators

In diesem Kapitel werden wir zeigen, daß die Operatoren P^c , P_{el} und $P_{el}(x)$, die wir zuvor nur formal betrachtet haben, geeignete selbstadjungierte Realisierungen besitzen.

Dieser Nachweis geschieht im ersten Abschnitt, in welchem wir dazu die Eigenschaften der Potentiale festsetzen werden. Außerdem bringen wir hier Aussagen über die Spektren der genannten Operatoren.

Im zweiten Abschnitt beschäftigen wir uns mit den Operatoren $P_{el}(x)$ und P^c in \mathcal{H}_c , deren Zusammenhang und Eigenschaften wir über die Resolvente beschreiben.

2.1 Zugelassene Potentiale und Definitionsbereiche der Operatoren

Der Vollständigkeit wegen geben wir die von uns verwendeten Bezeichnungen der verschiedenen Teile des Spektrums an und wiederholen die Definition des Sobolevraumes zweiter Stufe.

Definiton 2.1.1 :

Für einen abgeschlossenen Operator $A : D(A) \rightarrow \mathcal{H}$ in einem Hilbertraum \mathcal{H} sei

$$\begin{aligned}\sigma(A) &:= \{\lambda \mid (A - \lambda)^{-1} \notin \mathcal{B}(\mathcal{H})\} \\ \sigma_{disc}(A) &:= \{\lambda \mid \lambda \text{ ist Eigenwert endlicher Multiplizität von } A\} \\ \sigma_{ess}(A) &:= \sigma(A) \setminus \sigma_{disc}(A) \\ \rho(A) &:= C \setminus \sigma(A)\end{aligned}$$

Definiton 2.1.2 :

Für $m \in \mathbb{N}$ heißt

$$H^2(\mathbb{R}^m) := \{f \in L^2(\mathbb{R}^m) \mid D^\alpha f \in L^2(\mathbb{R}^m) \ (\alpha \in \mathbb{N}_0^m, |\alpha| \leq 2)\}$$

der Sobolevraum zweiter Stufe.

Wir lassen in dieser Arbeit lediglich glatte Potentiale zu, so daß zum Beispiel die Coulombwechselwirkung nicht zugelassen ist und definieren dafür die Funktionenklasse \mathcal{D}_ρ .

Definiton 2.1.3 :

Wir setzen

$$\langle \eta \rangle := (1 + |\eta|^2)^{1/2}, \quad (\eta \in \mathbb{R}^n, n \in \mathbb{N}) \quad .$$

Für $\rho > 0$ sei $\mathcal{D}_\rho \subset \text{Abb}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R})$ gegeben durch

$$V \in \mathcal{D}_\rho \quad :\Leftrightarrow \quad \begin{cases} V \in C^\infty(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}), \\ \bigwedge_{\alpha \in \mathbb{N}_0^n} \bigvee_{d_\alpha > 0} \bigwedge_{\eta \in \mathbb{R}^n} |\partial^\alpha V(\eta)| \leq d_\alpha \langle \eta \rangle^{-\rho - |\alpha|} \quad . \end{cases}$$

Als generelle Voraussetzung in dieser Arbeit sollen alle Potentiale V_{ij} für $1 \leq i, j \leq \hat{N}$ aus einer solchen Menge \mathcal{D}_ρ stammen.

Voraussetzung 2.1.4 :

Es gelte

$$\bigvee_{\rho > 0} \bigwedge_{1 \leq i < j \leq \hat{N}} V_{ij} \in \mathcal{D}_\rho \quad .$$

Für diese Aussage schreiben wir in Zukunft kurz (D_ρ) .

Wir bemerken, daß alle Aussagen dieser Arbeit unter der Voraussetzung (D_ρ) bewiesen werden. Um später die Existenz von Wellenoperatoren nachzuweisen muß man allerdings kurzreichweitige Potentiale voraussetzen. Es muß dann (D_ρ) mit einem $\rho > 1$ gelten (siehe hierzu [KMW], Theorem 2.3).

Bevor wir zu den Definitionsbereichen und spektralen Eigenschaften der Operatoren P^c , P_{el} und P kommen, betrachten wir den Operator P_0^c .

Dieser Operator beschreibt alleine die kinetische Energie der Teilchen in beiden Clustern, so daß die Aussage des folgenden Lemmas nicht überraschend ist.

Lemma 2.1.5 :

Der Operator P_0^c ist selbstadjungiert auf $H^2(\mathbb{R}^{n(N+1)})$ und wesentlich selbstadjungiert auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^{n(N+1)})$.

Weiter gilt

$$\sigma(P_0^c) = \sigma_{ess}(P_0^c) = [0, \infty[\quad . \quad (2.1)$$

Beweis:

Der Beweis wird ausführlich im Anhang gegeben. Man findet die Aussage in der Proposition A.2.1. ■

Unter der Voraussetzung (D_ρ) sind das Intraclusterpotential I^c und das Interclusterpotential I_c insbesondere beschränkte Funktionen auf \mathbb{R}^{nN} beziehungsweise $\mathbb{R}^{n(N+1)}$ im Sinne der Supremumsnorm. Es existieren also positive, reelle Zahlen $\Sigma^c, \Sigma_c(x)$ derart, daß

$$\begin{aligned} \sup_{(y,z) \in \mathbb{R}^{n(N+1)}} |I^c(y,z)| &\leq \Sigma^c, \\ \sup_{(y,z) \in \mathbb{R}^{n(N+1)}} |I_c(x)(y,z)| &\leq \Sigma_c(x) \quad (x \in \mathbb{R}^n), \end{aligned}$$

und es gilt $\Sigma_c := \sup_{x \in \mathbb{R}^n} \Sigma_c(x) < \infty$.

Da die auftretenden Funktionen außerdem reellwertig sind, erzeugen I^c und $I_c(x)$ selbstadjungierte Multiplikationsoperatoren $I^c, I_c(x) \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_c)$.

Durch Anwendung des Kato-Rellich-Theorems (z.B in [RS2], Theorem X.12) ergibt sich aus dem vorigen Lemma umgehend

Korollar 2.1.6 :

Die Operatoren P^c und $P_{el}(x)$ sind auf

$$\mathcal{D}(P^c) = \mathcal{D}(P_{el}(x)) = H^2(\mathbb{R}_{yz}^{n(N+1)}) \quad (x \in \mathbb{R}^n)$$

selbstadjungiert und wesentlich selbstadjungiert auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}_{yz}^{n(N+1)})$.

Der Operator P ist selbstadjungiert auf $\mathcal{D}(P) = H^2(\mathbb{R}_{xyz}^{n(N+2)})$ und wesentlich selbstadjungiert auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}_{xyz}^{n(N+2)})$.

Für die Spektren gilt

$$\begin{aligned} \sigma(P^c) &\subseteq [-\Sigma^c, \infty[, \\ \sigma(P_{el}(x)) &\subseteq [-\Sigma_c(x), \infty[\quad (x \in \mathbb{R}^n), \\ \sigma(P) &\subseteq [-\Sigma_c, \infty[\quad . \end{aligned} \quad (2.2)$$

Wir merken an, daß für den elektronischen Operator entsprechend der Zerlegung $P_{el} = P^c + I_c$ und der Beschränktheit von $I_c(x)$ für $x \in \mathbb{R}^n$ gilt,

$$\mathcal{D}(P_{el}) = L^2(\mathbb{R}^n) \otimes H^2(\mathbb{R}^{n(N+1)}) \quad .$$

Wir fahren fort mit einer Aussage über die Struktur des wesentlichen Spektrums von P^c . Da in P^c keine Wechselwirkungen zwischen den Clustern auftreten, können sich beide „frei“ bewegen, und man erwartet intuitiv, daß das wesentliche Spektrum ein Intervall der Form $[a, \infty[$ ist. Diese Intuition wird durch das HVZ-Theorem bestätigt.

Lemma 2.1.7 :

Es existiert $\Sigma_{ess}^c \in \mathbb{R}$ mit der Eigenschaft, daß

$$\sigma_{ess}(P^c) = [\Sigma_{ess}^c, \infty[\quad . \quad (2.3)$$

Beweis:

Wir bereits angesprochen, verwenden wir das HVZ-Theorem (zum Beispiel in [CFKS], Theorem 3.7), welches genau die obige Aussage liefert.

Die Voraussetzung hierfür ist, daß die Potentiale V_{ij} relativ kompakt sind zum (n -dimensionalen) Laplaceoperator (siehe [CFKS], Seite 29).

Um dies einzusehen, bemerken wir, daß¹ $V_{ij} \in L^2(\mathbb{R}^n) + L^\infty(\mathbb{R}^n)_\epsilon$, da die V_{ij} stetig sind und im Unendlichen gegen Null gehen.

Die V_{ij} sind demnach reelle Kato-Potentiale und Theorem 14.9 aus [HiSi] besagt, daß sie xrelativ Δ -kompakt sind. ■

Zum Abschluß dieses Kapitels beweisen wir ein Lemma, welches das Abfallverhalten der Operatoren $(\partial_x^\alpha I_c)(x)\langle \cdot \rangle^{-|\alpha|-\rho}$ bezüglich $\langle x \rangle$ beschreibt. Operatoren dieses Typs werden beim Beweis von Proposition 3.1.8 eine wichtige Rolle spielen.

Lemma 2.1.8 :

Es gelte (D_ρ) . Dann ist

$$(\partial_x^\alpha I_c)(x)\langle \cdot \rangle^{-|\alpha|-\rho} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_c) \quad (\alpha \in N_0^n),$$

und es existiert $d_\alpha \geq 0$ mit der Eigenschaft

$$\left\| (\partial_x^\alpha I_c)(x)\langle \cdot \rangle^{-|\alpha|-\rho} \right\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_c)} \leq d_\alpha \langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho} \quad . \quad (2.4)$$

¹Die Notation $V \in L^2(\mathbb{R}^n) + L^\infty(\mathbb{R}^n)_\epsilon$ bedeutet, daß gilt $V = V_1 + V_2$ mit $V_1 \in L^2(\mathbb{R}^n)$, $V_2 \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ und $\|V_2\|_\infty < \epsilon$ für beliebiges $\epsilon > 0$.

Beweis:

Wie bereits erwähnt, folgt aus (D_ρ) insbesondere die Beschränktheit von $I_c(x)$ einschließlich aller partiellen Ableitungen in der Supremumsnorm, und weil $\langle \cdot \rangle^{-|\alpha|-\rho}$ durch 1 beschränkt ist, induziert $(\partial_x^\alpha I_c)(x) \langle \cdot \rangle^{-|\alpha|-\rho}$ jedenfalls einen stetigen Multiplikationsoperator in \mathcal{H}_c . Damit gilt die erste Behauptung.

Weiter ist gemäß Gleichung (1.13) $I_c(x)$ eine endliche Summe von Potentialen des Typs $V(\pm x + L(\cdot))$ mit $V \in \mathcal{D}_\rho$ und $L \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^{n(N+1)}; \mathbb{R}^n)$.

Es reicht daher aus, zu zeigen

$$\left\| (\partial_x^\alpha V)(\pm x + L(\cdot)) \langle \cdot \rangle^{-|\alpha|-\rho} \right\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_c)} \leq d_\alpha \langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho} .$$

Zum Beweis benötigen wir die beiden folgenden Ungleichungen, deren Gültigkeit im Anhang gezeigt wird² (siehe hierzu die Lemmata A.3.1 und A.3.2).

$$\langle \eta_1 + \eta_2 \rangle^{-\rho} \leq 2^{\frac{\rho}{2}} \langle \eta_1 \rangle^{-\rho} \langle \eta_2 \rangle^\rho, \quad (\eta_1, \eta_2 \in \mathbb{R}^n) \quad (2.5)$$

$$\bigwedge_{c>0} \langle L(\tilde{y}) \rangle \leq c \langle \tilde{y} \rangle \quad (\tilde{y} \in \mathbb{R}^{n(N+1)}) . \quad (2.6)$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} \left| (\partial_x^\alpha V)(\pm x + L(\tilde{y})) \langle \tilde{y} \rangle^{-|\alpha|-\rho} \right| & \stackrel{(D_\rho)}{\leq} d_\alpha \langle \pm x + L(\tilde{y}) \rangle^{-|\alpha|-\rho} \langle \tilde{y} \rangle^{-|\alpha|-\rho} \\ & \stackrel{(2.5)}{\leq} 2^{\frac{\rho}{2}} d_\alpha \langle \pm x \rangle^{-|\alpha|-\rho} \langle L(\tilde{y}) \rangle^{|\alpha|+\rho} \langle \tilde{y} \rangle^{-|\alpha|-\rho} \\ & \stackrel{(2.6)}{\leq} c 2^{\frac{\rho}{2}} d_\alpha \langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho} \langle \tilde{y} \rangle^{|\alpha|+\rho} \langle \tilde{y} \rangle^{-|\alpha|-\rho} \\ & =: \tilde{d}_\alpha \langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho}, \end{aligned}$$

wobei $\tilde{y} \in \mathbb{R}^{n(N+1)}$ und $x \in \mathbb{R}^n$ beliebig sein dürfen.

Folglich ist

$$\sup_{(y,z) \in \mathbb{R}^{n(N+1)}} \left| (\partial_x^\alpha V)(\pm x + L(y,z)) \langle (y,z) \rangle^{-|\alpha|-\rho} \right| \leq \tilde{d}_\alpha \langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho} \quad (x \in \mathbb{R}^n),$$

so daß wir unmittelbar $\left\| (\partial_x^\alpha V)(x + L(\cdot)) \langle \cdot \rangle^{-|\alpha|-\rho} \right\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_c)} \leq d_\alpha \langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho}$ bekommen.

Die zweite Behauptung des Lemmas ist damit ebenfalls bewiesen. \blacksquare

2.2 Eigenschaften der Resolvente von $P_{el}(x)$

Der Operator $P_{el}(x)$ beschreibt das System beider Cluster, wenn deren Schwerpunkte gerade $|x|$ voneinander entfernt sind, wobei der Parameter x alleine in das

²Zur zweiten Ungleichung ist zu bemerken, daß auf der linken Seite $\langle \cdot \rangle$ in \mathbb{R}^n gemeint ist, auf der rechten dagegen in $\mathbb{R}^{n(N+1)}$.

Interclusterpotential eingeht. Da nach (D_ρ) die Potentiale regulär sind, dürfen wir erwarten, daß die Operatorenfamilie $\{P_{el}(x) \mid x \in \mathbb{R}^n\}$ ebenfalls differenzierbar vom Interclusterabstand abhängt.

Da wir es aber nicht mit beschränkten Operatoren zu tun haben, wird die analytische Abhängigkeit über die Resolvente beschrieben.

Wir benutzen in der Folge die Abkürzungen $R_\zeta(x) := (\zeta - P_{el}(x))^{-1}$ und $R_\zeta := (\zeta - P^c)^{-1}$.

Unter den gemachten Voraussetzungen läßt sich die nun folgende Aussage beweisen, welche das analytische Verhalten der $R_\zeta(\cdot)$ vollständig beschreibt.

Proposition 2.2.1 :

Unter der Voraussetzung (D_ρ) gilt für $\zeta \in \bigcap_{x \in \mathbb{R}^n} \rho(P_{el}(x))$

$$R_\zeta(\cdot) \in C^\infty\left(\mathbb{R}^n; \mathcal{B}(\mathcal{H}_c)\right) .$$

Insbesondere ist die Familie $\{P_{el}(x) \mid x \in \mathbb{R}^n\}$ norm-resolventenstetig,

$$\bigwedge_{x_0 \in \mathbb{R}^n} \lim_{x \rightarrow x_0} \left\| R_\zeta(x) - R_\zeta(x_0) \right\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_c)} = 0 . \quad (2.7)$$

Für $\alpha \in \mathbb{N}_0^n$ mit $|\alpha| > 0$ existieren $c_{\gamma_1 \dots \gamma_l} \in \mathbb{N}$ mit der Eigenschaft

$$\begin{aligned} & (\partial_x^\alpha R_\zeta)(x) \\ &= \sum_{l=1}^{|\alpha|} \sum_{\substack{\gamma_1 + \dots + \gamma_l = \alpha \\ 0 \neq \gamma_i \in \mathbb{N}_0^n}} c_{\gamma_1 \dots \gamma_l} R_\zeta(x) (\partial_x^{\gamma_1} I_c)(x) R_\zeta(x) (\partial_x^{\gamma_2} I_c)(x) R_\zeta(x) \dots R_\zeta(x) (\partial_x^{\gamma_l} I_c)(x) R_\zeta(x) \end{aligned} \quad (2.8)$$

Beweis:

Wir skizzieren hier nur kurz den Beweis.

Man weist nach, daß $R_\zeta(x)$ nach allen Variablen beliebig oft partiell differenzierbar ist. Daß die dabei auftretenden Differenzenquotienten einen Limes in der Operatornorm haben, läßt sich mit Hilfe des Mittelwertsatzes unter der Voraussetzung (D_ρ) zeigen. Anhand der Gestalt der Ableitungen sieht man, daß diese stetig sind.

Die explizite Darstellung der Ableitung wird dann induktiv und mit Hilfe der Leibnizregel hergeleitet.

Da beide Herleitungen sehr technischer Natur sind und keine weiteren Einblicke liefern, verweisen wir auf die detaillierten Beweise im Anhang (siehe die Lemmata A.4.1, A.4.2 und A.4.3). ■

Wir möchten an dieser Stelle darauf hinweisen, daß die explizite Darstellung der Ableitung aus (2.8) beim Beweis der zentralen Proposition 3.1.8 gebraucht wird.

Als nächstes betrachten wir das asymptotische Verhalten der Operatorenfamilie $\{P_{el}(x) \mid x \in \mathbb{R}^n\}$.

Entsprechend der Voraussetzung (D_ρ) geht die Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen gegen 0, falls ihr Abstand gegen ∞ geht. Analoges sollte deshalb für die Wechselwirkung zwischen den Clustern gelten.

Dementsprechend erwarten wir, daß die $P_{el}(x)$ in irgendeinem Sinn gegen P^c konvergieren. Diese Vermutung wird nachstehend bestätigt und präzisiert.

Proposition 2.2.2 :

Unter der Voraussetzung (D_ρ) gilt im starken Resolventen-Sinn

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} P_{el}(x) = P^c \quad . \quad (2.9)$$

Beweis:

Nach Definition der starken Resolventenkonvergenz müssen wir zeigen

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \left\| \left((P_{el}(x) + \zeta)^{-1} - (P^c + \zeta)^{-1} \right) \phi \right\|_{\mathcal{H}_c} = 0 \quad (\phi \in \mathcal{H}_c, \Im(\zeta) \neq 0),$$

wobei $\Im(\zeta)$ den Imaginärteil von ζ bezeichnet.

Nach [RS1](Theorem VIII.19) darf man sich auf den Nachweis von

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \left\| \left((P_{el}(x) + i)^{-1} - (P^c + i)^{-1} \right) \phi \right\|_{\mathcal{H}_c} = 0 \quad (\phi \in \mathcal{H}_c) \quad (2.10)$$

beschränken.

Unter Verwendung der sogenannten zweiten Resolventenidentität (siehe etwa [RS1], Theorem VIII.2) erhalten wir

$$\begin{aligned} (P_{el}(x) + i)^{-1} - (P^c + i)^{-1} &= (P_{el}(x) + i)^{-1} (P^c - P_{el}) (P^c + i)^{-1} \\ &= -(P_{el}(x) + i)^{-1} I_c(x) (P^c + i)^{-1}, \end{aligned}$$

und es folgt

$$\left\| \left[(P_{el}(x) + i)^{-1} - (P^c + i)^{-1} \right] \phi \right\|_{\mathcal{H}_c} \leq \| (P_{el}(x) + i)^{-1} \|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_c)} \| I_c(x) (P^c + i)^{-1} \phi \|_{\mathcal{H}_c} \quad .$$

Wegen der Selbstadjungiertheit der $P_{el}(x)$ ist weiter

$$\| (P_{el}(x) + i)^{-1} \|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_c)} \leq 1 \quad (x \in \mathbb{R}^n),$$

so daß es ausreicht, zu zeigen $s - \lim_{|x| \rightarrow \infty} I_c(x) (P^c + i)^{-1} \phi = 0$ für $\phi \in \mathcal{H}_c$.

Beachtet man noch die gleichmäßige Beschränktheit der Operatoren $I_c(x)$ in x , so genügt der Nachweis dieser Konvergenz auf einem dichten Teilraum, etwa

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \left\| I_c(x)(P^c + i)^{-1} \phi \right\|_{\mathcal{H}_c} = 0 \quad (\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{n(N+1)})),$$

wobei $\mathcal{S} := \mathcal{S}(\mathbb{R}^{n(N+1)})$ die Menge der Schwartz-Funktionen ist.

Beachten wir wieder die Darstellung von I_c aus (1.13), so ist letztlich zu zeigen

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \left\| V(\pm x + L(\cdot))(P^c + i)^{-1} \phi \right\|_{\mathcal{H}_c} = 0 \quad (\phi \in \mathcal{S}) \quad . \quad (2.11)$$

Dabei sind $V \in \mathcal{D}_\rho$ und $L \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^{n(N+1)}; \mathbb{R}^n)$.

Dazu wählen wir $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{n(N+1)})$ beliebig und setzen $\psi := (P^c + i)^{-1} \phi$. Wir verwenden die beim Beweis von Lemma 2.1.8 verwendeten Ungleichungen (2.5) und (2.6) erneut und erhalten die Abschätzung

$$\begin{aligned} \left| V(\pm x + L(\tilde{y}))\psi(\tilde{y}) \right| &\stackrel{(D_\rho)}{\leq} d_0 \langle \pm x + L(\tilde{y}) \rangle^{-\rho} |\psi(\tilde{y})| \\ &\stackrel{(2.5)}{\leq} 2^{\frac{\rho}{2}} d_0 \langle \pm x \rangle^{-\rho} \langle L(\tilde{y}) \rangle^\rho |\psi(\tilde{y})| \\ &\stackrel{(2.6)}{\leq} c 2^{\frac{\rho}{2}} d_0 \langle x \rangle^{-\rho} \langle \tilde{y} \rangle^\rho |\psi(\tilde{y})|, \end{aligned} \quad (2.12)$$

die für $x \in \mathbb{R}^n$ und $(y, z) \in \mathbb{R}^{n(N+1)}$ gültig ist.

Wir zeigen, daß die in (2.12) auf der rechten Seite auftretende Funktion $\langle \cdot \rangle^\rho \psi = \langle \cdot \rangle^\rho (P^c + i)^{-1} \phi$ quadratintegrierbar ist.

Dazu benötigen wir die Aussage,

$$\langle \cdot \rangle^\rho (P^c + i)^{-1} \langle \cdot \rangle^{-\rho} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_c),$$

die unter der Voraussetzung (D_ρ) richtig ist, wie in der Proposition A.5.2 im Anhang gezeigt wird.

Da ϕ eine Schwartz-Funktion ist, folgt unmittelbar $\langle \cdot \rangle^\rho \phi \in \mathcal{H}_c$ für beliebiges $\rho > 0$, und wir folgern weiter

$$\langle \cdot \rangle^\rho \psi = \underbrace{\langle \cdot \rangle^\rho (P^c + i)^{-1} \langle \cdot \rangle^{-\rho}}_{\in \mathcal{B}(\mathcal{H}_c)} \underbrace{\langle \cdot \rangle^\rho \phi}_{\in \mathcal{H}_c} \in \mathcal{H}_c \quad .$$

Wegen $\langle x \rangle^{-\rho} \leq 1$ ist nach Ungleichung (2.12) die Funktion $c 2^{\frac{\rho}{2}} d_0 \langle \cdot \rangle^\rho |\psi| \in \mathcal{H}_c$ eine integrierbare Majorante für die Funktionenschar $V(\pm x + L(\cdot))\psi$ und überdies liefert diese Ungleichung

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(\pm x + L(\cdot))\psi = 0$$

punktweise in $\mathbb{R}^{n(N+1)}$.

Die Anwendung des Satzes von Lebesgue liefert dann

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \left\| V(x + L(\cdot))(P^c + i)^{-1} \phi \right\|_{\mathcal{H}_c} = 0 ,$$

so daß Gleichung (2.11), und damit die Proposition, bewiesen ist. ■

Die starke Resolventenkonvergenz der $P_{el}(x)$ gegen P^c induziert einen engen Zusammenhang der Spektren dieser Operatoren.

Lemma 2.2.3 :

Es gelte (D_ρ) . Dann ist

$$\bigwedge_{\lambda \in \sigma(P^c)} \bigwedge_{\epsilon > 0} \bigvee_{R_0 > 0} \bigwedge_{|x| \geq R_0} \{ \mu : |\mu - \lambda| < \epsilon \} \cap \sigma(P_{el}(x)) \neq \emptyset \quad .$$

Beweis:

Wegen der Resolventen-Konvergenz können wir [K], Theorem VIII.1.14 für selbst-adjungierte Operatoren anwenden. Dieses Theorem liefert unmittelbar die Aussage. ■

Es ist also jedes Element aus $\sigma(P^c)$ Grenzelement von Werten aus $\sigma(P_{el}(x))$.

Kapitel 3

Die adiabatischen Operatoren

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels werden wir einen Eigenwert E_0 aus dem diskreten Spektrum von P^c auswählen und an diesen eine Stabilitätsvoraussetzung stellen, sehen wir, daß es Kurven von Eigenwerten von $P_{el}(x)$ gibt, die gegen E_0 konvergieren. Wir untersuchen die Projektionen $\Pi(x)$ und Π_0 auf die entsprechenden Eigenräume, was zu unserem Hauptergebnis, Proposition 3.1.8, führen wird.

Der zweite Teil zeigt, daß man die Eigenschaften der vorgenannten Projektionen dazu verwenden kann, den adiabatischen und nicht-adiabatischen Anteil des Operators P zu definieren und für diese einen geeigneten Definitionsbereich anzugeben.

3.1 Eigenschaften der Projektionen in \mathcal{H}_c

Die gebundenen Zustände des Systems der beiden getrennten Cluster werden beschrieben durch Eigenfunktionen zu Eigenwerten endlicher Multiplizität des Operators P^c . Im folgenden sei $E_0 \in \sigma_{disc}(P^c)$ ein solcher Eigenwert der Multiplizität $m \in \mathbb{N}$.

Nach Lemma 2.2.3 aus dem vorigen Abschnitt ist klar, daß es Kurven $\lambda : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ mit $\lambda(x) \in \sigma(P_{el}(x))$ gibt, die gegen dieses E_0 konvergieren. Die gesamte Multiplizität aller Kurven ist dabei nicht kleiner als m . Allerdings müssen diese $\lambda(x)$ im allgemeinen nicht notwendig selber Eigenwerte von $P_{el}(x)$ sein. Um dieses zu garantieren, muß man fordern, daß, zumindest für große x , E_0 hinreichend weit entfernt ist vom wesentlichen Spektrum der Operatoren $P_{el}(x)$. Nach den Überlegungen am Anfang des letzten Kapitels kann man dies dadurch erfüllen, indem man $E_0 < \liminf_{x \in \mathbb{R}^n} \Sigma_{ess}(x)$ wählt.¹

¹ Wegen $\inf_x \Sigma(x) > -\infty$ gibt es tatsächlich ein $E_0 < \liminf_{x \in \mathbb{R}^n} \Sigma_{ess}(x)$.

Damit ist dann bereits sichergestellt, daß $l \geq m$ Kurven $\lambda_1, \dots, \lambda_l$ mit $\lambda_i(x) \in \sigma_{disc}(P_{el}(x))$ für $|x| \geq R_0$ existieren, die gegen E_0 konvergieren. Dabei führen wir jede Kurve entsprechend der Vielfachheit des entsprechenden Eigenwertes auf.

Den Eigenwert E_0 nennen wir stabil², wenn es genau m Eigenwertkurven gibt, die gegen E_0 konvergieren.

Zusätzlich setzen wir voraus, daß die Eigenwerte $\lambda_i(x)$ vom Rest des Spektrums $\sigma(P_{el}(x))$ einen von x unabhängigen Abstand haben.

Diese Forderungen fassen wir in der folgenden Stabilitätsvoraussetzung zusammen.

Voraussetzung 3.1.1 (Stabilitätsvoraussetzung) :

E_0 sei ein Eigenwert von P^c mit endlicher Vielfachheit m .

Es gebe genau m Kurven $\lambda_1, \dots, \lambda_m \in C(\mathbb{R}^n, \mathbb{C})$ mit den Eigenschaften

$$\bigvee_{1 \leq j \leq m} \bigwedge_{x \in \mathbb{R}^n} \lambda_j(x) \in \sigma(P_{el}(x)),$$

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \lambda_j(x) = E_0, \quad (1 \leq j \leq m),$$

$$\bigvee_{\delta > 0} \bigwedge_{x \in \mathbb{R}^n} d(\{\lambda_1(x), \dots, \lambda_m(x)\}, \sigma(P_{el}(x)) \setminus \{\lambda_1(x), \dots, \lambda_m(x)\}) \geq \delta \quad . \quad (H_\delta)$$

In der nächsten Definition legen wir die entsprechenden Eigenräume und zugehörigen Spektralprojektionen fest.

Definiton 3.1.2 :

Wir setzen

$$\mathcal{E}(E_0) := \left\{ \phi \in \mathcal{D}(P^c) \mid P^c \phi = E_0 \phi \right\}, \quad (3.1)$$

$$\mathcal{E}(x) := \left\{ \phi \in \mathcal{D}(P_{el}(x)) \mid \bigvee_{1 \leq j \leq m} P_{el}(x) \phi = \lambda_j(x) \phi \right\} \quad (x \in \mathbb{R}^n). \quad (3.2)$$

Die orthogonale Projektion auf $\mathcal{E}(E_0)$ beziehungsweise $\mathcal{E}(x)$ bezeichnen wir mit Π_0 und $\Pi(x)$.

Da die Eigenwertkurven λ_i gegen E_0 konvergieren und deshalb auch die Abstände $|\lambda_i(x) - \lambda_i(\tilde{x})|$ für $x, \tilde{x} \rightarrow \infty$ gegen Null gehen, erwartet man, daß sich die Projektionen $\Pi(x)$ für große $|x|$ und Π_0 als Linienintegral der Resolventen über einen gemeinsamen Weg Γ_0 schreiben lassen. Die Eigenschaft (H_δ) aus der Stabilitätshypothese stellt sicher, daß das in der Tat möglich ist.

²Dies entspricht der Definition eines stabilen Eigenwertes in [K], wie sie auf den Seiten 437/438 gemacht wird

Lemma 3.1.3 :

Es existieren ein $R_0 > 0$ und ein einfach geschlossener Weg $\Gamma_0 \subset C$ mit der Eigenschaft

$$\begin{aligned}\Pi(x) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_0} (\zeta - P_{el}(x))^{-1} d\zeta \quad (|x| \geq R_0) \\ \Pi_0 &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_0} (\zeta - P^c)^{-1} d\zeta\end{aligned}\tag{3.3}$$

Beweis:

Wir wählen ein δ gemäß (H_δ) so, daß auch der Eigenwert E_0 vom restlichen Spektrum von P^c mindestens den Abstand δ hat,

$$d(E_0, \sigma(P^c) \setminus \{E_0\}) \geq \delta \quad .$$

Dann setzen wir

$$\Gamma_0 := \left\{ \zeta \mid \zeta \in C, |\zeta - E_0| = \frac{\delta}{2} \right\} \quad .$$

Wegen der Limites $\lim_{|x| \rightarrow \infty} \lambda_i(x) = E_0$ ($1 \leq i \leq m$) existiert ein $R_0 > 0$ mit der Eigenschaft

$$\max_{1 \leq i \leq m} |\lambda_i(x) - E_0| < \frac{\delta}{4} \quad (|x| > R_0).$$

Es seien nun $|x| > R_0$ und $z \in \Gamma_0$ beliebig.

Für $\tilde{\zeta} \in \sigma(P_{el}(x)) \setminus \{\lambda_1(x), \dots, \lambda_m(x)\}$ erhalten wir

$$\begin{aligned}|\zeta - \tilde{\zeta}| &= |\zeta - \lambda_i(x) + \lambda_i(x) - \tilde{\zeta}| \\ &\geq |\tilde{\zeta} - \lambda_i(x)| - |\zeta - \lambda_i(x)| \\ &\stackrel{\text{Stabilitätsvoraussetzung}}{\geq} \delta - |\zeta - \lambda_i(x)| \\ &\geq \delta - (|z - E_0| + |E_0 - \lambda_i(x)|) \\ &\geq \delta - \left(\frac{\delta}{2} + \frac{\delta}{4}\right) \\ &= \frac{\delta}{4},\end{aligned}$$

und $\tilde{\zeta} \in \{\lambda_1(x), \dots, \lambda_m(x)\}$ impliziert

$$\begin{aligned}|\zeta - \tilde{\zeta}| &= |\zeta - E_0 + E_0 - \tilde{\zeta}| \\ &\geq |\zeta - E_0| - |E_0 - \tilde{\zeta}| \\ &\geq \frac{\delta}{2} - \frac{\delta}{4} \\ &= \frac{\delta}{4} \quad .\end{aligned}$$

Beides zusammen liefert

$$d\left(\Gamma_0, \sigma(P_{el}(x))\right) \geq \frac{\delta}{4}, \quad (3.4)$$

was die behauptete Integraldarstellung der Projektionen in (3.3) beweist. \blacksquare

Im vorigen Kapitel konnten wir zeigen, daß die Resolventen $(\zeta - P_{el}(x))^{-1}$ im starken Sinn gegen $(\zeta - P^c)^{-1}$ konvergieren für $|x| \rightarrow \infty$. Nach dem eben gezeigten Lemma gilt dann auch

$$s - \lim_{|x| \rightarrow \infty} \Pi(x) = \Pi_0,$$

da man in der Integraldarstellung (3.3) über das Kompaktum Γ_0 integriert und deswegen Limesbildung und Integration vertauscht werden dürfen.

Aus der Stabilität des Eigenwertes E_0 folgt sogar, daß dieser Limes auch in der Operatornorm gültig bleibt.

Lemma 3.1.4 :

Es gelte (D_ρ) . Dann ist

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \|\Pi(x) - \Pi_0\| = 0 \quad . \quad (3.5)$$

Beweis:

Wie in der letzten Fußnote bereits erwähnt garantiert die Stabilitätsvoraussetzung, daß E_0 ein stabiler Eigenwert im Sinne von [K] ist (siehe hierzu die Seiten 437 und 438).

Da $P_{el}(x)$ und P^c selbstadjungiert sind, folgt nach der zuvor gemachten Bemerkung

$$s - \lim_{|x| \rightarrow \infty} \Pi(x)^* = \Pi_0^* \quad .$$

Dieses erlaubt, Lemma VIII.1.24 aus [K] anzuwenden, welches gerade unsere Behauptung liefert. \blacksquare

Wir werden in Proposition 3.1.8 ein noch viel stärkeres Resultat beweisen, indem wir über den Ausdruck $\|\partial_x^\alpha(\Pi(x) - \Pi_0)\|$ sogar eine quantitative Aussage machen.

Zuvor müssen wir aber die Differenzierbarkeit der Projektorenfamilie $\{\Pi(x) | x \in \mathbb{R}^n\}$ nachweisen, was im nächsten Lemma geschieht.

Lemma 3.1.5 :

Unter der Voraussetzung (D_ρ) sind die Projektionen $\{\Pi(x) | x \in \mathbb{R}^n\}$ in x beliebig oft differenzierbar. Es gilt

$$\Pi(\cdot) \in C^\infty\left(\mathbb{R}^n; \mathcal{B}(\mathcal{H}_c)\right) \quad . \quad (3.6)$$

Beweis:

Es sei $x_0 \in \mathbb{R}^n$ beliebig. Da alle Eigenwertkurven λ_i stetig sind, existiert eine offene Umgebung U_{x_0} von x_0 und ein Weg $\Gamma(x_0)$ derart, daß gilt

$$\Pi(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma(x_0)} (\zeta - P_{el}(x))^{-1} d\zeta \quad (x \in U_{x_0}).$$

Nach Proposition 2.2.1 ist $R_\zeta(\cdot) = (\zeta - P_{el}(\cdot))$ beliebig oft differenzierbar für alle $\zeta \in \Gamma(x_0)$.

Da $\Gamma(x_0)$ kompakt ist, ergibt sich die Behauptung aus der Tatsache, daß man Integration und Differentiation miteinander vertauschen kann. ■

Bevor wir zur zentralen Proposition kommen, notieren wir noch eine Eigenschaft der Funktionen aus $\mathcal{E}(E_0)$, die beim Beweis dieser Proposition eine wichtige Rolle spielt.

Wie wir in Lemma 2.1.7 gezeigt haben, ist das wesentliche Spektrum von P^c ein abgeschlossenes Intervall der Form $[\Sigma_{ess}^c, \infty[$, so daß der Eigenwert E_0 unterhalb des gesamten wesentlichen Spektrums liegt. In der berühmten Arbeit [Ag] zeigt Agmon, daß Eigenfunktionen zu derartigen Eigenwerten exponentiell abfallen.

Lemma 3.1.6 :

Unter der Voraussetzung (D_ρ) gilt

$$\bigwedge_{\phi \in \mathcal{E}(E_0)} \bigvee_{s_0 > 0} \bigwedge_{s \leq s_0} e^{s\langle \cdot \rangle} \phi \in L^2(\mathbb{R}_{\tilde{y}}^{n(N+1)})$$

Beweis:

Die Aussage entspricht fast Theorem 4.1 aus [Ag]. Es tritt dort allerdings die Abstandfunktion $\rho(\tilde{y})$ im Exponenten der Exponentialfunktion auf.

Beachten wir aber, daß der Differentialoperator P^c konstante Koeffizienten hat, so sieht man ein, daß die Abstandfunktion $\rho(\tilde{y})$ von der Ordnung $|\tilde{y}|$ ist. Wegen $\langle \tilde{y} \rangle \sim |\tilde{y}|$ für $|\tilde{y}| \rightarrow \infty$ gilt damit auch die Behauptung unseres Lemmas. ■

Wir bemerken weiter, daß man wegen der Endlichdimensionalität von $\mathcal{E}(E_0)$, das s_0 in obigem Lemma sogar global für alle Funktionen des Eigenraums wählen kann. Es existiert demnach ein \tilde{s}_0 mit der Eigenschaft

$$e^{\tilde{s}_0 \langle \cdot \rangle} \phi \in L^2(\mathbb{R}_{\tilde{y}}^{n(N+1)}) \quad (\phi \in \mathcal{E}(E_0)) \quad .$$

Wir werden dieses Resultat in Form des nächsten Korollars verwenden.

Korollar 3.1.7 :

Es gilt

$$\bigwedge_{\tau \geq 0} \langle \cdot \rangle^\tau \Pi_0 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_c) \quad .$$

Beweis:

Für beliebiges $\phi \in L^2(\mathbb{R}^{n(N+1)})$ und $\tau \geq 0$ ist wegen des exponentiellen Abfalles der Eigenfunktionen gewiß

$$\|\langle \cdot \rangle^\tau \Pi_0 \phi\|_{\mathcal{H}_c} < \infty,$$

so daß die genannten Operatoren wirklich in $\mathcal{H}_c = L^2(\mathbb{R}^{n(N+1)})$ hinein abbilden.

Da die Operatoren $\|\langle \cdot \rangle^\tau \Pi_0$ wegen $\dim(\mathcal{E}(E_0)) = m$ endlichdimensional sind, folgt die Stetigkeit unmittelbar. ■

Wir kommen nunmehr zur zentralen Proposition dieser Arbeit, in der das asymptotische Verhalten der Projektionen $\Pi(x)$ in x quantitativ beschrieben wird. Die hier gemachten Aussagen sind wesentliche Grundlage dafür, daß man den adiabatischen Operator überhaupt sinnvoll definieren kann.

Proposition 3.1.8 :

Unter der Voraussetzung (D_ρ) gelten folgende Abschätzungen:

$$\bigwedge_{\alpha \in N_0^n} \bigvee_{d_\alpha > 0} \bigwedge_{x \in \mathbb{R}^n} \|\partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0)\| \leq d_\alpha \langle x \rangle^{-\rho - |\alpha|}, \quad (3.7)$$

$$\bigwedge_{\alpha \in N_0^n} \bigvee_{d_\alpha > 0} \bigwedge_{x \in \mathbb{R}^n} \|(\partial_x^\alpha I_c)(x) \Pi_0\| + \|(\partial_x^\alpha I_c)(x) \Pi(x)\| \leq d_\alpha \langle x \rangle^{-\rho - |\alpha|}, \quad (3.8)$$

$$\bigwedge_{x \in \mathbb{R}^n} \|\Pi(x) P_{el}(x) \Pi(x) - E_0 \Pi(x)\| = O(\langle x \rangle^{-\rho}) \quad . \quad (3.9)$$

Beweis:

Beim Beweis orientieren wir uns an [Je] (Seiten 141 ff), wo diese Aussagen mit einer Uniformität im Parameter h bewiesen werden. Der Beweis ist allerdings beim Nachweis der Abschätzung (3.7) (siehe Seite 143) fehlerhaft. Die Behauptungen werden in der Reihenfolge (3.8), (3.7) und (3.9) bewiesen.

(3.8) zeigen wir getrennt für beide Summanden auf der linken Seite, zeigen also, daß mit jeweils geeigneten d_α gilt

$$\|(\partial_x^\alpha I_c)(x) \Pi_0\| \leq d_\alpha \langle x \rangle^{-\rho - |\alpha|} \quad (3.10)$$

sowie

$$\|(\partial_x^\alpha I_c)(x)\Pi(x)\| \leq d_\alpha \langle x \rangle^{-\rho-|\alpha|} \quad . \quad (3.11)$$

Da die Potentiale inklusive ihrer Ableitungen stetig sind und auf kompakten Mengen der Form $\{|x| \leq R\}$ daher auch beschränkt, genügt es, diese Ungleichungen für große $|x|$ nachzuweisen.

Es sei dazu $\alpha \in \mathbb{N}_0^n$ beliebig. Der Clou des Beweises besteht darin, an geeigneten Stellen die Identität in Form des Operators $\langle \cdot \rangle^{-\tau} \langle \cdot \rangle^\tau$ einzufügen.

Wir schreiben

$$(\partial_x^\alpha I_c)(x)\Pi_0 = (\partial_x^\alpha I_c)(x)\langle \cdot \rangle^{-|\alpha|-\rho} \langle \cdot \rangle^{|\alpha|+\rho} \Pi_0 \quad .$$

Nach Lemma 2.1.8 ist der Operator $(\partial_x^\alpha I_c)(x)\langle \cdot \rangle^{-|\alpha|-\rho}$ beschränkt und von der Ordnung $O(\langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho})$. Der Operator $\langle \cdot \rangle^{|\alpha|+\rho} \Pi_0$ ist wegen des exponentiellen Abfalls der Eigenfunktionen ebenfalls stetig (siehe Korollar 3.1.7), so daß mit geeignetem $d_\alpha > 0$ gilt

$$\|(\partial_x^\alpha I_c)(x)\Pi_0\| \leq d_\alpha \langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho}$$

und Gleichung (3.10) bereits bewiesen ist.

Der Beweis von (3.11) ist ein wenig aufwendiger. Ähnlich wie eben schreiben wir

$$(\partial_x^\alpha I_c)(x)\Pi(x)\Pi_0 = \underbrace{(\partial_x^\alpha I_c)(x)\langle \cdot \rangle^{-|\alpha|-\rho}}_{=O(\langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho})} \underbrace{\langle \cdot \rangle^{|\alpha|+\rho} \Pi(x)\langle \cdot \rangle^{-|\alpha|-\rho}}_{\substack{\in \mathcal{B}(\mathcal{H}_c) \\ \text{Lemma A.5.3}}} \underbrace{\langle \cdot \rangle^{|\alpha|+\rho} \Pi_0}_{\in \mathcal{B}(\mathcal{H}_c)} \quad .$$

Im Anhang (siehe Korollar A.5.3) zeigen wir, daß die Operatoren $\langle \cdot \rangle^\tau \Pi(x) \langle \cdot \rangle^{-\tau}$ für beliebiges $\tau \geq 0$ beschränkt sind mit einer von x unabhängigen Schranke. Mit der gleichen Argumentation wie beim Beweis von (3.10) ist daher

$$\|(\partial_x^\alpha I_c)(x)\Pi(x)\Pi_0\| \leq d_\alpha \langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho} \quad . \quad (3.12)$$

Damit können wir (3.11) wie folgt einsehen:

Wegen der schon gezeigten Normkonvergenz der Projektionen (Lemma 3.1.4), existiert $R_0 > 0$ derart, daß $\|\Pi(x) - \Pi_0\| \leq \frac{1}{2}$ für $|x| \geq R_0$. Aus der Identität

$$(\partial_x^\alpha I_c)(x)\Pi(x)(\Pi(x) - \Pi_0) = (\partial_x^\alpha I_c)(x)\Pi(x) - (\partial_x^\alpha I_c)(x)\Pi(x)\Pi_0$$

erhält man mit Hilfe der umgekehrten Dreiecksungleichung für $|x| \geq R_0$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|(\partial_x^\alpha I_c)(x)\Pi(x)\| &\geq \|(\partial_x^\alpha I_c)(x)\Pi(x) - (\partial_x^\alpha I_c)(x)\Pi(x)\Pi_0\| \\ &\geq \|(\partial_x^\alpha I_c)(x)\Pi(x)\| - \|(\partial_x^\alpha I_c)(x)\Pi(x)\Pi_0\|, \end{aligned}$$

also

$$\|(\partial_x^\alpha I_c)(x)\Pi(x)\| \leq 2\|(\partial_x^\alpha I_c)(x)\Pi(x)\Pi_0\| \quad .$$

Zusammen mit (3.12) folgt

$$\|(\partial_x^\alpha I_c)(x)\Pi(x)\| = O\left(\langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho}\right),$$

und damit ist auch der zweite Teil der Behauptung (3.8) bewiesen.

Zum Beweis von (3.7) bemerken wir zunächst wieder, daß es ausreichend ist, den Beweis für hinreichend große $|x|$ zu führen, denn wegen der bereits bewiesenen Differenzierbarkeit der $\Pi(x)$ sind alle Ausdrücke des Typs $\partial_x^\alpha(\Pi(x) - \Pi_0)$ auf Mengen der Form $\{|x| \leq R\}$ beschränkt.

Wir zeigen hier im Hauptteil nicht ganz die Behauptung aus (3.7), sondern lediglich

$$\|\partial_x^\alpha(\Pi(x) - \Pi_0)\Pi_0\| \leq d_\alpha \langle x \rangle^{-\rho-|\alpha|} . \quad (3.13)$$

Daß sich daraus die eigentliche Behauptung (3.7) beweisen läßt, zeigen wir im Anhang (siehe Lemma A.6.1) mittels einer Vollständigen Induktion. Auch der Beweis von (3.13) ist noch ausreichend lang.

Es sei dazu $|x|$ so groß, daß wir die Projektionen als Integral über die Resolvente entlang des Weges Γ_0 aus Lemma 3.1.3 schreiben können. Wir notieren dabei, daß für $\zeta \in \Gamma_0$ die Norm der Resolvente gleichmäßig in x und ζ beschränkt ist, denn es gilt

$$\begin{aligned} \|R_\zeta(x)\| &\leq \frac{4}{\delta} \quad (x \geq R_0), \\ \|R_\zeta\| &\leq \frac{2}{\delta} . \end{aligned}$$

Der in (3.13) auftretende Operator läßt sich nun wie folgt als Integral darstellen:

$$\begin{aligned} \partial_x^\alpha(\Pi(x) - \Pi_0)\Pi_0 &= \partial_x^\alpha \left[\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_0} [(\zeta - P_{el}(x))^{-1} - (z - P^c)^{-1}] d\zeta \right] \Pi_0 \\ &= \frac{1}{2\pi i} \partial_x^\alpha \int_{\Gamma_0} R_\zeta(x) I_c(x) R_\zeta \Pi_0 d\zeta \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_0} \partial_x^\alpha [R_\zeta(x) I_c(x)] R_\zeta \Pi_0 d\zeta \\ &\stackrel{\text{Leibnizregel}}{=} \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_0} \sum_{\beta \leq \alpha} c_{\alpha\beta} \partial_x^\beta R_\zeta(x) \partial_x^{\alpha-\beta} I_c(x) R_\zeta \Pi_0 d\zeta \\ &= \frac{1}{2\pi i} \sum_{\beta \leq \alpha} c_{\alpha\beta} \int_{\Gamma_0} \partial_x^\beta R_\zeta(x) \partial_x^{\alpha-\beta} I_c(x) \Pi_0 R_\zeta d\zeta . \end{aligned}$$

Integration und Differentiation durften dabei vertauscht werden, weil die auftretenden Funktionen beliebig oft differenzierbar sind und über ein Kompaktum integriert wird. Weiterhin haben wir ausgenützt, daß R_ζ und Π_0 (als Integral über die R_ζ)

miteinander kommutieren.

Die Gültigkeit von (3.13) ist dann nachgewiesen, wenn wir zeigen können

$$\int_{\Gamma_0} (\partial_x^\beta R_\zeta)(x) (\partial_x^{\alpha-\beta} I_c)(x) \Pi_0 R_\zeta d\zeta = O(\langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho}) \quad (\beta \leq \alpha). \quad (3.14)$$

Wir müssen dafür die Fälle $\beta = 0$ und $\beta > 0$ getrennt behandeln.

Für $\beta = 0$ folgt, wenn wir mit $L(\Gamma_0)$ die Länge des Integrationsweges bezeichnen,

$$\begin{aligned} \left\| \int_{\Gamma_0} R_\zeta(x) (\partial_x^\alpha I_c)(x) \Pi_0 R_\zeta d\zeta \right\| &\leq \int_{\Gamma_0} \|R_\zeta(x) (\partial_x^\alpha I_c)(x) \Pi_0 R_\zeta\| d\zeta \\ &\leq L(\Gamma_0) \sup_{\zeta \in \Gamma_0} \|R_\zeta(x)\| \|(\partial_x^\alpha I_c)(x) \Pi_0\| \|R_\zeta\| \\ &\stackrel{(3.8)}{\leq} L(\Gamma_0) \frac{8}{\delta^2} d_\alpha \langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho}, \end{aligned}$$

also umgehend die in (3.14) behauptete Ordnung.

Für $|\beta| > 0$ verwenden wir die Darstellung von $(\partial_x^\beta R_\zeta)(x)$ aus (2.8). Das Integral auf der linken Seite von (3.14) wird so zu einer (endlichen) Summe der Form

$$\sum_{l=1}^{|\beta|} \sum_{\substack{\gamma_1 + \dots + \gamma_l = \beta \\ 0 \neq \gamma_i \in \mathbb{N}_0^n}} \int_{\Gamma_0} R_\zeta(x) (\partial_x^{\gamma_1} I_c)(x) R_\zeta(x) \cdot \dots \cdot R_\zeta(x) (\partial_x^{\gamma_l} I_c)(x) R_\zeta(x) (\partial_x^{\alpha-\beta} I_c)(x) \Pi_0 R_\zeta d\zeta, \quad (3.15)$$

und es reicht zu zeigen, daß die einzelnen Summanden von der Ordnung $O(\langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho})$ sind.

Dazu betrachten wir einen beliebigen der auftretenden Integranden und benutzen erneut die Methode, die schon beim Beweis von (3.8) verwendet wurde.

An geeigneten Stellen fügen wir die Identität in der Form $\langle \cdot \rangle^\tau \langle \cdot \rangle^{-\tau}$ mit günstigen τ ein und erhalten

$$\begin{aligned} R_\zeta(x) (\partial_x^{\gamma_1} I_c)(x) R_\zeta(x) \cdot \dots \cdot R_\zeta(x) (\partial_x^{\gamma_l} I_c)(x) R_\zeta(x) (\partial_x^{\alpha-\beta} I_c)(x) \Pi_0 R_\zeta = \\ R_\zeta(x) (\partial_x^{\gamma_1} I_c)(x) \langle \cdot \rangle^{-|\gamma_1|-\rho} \langle \cdot \rangle^{|\gamma_1|+\rho} R_\zeta(x) \langle \cdot \rangle^{-|\gamma_1|-\rho} \cdot \\ \cdot (\partial_x^{\gamma_2} I_c)(x) \langle \cdot \rangle^{-|\gamma_2|-\rho} \langle \cdot \rangle^{|\gamma_1|+|\gamma_2|+2\rho} R_\zeta(x) \langle \cdot \rangle^{-|\gamma_1|+|\gamma_2|-2\rho} \cdot \\ \cdot \dots \cdot \\ \cdot \dots \cdot \\ \cdot \dots \cdot \\ \cdot (\partial_x^{\gamma_l} I_c)(x) \langle \cdot \rangle^{-|\gamma_l|-\rho} \langle \cdot \rangle^{|\gamma_1|+\dots+|\gamma_l|+l\rho} R_\zeta(x) \langle \cdot \rangle^{-|\gamma_1|-\dots-|\gamma_l|-l\rho} \cdot \\ \cdot (\partial_x^{\alpha-\beta} I_c)(x) \langle \cdot \rangle^{-|\alpha-\beta|-\rho} \langle \cdot \rangle^{|\gamma_1|+\dots+|\gamma_l|+|\alpha-\beta|+(l+1)\rho} \Pi_0 \end{aligned}$$

Dabei sind die $(\partial_x^{\gamma_i} I_c)(x) \langle \cdot \rangle^{-|\gamma_i|-\rho}$ wieder beschränkt und von der Ordnung $O(\langle x \rangle^{-|\gamma_i|-\rho})$. Diese liefern in der Summe das geforderte Abfallverhalten.

Für $1 \leq \tilde{l} \leq l$ sind die Operatoren $\langle \cdot \rangle^{|\gamma_1|+\dots+|\gamma_{\tilde{l}}|+\tilde{l}\rho} R_\zeta(x) \langle \cdot \rangle^{-|\gamma_1|-\dots-|\gamma_{\tilde{l}}|-\tilde{l}\rho}$ gleichmäßig beschränkt in $\zeta \in \Gamma_0$ und $|x| \geq R_0$ wie wir im Anhang in Proposition A.5.2 zeigen. Außerdem ist wieder $\langle \cdot \rangle^{|\gamma_1|+\dots+|\gamma_l|+|\alpha-\beta|+(l+1)\rho} \Pi_0$ beschränkt.

An dieser Stelle wird auch klar, warum wir den Beweis so nicht direkt für $\partial_x^\alpha(\Pi(x) - \Pi_0)$ führen können. Auf der rechten Seite des Integranden entsteht durch das Einfügen der Identitäten der Multiplikationsoperator $\langle \cdot \rangle^{|\gamma_1|+\dots+|\gamma_l|+|\alpha-\beta|+(l+1)\rho}$, welcher gar nicht auf ganz \mathcal{H}_c definiert ist. Erst durch das Anhängen der Projektion Π_0 erhalten wir hier einen beschränkten Operator.

Fassen wir die Normen der auftretenden Operatoren $\langle \cdot \rangle^\tau R_\zeta(x) \langle \cdot \rangle^{-\tau}$ und $\langle \cdot \rangle^{|\gamma_1|+\dots+|\gamma_l|+|\alpha-\beta|+(l+1)\rho} \Pi_0$ zu einer Konstanten $d > 0$ zusammen, so ergibt sich schließlich

$$\begin{aligned} & \left\| \int_{\Gamma_0} R_\zeta(x) (\partial_x^{\gamma_1} I_c)(x) R_\zeta(x) \cdot \dots \cdot R_\zeta(x) (\partial_x^{\gamma_l} I_c)(x) R_\zeta(x) (\partial_x^{\alpha-\beta} I_c)(x) \Pi_0 R_\zeta d\zeta \right\| \\ & \leq dL(\Gamma_0) \langle x \rangle^{-|\gamma_1|-\rho} \cdot \dots \cdot \langle x \rangle^{-|\gamma_l|-\rho} \langle x \rangle^{-|\alpha-\beta|-\rho} \\ & = dL(\Gamma_0) \langle x \rangle^{-|\gamma_1|-\dots-|\gamma_l|+|\alpha-\beta|-(l+1)\rho} \\ & = dL(\Gamma_0) \langle x \rangle^{-|\alpha|-(l+1)\rho} \quad . \end{aligned}$$

Damit ist (3.14) auch für $|\beta| > 0$ bewiesen und der Beweis abgeschlossen.

Zum Beweis von Aussage (3.9) rechnen wir zunächst ohne Norm und erhalten

$$\begin{aligned} \Pi(x) P_{el}(x) \Pi(x) - \Pi(x) E_0 &= \Pi(x) P_{el}(x) \Pi(x) - \Pi(x) P^c \Pi_0 \\ &= \Pi(x) P_{el}(x) (\Pi(x) - \Pi_0) + \Pi(x) (P_{el}(x) - P^c) \Pi_0 \\ &= \Pi(x) P_{el}(x) (\Pi(x) - \Pi_0) + \Pi(x) I_c(x) \Pi_0 \quad . \end{aligned}$$

Auf die Ausdrücke $\Pi(x) - \Pi_0$ und $I_c(x) \Pi_0$ wenden wir die bereits bewiesenen Aussagen (3.7) und (3.8), jeweils für $\alpha = 0$, an und erhalten

$$\begin{aligned} \|\Pi(x) - \Pi_0\| &= O(\langle x \rangle^{-\rho}) \\ \|I_c(x) \Pi_0\| &= O(\langle x \rangle^{-\rho}) \quad . \end{aligned}$$

Beachten wir außerdem $\|\Pi(x)\| \leq 1$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$ und die Tatsache, daß wegen $\Pi(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_0} R_\zeta(x) d\zeta$ gilt,

$$\|\Pi(x) P_{el}(x)\| \leq c \quad (x \in \mathbb{R}^n),$$

dann folgt

$$\begin{aligned} \|\Pi(x) P_{el}(x) \Pi(x) - \Pi(x) E_0\| &\leq \|\Pi(x) P_{el}(x)\| \|\Pi(x) - \Pi_0\| + \|\Pi(x)\| \|I_c(x) \Pi_0\| \\ &= O(\langle x \rangle^{-\rho}) \quad . \end{aligned}$$

Dies zeigt die Gültigkeit von (3.9). ■

Wendet man die letzte Aussage der Proposition auf die Eigenfunktionen $\phi_j(x)$ zum Eigenwert $\lambda_j(x)$ an, so bekommt man das schöne Resultat

$$|\lambda_j(x) - E_0| = O(\langle x \rangle^{-\rho}), \quad j = 1, 2, \dots, m \quad , \quad (3.16)$$

welches die Konvergenzrate der λ_j gegen E_0 quantifiziert.

3.2 Definition des adiabatischen Operators

Zur Definition der adiabatischen Operatoren kehren wir in den Ausgangsraum $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}_{xyz}^{n(N+2)})$ zurück.

Die lediglich im Raum \mathcal{H}_c der clusterinternen Zustände agierenden Projektionen Π_0 und $\Pi(x)$ induzieren analog zu den Fasern $P_{el}(x)$ des elektronischen Operators über die direkte Integralbildung beschränkte Operatoren in \mathcal{H} :³

$$\Pi := \int_{\mathbb{R}^n}^{\oplus} \Pi(x) dx \quad (3.17)$$

$$\Pi_0 := \int_{\mathbb{R}^n}^{\oplus} \Pi_0 dx \quad (3.18)$$

Die Wirkung von Π auf eine Funktion $\psi \in \mathcal{H}$ ist dabei gegeben durch

$$\Pi\psi(x, y, z) = \left(\Pi(x)\psi(x, \cdot) \right)(y, z) \quad .$$

Auf diese Weise sieht man ein, daß

$$\begin{aligned} \Pi\Pi\psi(x, y, z) &= \left(\Pi(x)\Pi(x)\psi(x, \cdot) \right)(y, z) \\ &= \left(\Pi(x)\psi(x, \cdot) \right)(y, z) \\ &= \Pi\psi(x, y, z), \end{aligned}$$

und daher $\Pi \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ auch wieder eine Projektion ist. Entsprechendes gilt für $\Pi_0 \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Ebenso folgen $\Pi^* = \Pi$ und $\Pi_0^* = \Pi_0$.

³Wir unterscheiden dabei in der Schreibweise nicht zwischen der Projektion Π_0 in \mathcal{H}_c und der induzierten Projektion in \mathcal{H}

Per Konstruktion war Π_0 als Operator in \mathcal{H}_c endlichdimensional. Für die induzierte Projektion in \mathcal{H} ist dagegen

$$\mathcal{R}(\Pi_0) = L^2(\mathbb{R}_x^n) \otimes \mathcal{E}(E_0),$$

der Wertebereich also gewiß nicht mehr endlichdimensional.

Allerdings läßt sich die folgende Proposition beweisen, die wesentlich auf der Endlichdimensionalität von Π_0 beziehungsweise Π in \mathcal{H}_c beruht.

Proposition 3.2.1 :

Für $\mu > 0$ sind die aus $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ stammenden Operatoren

$$\langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \Pi_0 \quad \text{und} \quad \langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \Pi$$

kompakt.

Das gleiche gilt für die Operatoren

$$\langle x \rangle^{-\mu} \nabla_x (-\Delta_x + i)^{-1} \Pi_0 \quad \text{und} \quad \langle x \rangle^{-\mu} \nabla_x (-\Delta_x + i)^{-1} \Pi$$

aus $\mathcal{B}(\mathcal{H}; \mathcal{H}^n)$.

Beweis:

Grundlage des Beweises ist die Tatsache, daß die Operatoren

$\langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \in \mathcal{B}(L^2(\mathbb{R}_x^n))$ und $\langle x \rangle^{-\mu} \nabla_x (-\Delta_x + i)^{-1} \in \mathcal{B}(L^2(\mathbb{R}_x^n); (L^2(\mathbb{R}_x^n))^n)$ kompakt sind.

Diese Resultate finden sich in [RS3], das erste läßt sich auch aus [HiSi], Theorem 14.9, ableiten.

Wir beweisen hier lediglich die Aussagen des ersten Teils, jene für die Operatoren $\langle x \rangle^{-\mu} \nabla_x (-\Delta_x + i)^{-1} \Pi_0$ und $\langle x \rangle^{-\mu} \nabla_x (-\Delta_x + i)^{-1} \Pi$ werden aber analog bewiesen. Zum Beweis der Proposition nehmen wir eine Folge $(\psi_p)_{p \in \mathbb{N}}$ aus \mathcal{H} mit der Eigenschaft

$$w - \lim_{p \rightarrow \infty} \psi_p = 0,$$

und müssen dann zeigen

$$s - \lim_{p \rightarrow \infty} \langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \Pi_0 \psi_p = 0, \quad (3.19)$$

$$s - \lim_{p \rightarrow \infty} \langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \Pi \psi_p = 0 \quad . \quad (3.20)$$

Mit $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\tilde{y}}$ bezeichnen wir das Skalarprodukt in $L^2(\mathbb{R}_{\tilde{y}}^{n(N+1)})$.

Um die erste Behauptung zu zeigen wählen wir eine Orthonormalbasis $(\phi_j)_{1 \leq j \leq m}$ von $\mathcal{E}(E_0)$. Dann ist

$$\Pi_0 \psi_p(x, y, z) = \sum_{j=1}^m \underbrace{\langle \phi_j, \psi_p(x, \cdot) \rangle_{\tilde{y}}}_{=: \psi_{p,j}} \phi_j(\tilde{y}),$$

und es reicht aus zu zeigen, daß $\langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \psi_{p,j}$ für $j = 1, \dots, m$ gegen Null konvergiert im Sinne der Norm von $L^2(\mathbb{R}^{n(N+2)})$.

Es ist zunächst

$$\langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \psi_{p,j} = \phi_j(\tilde{y}) \langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \langle \phi_j, \psi_p(x, \cdot) \rangle_{\tilde{y}} \quad . \quad (3.21)$$

Für beliebiges $\tilde{\phi} \in L^2(\mathbb{R}_x^n)$ gilt wegen $\phi_j \in L^2(\mathbb{R}^{n(N+1)})$

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\phi}, \langle \phi_j, \psi_p(x, \cdot) \rangle_{\tilde{y}} \rangle_x &= \int_{\mathbb{R}^n} \tilde{\phi}(x) \langle \phi_j, \psi_p(x, \cdot) \rangle_{\tilde{y}} dx \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \tilde{\phi}(x) \left(\int_{\mathbb{R}^{n(N+1)}} \phi_j(\tilde{y}) \psi_p(x, y, z) d\tilde{y} \right) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}^{n(N+2)}} \tilde{\phi}(x) \phi_j(\tilde{y}) \psi_p(x, y, z) dx d\tilde{y} \\ &\rightarrow 0 \quad (p \rightarrow \infty), \end{aligned}$$

so daß

$$w - \lim_{p \rightarrow \infty} \langle \phi_j, \psi_p(x, \cdot) \rangle_{\tilde{y}} = 0$$

in $L^2(\mathbb{R}_x^n)$.

Wegen der Kompaktheit der $\langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1}$ in diesem Raum erhalten wir aus (3.21)

$$\begin{aligned} s - \lim_{p \rightarrow \infty} \langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \psi_{p,j} &= \phi_j \left(s - \lim_{p \rightarrow \infty} \langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \langle \phi_j, \psi_p(x, \cdot) \rangle_{\tilde{y}} \right) \\ &= 0 \quad . \end{aligned}$$

Damit ist die erste Behauptung bewiesen.

Der Beweis von (3.20) verläuft ähnlich, ist allerdings technisch etwas aufwendiger.

Wir verwenden zunächst wieder die ϕ_j aus dem ersten Teil und setzen $\phi_j(x) := \Pi(x) \phi_j$. Man erhält

$$\begin{aligned} \langle \phi_j(x), \phi_k(x) \rangle_{\tilde{y}} &= \langle \Pi(x) \phi_j, \Pi(x) \phi_k \rangle_{\tilde{y}} \\ &= \langle \Pi(x) \Pi_0 \phi_j, \Pi_0 \phi_k \rangle_{\tilde{y}} \\ &= \delta_{jk} + \langle (\Pi(x) - \Pi_0) \Pi_0 \phi_j, \Pi_0 \phi_k \rangle_{\tilde{y}} \\ &\stackrel{Prop. 3.1.8}{=} \delta_{jk} + O(\langle x \rangle^{-\rho}) \quad (j, k = 1, \dots, m). \end{aligned}$$

Demnach existiert $R_0 > 0$, so daß für $|x| \geq R_0$ die Familie $\{\phi_j(x) | j = 1, \dots, m\}$ eine Basis von $\mathcal{R}(\Pi(x))$ ist. Mit $\{\tilde{\phi}_j(x) | j = 1, \dots, m\}$ bezeichnen wir die dazu duale Basis.

Weiter sei $\chi_\infty \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ eine Funktion mit Träger in $\{|x| > R_0\}$ und $\chi_\infty(x) = 1$ für $|x| \geq R_1$ mit einem $R_1 > R_0$.

Es gilt für $j = 1, \dots, m$ die Identität

$$\begin{aligned}
& (-\Delta_x + i)^{-1} \chi_\infty(x) \phi_j(x) \\
&= \chi_\infty(x) \phi_j(x) (-\Delta_x + i)^{-1} + (-\Delta_x + i)^{-1} \left[-\Delta_x + i, \chi_\infty(x) \phi_j(x) \right] (-\Delta_x + i)^{-1} \\
&= \chi_\infty(x) \phi_j(x) (-\Delta_x + i)^{-1} + (-\Delta_x + i)^{-1} \left[-\Delta_x, \chi_\infty(x) \phi_j(x) \right] (-\Delta_x + i)^{-1},
\end{aligned} \tag{3.22}$$

wobei für den Kommutator nach der Proposition 3.1.8 gilt

$$\begin{aligned}
\left[-\Delta_x, \chi_\infty(x) \phi_j(x) \right] &= \left[-\Delta_x, \chi_\infty(x) \Pi(x) \phi_j \right] \\
&= \phi_j \left(\nabla_x \cdot O(\langle x \rangle^{-\rho}) + O(\langle x \rangle^{-\rho}) \right).
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned}
& \langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \Pi \chi_\infty \psi_p \\
&= \langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \sum_{j=1}^m \chi_\infty(x) \phi_j(x) \langle \tilde{\phi}_j(x), \psi_p(x, \cdot) \rangle_{\tilde{y}} \\
&\stackrel{(3.22)}{=} \chi_\infty(x) \phi_j(x) \sum_{j=1}^m \langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \langle \tilde{\phi}_j(x), \psi_p(x, \cdot) \rangle_{\tilde{y}} \\
&\quad + \sum_{j=1}^m \langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \left[-\Delta_x x, \chi_\infty(x) \phi_j(x) \right] (-\Delta_x + i)^{-1} \langle \tilde{\phi}_j(x), \psi_p(x, \cdot) \rangle_{\tilde{y}} \\
&= \chi_\infty(x) \phi_j(x) \sum_{j=1}^m \langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \langle \tilde{\phi}_j(x), \psi_p(x, \cdot) \rangle_{\tilde{y}} \\
&\quad + \phi_j \sum_{j=1}^m \langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \left(\nabla_x \cdot O(\langle x \rangle^{-\rho}) + O(\langle x \rangle^{-\rho}) \right) (-\Delta_x + i)^{-1} \langle \tilde{\phi}_j(x), \psi_p(x, \cdot) \rangle_{\tilde{y}}
\end{aligned}$$

Nun schließen wir wie bei der ersten Behauptung.

Die Folge $(\langle \tilde{\phi}_j(x), \psi_p(x, \cdot) \rangle_{\tilde{y}})_{p \in \mathbb{N}}$ konvergiert schwach gegen Null in $L^2(\mathbb{R}^n_x)$ und wegen der Kompaktheit der $\langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1}$ ist

$$s - \lim_{p \rightarrow \infty} \langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \Pi \chi_\infty \psi_p = 0.$$

Jetzt sei $x_0 \in \mathbb{R}^n$ beliebig. Wir zeigen, daß analog gilt

$$s - \lim_{p \rightarrow \infty} \langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \Pi \chi_{x_0} \psi_p = 0,$$

wobei χ_{x_0} eine C^∞ -Funktion ist, die in einer Umgebung von x_0 identisch 1 ist.

Es sei dabei $(\phi_j)_{j=1}^m$ eine Orthonormalbasis von $\mathcal{E}(x_0)$, also insbesondere $\Pi(x_0)\phi_j = \phi_j$. Wir setzen wieder $\phi_j(x) := \Pi(x)\phi_j$ und erhalten diesmal

$$\begin{aligned} \langle \phi_j(x), \phi_k(x) \rangle_{\tilde{y}} &= \langle \Pi(x)\phi_j, \Pi(x)\phi_k \rangle_{\tilde{y}} \\ &= \langle \Pi(x)\Pi(x_0)\phi_j, \phi_k \rangle_{\tilde{y}} \\ &= \delta_{jk} + \langle (\Pi(x) - \Pi(x_0))\Pi(x_0)\phi_j, \phi_k \rangle_{\tilde{y}} \quad . \end{aligned}$$

Wegen der Differenzierbarkeit der Projektionen (Lemma 3.1.5) existiert zu $\epsilon > 0$ ein δ_ϵ mit der Eigenschaft, daß für alle $x_0 \in \mathbb{R}^n$ gilt

$$\|\Pi(x) - \Pi(x_0)\| \leq \epsilon \quad (\|x - x_0\| \leq \delta_\epsilon).$$

Wir wählen jetzt $\epsilon > 0$ so klein, daß die $\phi_j(x)$ eine Basis bilden für $\mathcal{R}(\Pi(x))$ mit $x \in U_{\delta_\epsilon}(x_0)$. Es sei nun $\chi_{x_0} \in C^\infty(\mathbb{R}_x^n)$ mit Träger in $U_{\delta_\epsilon}(x_0)$, so daß in einer (kleineren) Umgebung von x_0 die Funktion χ_{x_0} identisch 1 ist.

Mit denselben Argumenten wie zuvor zeigen wir dann

$$s - \lim_{p \rightarrow \infty} \langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \Pi \chi_{x_0} \psi_p = 0 \quad .$$

Auf diese Weise existiert ein $k \in \mathbb{N}$ und eine Partition der Eins, $\{\chi_{x_{0,1}}, \dots, \chi_{x_{0,k}}\}$, in \mathbb{R}_x^n mit der Eigenschaft

$$s - \lim_{p \rightarrow \infty} \langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \Pi \chi_{x_{0,j}} \psi_p = 0 \quad (1 \leq j \leq k),$$

so daß folgt

$$s - \lim_{p \rightarrow \infty} \langle x \rangle^{-\mu} (-\Delta_x + i)^{-1} \Pi \psi_p = 0 \quad .$$

Damit ist Gleichung (3.20) bewiesen und die Behauptung des Lemmas gezeigt. ■

Auch die Aussagen der Proposition 3.1.8 lassen sich auf den Ausgangsraum übertragen. Dieses fassen wir im nächsten Korollar zusammen:

Korollar 3.2.2 :

Unter der Voraussetzung (D_ρ) sind die Operatoren

$$\langle x \rangle^{\rho+|\alpha|} \partial_x^\alpha (\Pi - \Pi_0), \langle x \rangle^\rho (\Pi P_{el} \Pi - E_0 \Pi) \text{ und } \langle x \rangle^{\rho+|\alpha|} (\partial_x^\alpha I_c) \Pi$$

beschränkte Operatoren⁴ in \mathcal{H} .

⁴Dabei haben wir die Bezeichnung $\partial_x^\alpha (\Pi - \Pi_0) := \int_{\mathbb{R}^n}^{\oplus} \partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0) dx$ verwendet.

Wir sind jetzt in der Lage, die adiabatischen Operatoren zu definieren. Anschliessend werden wir zeigen, daß sie geeignete selbstadjungierte Realisierungen zulassen.

Wir setzen noch

$$\hat{\Pi} := 1 - \Pi \quad (3.23)$$

und notieren die Identität

$$\Pi\hat{\Pi} = \hat{\Pi}\Pi = 0, \quad (3.24)$$

die sich aus der Orthogonalität von Π ergibt.

Definiton 3.2.3 :

Es sei

$$P^{AD} := \Pi P \Pi \quad (3.25)$$

$$Q^{AD} := \hat{\Pi} P \hat{\Pi} \quad (3.26)$$

P^{AD} heißt adiabatischer, Q^{AD} nicht-adiabatischer Teil von P .

Weiter setzen wir $P_0^{AD} := \Pi(-\hbar^2 \Delta_x) \Pi$.

Proposition 3.2.4 :

Unter der Voraussetzung (D_ρ) sind die Operatoren P^{AD} und Q^{AD} selbstadjungiert auf

$$\mathcal{D}(P^{AD}) = \Pi \mathcal{D}(P) \oplus \hat{\Pi} L^2 \left(R_{xyz}^{n(N+2)} \right), \quad (3.27)$$

$$\mathcal{D}(Q^{AD}) = \hat{\Pi} \mathcal{D}(P) \oplus \Pi L^2 \left(R_{xyz}^{n(N+2)} \right), \quad (3.28)$$

beziehungsweise wesentlich selbstadjungiert auf dem Raum der Schwartz-Funktionen $\mathcal{S} := \mathcal{S} \left(R_{xyz}^{n(N+2)} \right)$.

Beweis:

Beim Beweis folgen wir [Je]. Dessen Beweisidee findet sich bereits in [CDS] (siehe⁵ hierzu Lemma 7 auf S.198).

Wir zeigen zuerst, daß der Operator $P^{AD} + Q^{AD}$ selbstadjungiert ist. Hierzu setzen wir

$$W := P - (P^{AD} + Q^{AD})$$

und weisen nach, daß W relativ beschränkt ist zu P mit Schranke 0.

Der Nachweis der relativen Beschränktheit erfolgt in zwei Schritten:

$$W \text{ ist relativ beschränkt zu } P^0 := -\hbar^2 \Delta_x + P_0^c \text{ mit Schranke } 0 \quad (1)$$

$$P^0 \text{ ist relativ beschränkt zu } P \quad (2)$$

⁵Bei der Notation in [CDS] ist zu beachten, daß dort im Gegensatz zu dieser Arbeit die Projektionen mit P^{AD} und der Schrödinger-Operator mit H^{AD} bezeichnet werden.

Wir beweisen zuerst (1).

Wegen $P_{el}\Pi = \Pi P_{el}\Pi$ und $P_{el}\hat{\Pi} = \hat{\Pi}P_{el}\hat{\Pi}$ gelten

$$\begin{aligned}\hat{\Pi}P_{el}\Pi &= 0, \\ \Pi P_{el}\hat{\Pi} &= 0.\end{aligned}\tag{3.29}$$

Zur Untersuchung der Operatoren $\Delta_x\Pi$ führen wir die Abkürzungen $\partial_i := \frac{\partial}{\partial x_i}$ und $\partial_i^2 := \frac{\partial^2}{\partial^2 x_i}$ ein, wobei $x = (x_1, \dots, x_n)$ ist. Nach der Produktregel ist dann

$$\begin{aligned}\partial_i^2\Pi &= (\partial_i^2\Pi) + 2(\partial_i\Pi)\partial_i + \Pi\partial_i^2, \\ \partial_i^2\hat{\Pi} &= (\partial_i^2\hat{\Pi}) + 2(\partial_i\hat{\Pi})\partial_i + \hat{\Pi}\partial_i^2,\end{aligned}$$

also folgt durch Summation

$$\begin{aligned}\Delta_x\Pi &= (\Delta_x\Pi) + 2(\nabla_x\Pi) \cdot \nabla_x + \Pi\Delta_x, \\ \Delta_x\hat{\Pi} &= (\Delta_x\hat{\Pi}) + 2(\nabla_x\hat{\Pi}) \cdot \nabla_x + \hat{\Pi}\Delta_x.\end{aligned}\tag{3.30}$$

Nach der Ungleichung (3.7) ist für $1 \leq i \leq n$

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^n} \left\| (\partial_i\Pi(\cdot))(x) \right\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_c)} < \infty$$

und die Operatoren $\partial_i\Pi = \int_{\mathbb{R}^n}^{\oplus} (\partial_i\Pi(\cdot))(x)dx$ sind daher beschränkt (siehe [RS4], Theorem XIII.83). Analog schließt man für die $\partial_i^2\Pi$.

Demzufolge gelten

$$\begin{aligned}(\Delta_x\Pi), (\Delta_x\hat{\Pi}) &\in \mathcal{B}(\mathcal{H}), \\ (\nabla_x\Pi), (\nabla_x\hat{\Pi}) &\in \mathcal{B}(\mathcal{H}^n).\end{aligned}\tag{3.31}$$

Für den Operator W erhalten wir somit

$$\begin{aligned}W &= P - \Pi P \Pi - \hat{\Pi} P \hat{\Pi} \\ &= (\Pi + \hat{\Pi})P(\Pi + \hat{\Pi}) - \Pi P \Pi - \hat{\Pi} P \hat{\Pi} \\ &= \hat{\Pi}(-h^2\Delta_x + P_{el})\Pi + \Pi(-h^2\Delta_x + P_{el})\hat{\Pi} \\ &\stackrel{(3.29)}{=} -h^2\left(\hat{\Pi}\Delta_x\Pi + \Pi\Delta_x\hat{\Pi}\right) \\ &\stackrel{(3.30)}{=} -h^2\left(\hat{\Pi}[(\Delta_x\Pi) + 2(\nabla_x\Pi) \cdot \nabla_x + \Pi\Delta_x] + \Pi[(\Delta_x\hat{\Pi}) + 2(\nabla_x\hat{\Pi}) \cdot \nabla_x + \hat{\Pi}\Delta_x]\right) \\ &= -2h^2\left[\Pi(\nabla_x\hat{\Pi}) + \hat{\Pi}(\nabla_x\Pi)\right] \cdot \nabla_x - h^2\left[\Pi(\Delta_x\hat{\Pi}) + \hat{\Pi}(\Delta_x\Pi)\right].\end{aligned}$$

Entsprechend der Aussagen in (3.31) ist dieser Operator relativ beschränkt zu P^0 mit Schranke 0 und die Aussage (1) bewiesen.

Zum Beweis von (2) notieren wir für $\phi \in \mathcal{D}(P^0)$

$$\begin{aligned} \|P^0\phi\| &= \|-P^0\phi\| \\ &= \|(P - P^0)\phi - P\phi\| \\ &\leq \|P\phi\| + \|(I^c + I_c)\phi\| \\ &\leq \|P\phi\| + C\|\phi\|, \end{aligned}$$

mit geeignetem $C > 0$ wegen der Beschränktheit der Potentiale I^c und I_c . Damit ist auch diese Behauptung richtig.

Nach dem Kato-Rellich-Theorem ist der Operator $P^{AD} + Q^{AD}$ selbstadjungiert auf $\mathcal{D}(P) = H^2(\mathbb{R}^{n(N+2)})$ und wesentlich selbstadjungiert auf \mathcal{S} .

Wir beweisen nun die Selbstadjungiertheit von P^{AD} . Wegen der Symmetrie, genügt es nach [RS1], Theorem VIII.3, zu zeigen

$$\left(P^{AD} \pm i\right)\mathcal{D}(P) = L^2(\mathbb{R}^{n(N+2)}) \quad . \quad (3.32)$$

Hierzu sei $\phi \in L^2$ beliebig.

Da $P^{AD} + Q^{AD}$ auf $\mathcal{D}(P)$ selbstadjungiert ist, existiert ein $\theta_{\pm} \in \mathcal{D}(P)$ mit

$$(P^{AD} + Q^{AD} \pm i)\theta_{\pm} = \Pi\phi,$$

und wegen $Q^{AD}\Pi = P^{AD}\hat{\Pi} = 0$ erhalten wir weiter

$$\begin{aligned} \left(P^{AD} \pm i\right)(\Pi\theta_{\pm} + \mp\hat{\Pi}\phi) &= \left(P^{AD} + Q^{AD} \pm i\right)\Pi\theta_{\pm} + \pm i(\mp i)\hat{\Pi}\phi \\ &= \Pi\left(P^{AD} + Q^{AD} \pm i\right)\theta_{\pm} - i^2\hat{\Pi}\phi \\ &= \Pi\Pi\phi + \hat{\Pi}\phi \\ &= \phi \end{aligned}$$

und (3.32) ist schon bewiesen.

P^{AD} ist daher selbstadjungiert auf $\mathcal{D}(P)$. Wegen $\Pi\hat{\Pi} = 0$ erhält man weiter

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(P^{AD}) &= \mathcal{D}(P) \oplus \hat{\Pi}L^2(\mathbb{R}^{n(N+2)}) \\ &= (\Pi + \hat{\Pi})\mathcal{D}(P) \oplus \hat{\Pi}L^2(\mathbb{R}^{n(N+2)}) \\ &= \Pi\mathcal{D}(P) \oplus \hat{\Pi}L^2(\mathbb{R}^{n(N+2)}), \end{aligned}$$

so daß auch Gleichung (3.27) richtig ist.

Zur wesentlichen Selbstadjungiertheit von P^{AD} genügt der Nachweis, daß $(P^{AD} \pm i)\mathcal{S}$ dicht liegt in $L^2(\mathbb{R}^{n(N+2)})$. Wir wählen daher $\phi \in \mathcal{S}$ und $\epsilon > 0$ beliebig und schließen ähnlich wie zuvor.

Es existiert nämlich $\theta_{\pm} \in \mathcal{S}$ derart, daß

$$\left\|\Pi\phi - (P^{AD} + Q^{AD} \pm i)\theta_{\pm}\right\| < \frac{\epsilon}{2},$$

und wegen der Dichtheit von \mathcal{S} gibt es ein $\tilde{\phi} \in \mathcal{S}$ mit $\|\phi - \tilde{\phi}\| < \frac{\epsilon}{2}$.
 Aus Gleichung (3.7) der Proposition 3.1.8 entnimmt man, daß die Projektion Π den Schwartz-Raum in sich abbildet, denn Anwendung von Π auf ein $\psi \in \mathcal{S}$ verschlechtert nicht das Abfallverhalten in x . Entsprechendes ist für $\hat{\Pi}$ gültig.
 Deswegen ist auch $\Pi\theta_{\pm} + (\mp i)\hat{\Pi}\tilde{\phi} \in \mathcal{S}$, und es ergibt sich

$$\begin{aligned} \left\| \phi - (P^{AD} \pm i)(\Pi\theta_{\pm} + (\mp i)\hat{\Pi}\tilde{\phi}) \right\| &= \|(\Pi + \hat{\Pi})\phi - (P^{AD} + Q^{AD} \pm i)\Pi\theta_{\pm} - \hat{\Pi}\tilde{\phi}\| \\ &\leq \|\Pi\Pi\phi - \Pi(P^{AD} + Q^{AD} \pm i)\theta_{\pm}\| + \|\hat{\Pi}\phi - \hat{\Pi}\tilde{\phi}\| \\ &\leq \|\Pi\| \|\Pi\phi - (P^{AD} + Q^{AD} \pm i)\theta_{\pm}\| + \|\hat{\Pi}\| \|\phi - \tilde{\phi}\| \\ &< \epsilon \quad . \end{aligned}$$

Dies zeigt gerade die behauptete Dichtheit von $(P^{AD} \pm i)\mathcal{S}$.

Die Selbstadjungiertheit von Q^{AD} beziehungsweise die wesentliche Selbstadjungiertheit zeigt man ganz analog, indem man die Rollen von Π und $\hat{\Pi}$ miteinander vertauscht. ■

Das nächste Korollar beschreibt, wie der Definitionsbereich des adiabatischen Operators sich unter der Projektion Π verhält.

Korollar 3.2.5 :

Es gelten

$$\Pi\mathcal{D}(P^{AD}) = \Pi\mathcal{D}(P) \subset \mathcal{D}(P), \quad (3.33)$$

$$\Pi\mathcal{D}(P_0^{AD}) = \Pi\mathcal{D}(-\Delta_x) \subset \mathcal{D}(-\Delta_x) \quad . \quad (3.34)$$

Beweis:

Wir beweisen nur die Aussage für $\mathcal{D}(P^{AD})$, der Beweis für $\mathcal{D}(P_0^{AD})$ verläuft analog.

Da Π gemäß (3.24) eine orthogonale Projektion ist, liefert Proposition 3.2.4 direkt

$$\begin{aligned} \Pi\mathcal{D}(P^{AD}) &= \Pi\left(\Pi\mathcal{D}(P) \oplus \hat{\Pi}L^2(\mathbb{R}_{xyz}^{n(N+2)})\right) \\ &= \Pi^2\mathcal{D}(P) \\ &= \Pi\mathcal{D}(P), \end{aligned}$$

also die behauptete Gleichheit.

Um die Inklusion $\Pi\mathcal{D}(P) \subseteq \mathcal{D}(P)$ zu zeigen weisen wir nach, daß der Operator $P\Pi(P+i)^{-1}$ ein beschränkter Operator in $L^2(\mathbb{R}^{n(N+2)})$ ist, womit wir wegen $\mathcal{R}((P+i)^{-1}) = \mathcal{D}(P)$ dann fertig sind.

Mit $P = -\hbar^2 \Delta_x + P_{el}$ erhalten wir nach einer analogen Rechnung wie beim Beweis von Proposition 3.2.4

$$\begin{aligned}
P\Pi(P+i)^{-1} &= \left(\Pi(-\hbar^2 \Delta_x) - 2\hbar^2 (\nabla_x \Pi) \cdot \nabla_x - \hbar^2 (\Delta_x \Pi) + P_{el} \Pi \right) (P+i)^{-1} \\
&= \underbrace{\Pi(-\hbar^2 \Delta_x)}_{\in \mathcal{B}(\mathcal{H})} (P+i)^{-1} - 2\hbar^2 \underbrace{(\nabla_x \Pi) \cdot \nabla_x}_{\in \mathcal{B}(\mathcal{H})} (P+i)^{-1} \\
&\quad - \hbar^2 \underbrace{(\Delta_x \Pi)}_{\in \mathcal{B}(\mathcal{H})} (P+i)^{-1} + \underbrace{\Pi P_{el}}_{\in \mathcal{B}(\mathcal{H})} (P+i)^{-1},
\end{aligned}$$

so daß schon alles gezeigt ist. ■

Wir beenden dieses Kapitel mit der folgenden Proposition.

Proposition 3.2.6 :

Für $\mu > 0$ ist der Operator

$$\langle x \rangle^{-\mu} \Pi(P^{AD} + i)^{-1} \Pi$$

kompakt.

Beweis:

Wir zeigen zuerst, daß der Operator $\langle x \rangle^{-\mu} \Pi(P_0^{AD} + i)^{-1} \Pi$ kompakt ist.

Dazu sehen wir mit dem ρ aus (D_ρ) , daß die Differenz

$$\begin{aligned}
&\langle x \rangle^{-\mu} \Pi(P^{AD} + i)^{-1} \Pi - \langle x \rangle^{-\mu} \Pi(-\hbar^2 \Delta_x + i)^{-1} \Pi \\
&= \langle x \rangle^{-\mu} \Pi(P^{AD} + i)^{-1} \left(-\hbar^2 \Delta_x - \Pi(-\hbar^2 \Delta_x) \Pi \right) (-\hbar^2 \Delta_x + i)^{-1} \Pi \\
&= \langle x \rangle^{-\mu} \Pi(P^{AD} + i)^{-1} \Pi \left[-\hbar^2 \Delta_x, \Pi \right] (-\hbar^2 \Delta_x + i)^{-1} \Pi \\
&= 2\hbar^2 \langle x \rangle^{-\mu} \Pi(P^{AD} + i)^{-1} \Pi (\nabla_x \Pi) \cdot \nabla_x (-\hbar^2 \Delta_x + i)^{-1} \Pi \\
&\quad + \langle x \rangle^{-\mu} \Pi(P^{AD} + i)^{-1} \Pi (\Delta_x \Pi) (-\hbar^2 \Delta_x + i)^{-1} \Pi \\
&= 2\hbar^2 \langle x \rangle^{-\mu} \Pi(P^{AD} + i)^{-1} \Pi \underbrace{(\nabla_x \Pi) \langle x \rangle^\rho}_{\in \mathcal{B}(\mathcal{H}; \mathcal{H}^n), Prop. 3.1.8} \cdot \underbrace{\langle x \rangle^{-\rho} \nabla_x (-\hbar^2 \Delta_x + i)^{-1} \Pi}_{\text{kompakt, Prop. 3.2.1}} \\
&\quad + \langle x \rangle^{-\mu} \Pi(P^{AD} + i)^{-1} \Pi \underbrace{(\Delta_x \Pi) \langle x \rangle^\rho}_{\in \mathcal{B}(\mathcal{H}), Prop. 3.1.8} \underbrace{\langle x \rangle^{-\rho} (-\hbar^2 \Delta_x + i)^{-1} \Pi}_{\text{kompakt, Prop. 3.2.1}}
\end{aligned}$$

kompakt ist.

Da nach Proposition 3.2.1 der zweite Operator in der Differenz, $\langle x \rangle^{-\mu} \Pi(-\hbar^2 \Delta_x + i)^{-1} \Pi$, ebenfalls kompakt ist, folgt damit auch die Kompaktheit von $\langle x \rangle^{-\mu} \Pi(P_0^{AD} + i)^{-1} \Pi$.

Aus der relativen Beschränktheit von $P^{AD} - P_0^{AD} = \Pi P_{el} \Pi$ zu P^{AD} ergibt sich dann, daß auch $\langle x \rangle^{-\mu} \Pi (P^{AD} + i)^{-1} \Pi$ kompakt ist. ■

Kapitel 4

Ausblick

4.1 Wellenoperatoren

Es sei $P_c := -h^2\Delta_x + P^c$. Unter der Voraussetzung (D_ρ) , mit $\rho > 1$, kann man zeigen, daß die zur Clusterzerlegung C gehörenden Wellenoperatoren

$$\Omega_\pm^c = s - \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itP} e^{-itP^c} E_{pp}(P^c)$$

existieren (siehe Hack's Theorem in [RS3], Seite 82). Dabei bezeichnet $E_{pp}(P^c)$ die Projektion auf den Raum des reinen Punktspektrums von P^c .

Dementsprechend existieren dann auch

$$\Omega_\pm = s - \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itP} e^{-itP^c} \Pi_0 \quad .$$

Im Rahmen der Born-Oppenheimer-Approximation interessiert man sich für die Existenz und Vollständigkeit der Operatoren

$$\begin{aligned} \Omega_\pm^{AD} &= s - \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itP^{AD}} e^{-itP^c} \Pi_0, \\ \Omega_\pm^{NAD} &= s - \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itP} e^{-itP^{AD}} E_{ac}(P^{AD}) \end{aligned}$$

und möchte zeigen, daß

$$\Omega_\pm^c \Pi_0 = \Omega_\pm^{NAD} \Omega_\pm^{AD} \quad .$$

Dieses ist in Theorem 2.3 aus [KMW] (sogar für nicht glatte Potentiale) beziehungsweise in den Propositionen 2.3.2, 2.3.4 und 2.3.5 aus [Je] ausgeführt.

Dabei gehen entscheidend die Aussagen über das Abfallverhalten der Projektionen $\Pi(x)$ ein, die wir auch in unserem Fall zeigen konnten (siehe Proposition 3.1.8). Wir haben daher die Hoffnung, daß sich die Existenz der adiabatischen Wellenoperatoren sowie die obige Zerlegung von $\Omega_\pm^c \Pi_0$ auch für unsere Cluster-Zerlegung eines drei-atomigen Moleküls ebenso beweisen lassen.

4.2 Abhängigkeit vom Parameter h

Mit Blick auf die Propositionen 1.2.2 und 1.2.4 erkennt man, daß die Operatoren P^c und $P_{el}(x)$ vom Parameter h abhängen. Diese Abhängigkeit steckt dabei sowohl in den Hughes-Eckart-Termen als auch im Interclusterpotential.

Etwas ausführlicher schreiben wir daher nun

$$\begin{aligned}
P^c(h) = & - \sum_{i \in \dot{C}_1} \frac{1}{2} \Delta_{y_i} - \frac{1}{2m_1} \left(\sum_{i \in \dot{C}_1} \nabla_{y_i} \right)^2 \\
& + \sum_{i \in \dot{C}_1} V_{1i}(-y_i) + \sum_{\substack{i, j \in \dot{C}_1 \\ i < j}} V_{ij}(y_i - y_j) \\
& - \left(\frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3} \right) \Delta_z - \sum_{i \in \dot{C}_2} \frac{1}{2} \Delta_{y_i} - \left(\frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3} \right) \left(\sum_{i \in \dot{C}_2} \nabla_{y_i} \right)^2 \\
& + \sum_{i \in \dot{C}_2} \left[V_{2i} \left(\frac{m_3}{m_2+m_3} z - y_i \right) + V_{3i} \left(\frac{-m_2}{m_2+m_3} z - y_i \right) \right] \\
& + \sum_{\substack{i, j \in \dot{C}_2 \\ i < j}} V_{ij}(y_i - y_j) + V_{23}(z)
\end{aligned} \tag{4.1}$$

und

$$\begin{aligned}
I_c(x; h)(y, z) = & \sum_{i \in \dot{C}_2} V_{1i}(x - y_i - f_1 + f_2) \\
& + \sum_{i \in \dot{C}_1} V_{2i} \left(-x + \frac{m_3}{m_2+m_3} z - y_i + f_1 - f_2 \right) \\
& + \sum_{i \in \dot{C}_1} V_{3i} \left(-x - \frac{m_2}{m_2+m_3} z - y_i + f_1 - f_2 \right) \\
& + \sum_{\substack{i \in \dot{C}_1, j \in \dot{C}_2 \\ i < j}} V_{ij}(x + y_i - y_j - f_1 + f_2) \\
& + \sum_{\substack{i \in \dot{C}_2, j \in \dot{C}_1 \\ i < j}} V_{ij}(-x + y_i - y_j + f_1 - f_2) \\
& + V_{12} \left(x - \frac{m_3}{m_2+m_3} z - f_1 + f_2 \right) \\
& + V_{13} \left(x + \frac{m_2}{m_2+m_3} z - f_1 + f_2 \right) \quad .
\end{aligned} \tag{4.2}$$

Da im Interclusterpotential die Ausdrücke $\frac{m_2}{m_2+m_3}$ und $\frac{m_3}{m_2+m_3}$ auftreten, ist in unserem Fall das Aufschreiben der Operatoren für den Grenzfall $h = 0$ nicht ganz so einfach wie in [KMW] (3.Kapitel) oder [Je] (Kapitel 4.1).

Die beiden Terme $\frac{m_2}{m_2 + m_3}$, $\frac{m_3}{m_2 + m_3}$ repräsentieren jedoch den Abstand eines Kerns aus C_2 zum Schwerpunkt von Kern 2 und Kern 3.

Es ist nicht plausibel, warum dieser Abstand h -abhängig sein sollte, denn mit $h \rightarrow 0$ möchte man ausdrücken, daß die Masse der Elektronen gegenüber der der Kerne vernachlässigbar klein wird.

Aus diesem Grund betrachten wir die Konstellation $m_2 = \mu m_3$ mit einem festen $\mu > 0$ und setzen

$$\mu_0 := \frac{\mu}{1 + \mu}$$

und erhalten damit

$$\begin{aligned} \frac{m_2}{m_2 + m_3} &= \mu_0, \\ \frac{m_3}{m_2 + m_3} &= 1 - \mu_0, \end{aligned}$$

so daß beide Quotienten nicht mehr von h abhängen.

In diesem Fall gilt gewiß $(\frac{1}{m_i})^{-1} = O(h^2)$ für $i = 1, 2, 3$, und wir erinnern noch einmal an $f_1, f_2 = O(h^2)$.

Die Operatoren für $h = 0$ können wir dann wie folgt definieren.

$$\begin{aligned} P^c(0) &:= - \sum_{i \in \dot{C}_1} \frac{1}{2} \Delta_{y_i} - \sum_{i \in \dot{C}_2} \frac{1}{2} \Delta_{y_i} \\ &+ \sum_{i \in \dot{C}_1} V_{1i}(-y_i) + \sum_{\substack{i, j \in \dot{C}_1 \\ i < j}} V_{ij}(y_i - y_j) \\ &+ \sum_{i \in \dot{C}_2} \left[V_{2i}((1 - \mu_0)z - y_i) + V_{3i}(-\mu_0 z - y_i) \right] \\ &+ \sum_{\substack{i, j \in \dot{C}_2 \\ i < j}} V_{ij}(y_i - y_j) + V_{23}(z) \end{aligned} \tag{4.3}$$

und

$$\begin{aligned} I_c(x; 0)(y, z) &:= \sum_{i \in \dot{C}_2} V_{1i}(x - y_i) \\ &+ \sum_{i \in \dot{C}_1} V_{2i}(-x + (1 - \mu_0)z - y_i) \\ &+ \sum_{i \in \dot{C}_1} V_{3i}(-x - \mu_0 z - y_i) \\ &+ \sum_{\substack{i \in \dot{C}_1, j \in \dot{C}_2 \\ i < j}} V_{ij}(x + y_i - y_j) \\ &+ \sum_{\substack{i \in \dot{C}_2, j \in \dot{C}_1 \\ i < j}} V_{ij}(-x + y_i - y_j) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +V_{12}(x - (1 - \mu_0)z) \\
& +V_{13}(x + \mu_0z) \quad .
\end{aligned} \tag{4.4}$$

In Analogie zum ersten Kapitel definieren wir

$$P_{el}(x; h) := P^c(h) + I_c(x; h) \quad (h \geq 0). \tag{4.5}$$

Es sei jetzt $E_0 \in \sigma_{disc}(P^c(0))$ ein stabiler Eigenwert endlicher Multiplizität m . Insbesondere gelte wieder (H_δ) , also

$$\bigvee_{\delta > 0} \bigwedge_{x \in \mathbb{R}^n} d\left(\{\lambda_1(x; 0), \dots, \lambda_m(x; 0)\}, \sigma(P_{el}(x; h)) \setminus \{\lambda_1(x; 0), \dots, \lambda_m(x; 0)\}\right) \geq \delta,$$

Wir verlangen nun außerdem, daß E_0 die folgende semi-klassische Stabilitätsbedingung erfüllt, wie sie in [Je], Seite 66, gegeben wird.

Definiton 4.2.1 :

Es sei $\delta > 0$, so daß (H_δ) erfüllt ist.

Dann gelte

1. *Es gebe Funktionen $e_\pm, E_\pm : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ mit den Eigenschaften*

- $e_-(x) < E_-(x) < e_+(x) < E_+(x) \quad (x \in \mathbb{R}^n),$
- $\inf_{x \in \mathbb{R}^n} |E_\pm(x) - e_\pm(x)| \geq \delta,$
- $\lambda_1(x; 0), \dots, \lambda_m(x; 0) \in]E_-(x), e_+(x)[\quad .$
- *Es existiere $h_\delta > 0$ und $R_0 > 0$ derart, daß*

$$\dim \mathcal{R}\left(\mathbf{1}_{]E_-(x), e_+(x)[}(P_{el}(x; h))\right) = m.$$

2. *Es existiere $h_\delta > 0$ und $R_0 > 0$ derart, daß für $h \leq h_\delta$ und $|x| \geq R_0$ gilt,*

$$\dim \mathcal{R}\left(\mathbf{1}_{]E_-(x), e_+(x)[}(P_{el}(x; h))\right) = m.$$

Unter dieser Voraussetzung sollten sich auch in unserem Fall die folgenden Propositionen beweisen lassen.

Proposition 4.2.2 :

Unter der Voraussetzung (D_ρ) und der semi-klassischen Stabilitätsbedingung existiert ein $h_\delta > 0$, so daß für alle $h \leq h_\delta$ gelten

$$\bigwedge_{\alpha \in \mathbb{N}_0^m} \bigvee_{d_\alpha > 0} \bigwedge_{x \in \mathbb{R}^n} \|\partial_x^\alpha (\Pi(x; h) - \Pi_0(h))\| \leq d_\alpha \langle x \rangle^{-\rho - |\alpha|}, \tag{4.6}$$

$$\bigwedge_{\alpha \in \mathbb{N}_0^m} \bigvee_{d_\alpha > 0} \bigwedge_{x \in \mathbb{R}^n} \|(\partial_x^\alpha I_c)(x; h)\Pi_0(h)\| + \|(\partial_x^\alpha I_c)(x; h)\Pi(x; h)\| \leq d_\alpha \langle x \rangle^{-\rho - |\alpha|}, \tag{4.7}$$

$$\bigwedge_{x \in \mathbb{R}^n} \|\Pi(x; h)P_{el}(x; h)\Pi(x; h) - \Pi(x; h)P_{6c}(h)\Pi_0(h)\| = O(\langle x \rangle^{-\rho}) \quad . \quad (4.8)$$

Proposition 4.2.3 :

E_0 sei stabil und erfülle die semi-klassische Stabilitätsbedingung.

Dann gibt es ein $h_\delta > 0$, so daß für $h \leq h_\delta$ und $x \in \mathbb{R}^n$ genau m Eigenwerte $\lambda_1(x; h), \dots, \lambda_m(x; h)$ von $P_{el}(x; h)$ existieren mit

$$\lambda_j(x; h) = \lambda_j(x; 0) + O(h^2) \quad (x \in \mathbb{R}^n, 1 \leq j \leq m).$$

Dieses entspricht genau den Propositionen aus [Je] (Seite 66 und 67) beziehungsweise Theorem 3.1 aus [KMW].

Der Beweis von [Je] für diese beiden Propositionen sollte anwendbar sein, denn die h -Abhängigkeit in den Hughes-Eckart-Termen können wir wie dort kontrollieren und die Abhängigkeit des Interclusterpotentials von h entspricht jener in [Je].

Anhang A

Anhang

A.1 Transformation der freien Bewegung

Wir zeigen hier, wie sich der Schrödinger-Operator der freien Bewegung $\tilde{P}_{0,\xi}$ in den Koordinaten der Transformation (1.7) schreiben läßt.

Es gelten dabei die Bezeichnungen des ersten Kapitels.

Proposition A.1.1 :

Es gilt

$$\begin{aligned} U(A^{-1}) \circ \tilde{P}_{0,\xi} \circ U(A) &= -\frac{1}{2M} \Delta_s - \hbar^2 \Delta_x \\ &\quad - \sum_{i \in \hat{C}_1} \frac{1}{2} \Delta_{y_i} - \frac{1}{2m_1} \left(\sum_{i \in \hat{C}_1} \nabla_{y_i} \right)^2 \\ &\quad - \left(\frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3} \right) \Delta_z - \sum_{i \in \hat{C}_2} \frac{1}{2} \Delta_{y_i} - \left(\frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3} \right) \left(\sum_{i \in \hat{C}_2} \nabla_{y_i} \right)^2 \end{aligned}$$

Beweis:

Aus rechenstechnischen Gründen ist es zweckmäßig, die neuen Koordinaten nicht mit (s, x, z, y_i) zu bezeichnen, sondern $(\eta_1, \eta_2, \eta_3, \dots, \eta_{\hat{N}})$ zu verwenden.

Die Transformation $A : \mathbb{R}_\xi^{n_{\hat{N}}} \rightarrow \mathbb{R}_\eta^{n_{\hat{N}}}$ erzeugt gemäß $U(A)\phi := \phi \circ A^{-1}$ kanonisch eine unitäre Abbildung $U(A) : L^2(\mathbb{R}_\eta^{n_{\hat{N}}}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}_\xi^{n_{\hat{N}}})$ im Zustandsraum. Ziel ist es, den Operator

$$\tilde{P}_{0,\eta} := U(A^{-1}) \circ \tilde{P}_{0,\xi} \circ U(A) \tag{A.1}$$

in den Variablen η_i darzustellen.

Bei der Berechnung von (A.1) folgen wir der Diplomarbeit von Carsten Erdmann [Erd] und denken uns die Matrix A folgendermaßen in $n \times n$ Matrizen aufgeteilt:

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1\hat{N}} \\ A_{21} & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & A_{2\hat{N}} \\ \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots \\ A_{\hat{N}1} & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & A_{\hat{N}\hat{N}} \end{pmatrix} .$$

Nach Theorem II.3 aus [Erd] erhält man für den Operator $\tilde{P}_{0,\eta}$ den Ausdruck

$$\tilde{P}_{0,\eta} = - \sum_{k=1}^{\hat{N}} \sum_{l=1}^{\hat{N}} \nabla_{\eta_k}^T \left(\sum_{i=1}^{\hat{N}} \frac{1}{2m_i} A_{ki} A_{li}^T \right) \nabla_{\eta_l} . \quad (\text{A.2})$$

Bei der Wahl der Koordinaten in (1.7) erkennt man, daß bei uns alle A_{ij} reelle Diagonalmatrizen sind. Wir schreiben $A_{ij} = a_{ij} I_n$, wobei I_n die Einheitsmatrix im \mathbb{R}^n bezeichnet.

Damit gilt

$$\sum_{i=1}^{\hat{N}} \frac{1}{2m_i} A_{ki} A_{li}^T = \underbrace{\sum_{i=1}^{\hat{N}} \frac{1}{2m_i} a_{ki} a_{li}}_{=: b_{kl}} I_n,$$

und für den Operator der freien Bewegung bekommen wir den einfacheren Ausdruck

$$\tilde{P}_{0,\eta} = - \sum_{k=1}^{\hat{N}} \sum_{l=1}^{\hat{N}} b_{kl} \nabla_{\eta_k} \cdot \nabla_{\eta_l}, \quad (\text{A.3})$$

wobei wir die Schreibweise $\nabla_{\eta_k} \cdot \nabla_{\eta_l}$ für $\nabla_{\eta_k}^T \nabla_{\eta_l}$ benutzt haben.

Zur Darstellung von $\tilde{P}_{0,\eta}$ müssen also die b_{kl} berechnet werden. Nach Definition der b_{kl} ergeben sich diese aus der Matrix (a_{ij}) , indem man den k -ten und den l -ten Zeilenvektor miteinander skalar multipliziert.

Um (a_{ij}) aufzuschreiben, verwenden wir die Abkürzung

$$\phi(i) := \begin{cases} \frac{1}{M_1} & (i \in C_1) \\ \frac{-1}{M_2} & (i \in C_2) \end{cases} ,$$

und erhalten

$$(a_{ik}) = \begin{pmatrix} \frac{m_1}{M} & \frac{m_2}{M} & \frac{m_3}{M} & \frac{m_4}{M} & \dots & \dots & \frac{m_{\hat{N}}}{M} \\ m_1\phi(1) & m_2\phi(2) & m_3\phi(3) & m_4\phi(4) & \dots & \dots & m_{\hat{N}}\phi(\hat{N}) \\ \mathbf{0} & 1 & -1 & \mathbf{0} & \dots & \dots & \mathbf{0} \\ -1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \delta_{i_1 4} & \dots & \dots & \delta_{i_1 \hat{N}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \delta_{i_2 4} & \dots & \dots & \delta_{i_2 \hat{N}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ -1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \delta_{i_{n_1} 4} & \dots & \dots & \delta_{i_{n_1} \hat{N}} \\ \mathbf{0} & \frac{-m_2}{m_2+m_3} & \frac{m_3}{m_2+m_3} & \delta_{j_1 4} & \dots & \dots & \delta_{j_1 \hat{N}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \frac{-m_2}{m_2+m_3} & \frac{m_3}{m_2+m_3} & \delta_{j_{n_2} 4} & \dots & \dots & \delta_{j_{n_2} \hat{N}} \end{pmatrix}$$

Bevor wir mit der Rechnung beginnen, erinnern wir an $\dot{C}_1 = \{i_1, \dots, i_{n_1}\}$ und $\dot{C}_2 = \{j_1, \dots, j_{n_2}\}$ sowie die Disjunktheit dieser Mengen. In den kommenden Gleichungen seien jeweils $k, \bar{k} \in \{1, \dots, n_1\}$ und $l, \bar{l} \in \{1, \dots, n_2\}$ beliebig.

Wir beginnen mit der Berechnung der Koeffizienten, die die Koordinate η_1 betreffen, und erhalten

$$b_{11} = \sum_{i=1}^{\hat{N}} \frac{1}{2m_i} \frac{m_i}{M} \frac{m_i}{M} = \frac{1}{2M},$$

$$b_{12} = \sum_{i=1}^{\hat{N}} \frac{1}{2m_i} \frac{m_i}{M} m_i \phi(i) = \sum_{i \in \dot{C}_1} \frac{m_i}{2MM_1} - \sum_{i \in \dot{C}_2} \frac{m_i}{2MM_2} = \frac{1}{2M} - \frac{1}{2M} = 0,$$

$$b_{13} = \frac{1}{2m_2} \frac{m_2}{M} - \frac{1}{2m_3} \frac{m_3}{M} = 0,$$

$$b_{1i_k} = -\frac{1}{2m_1} + \sum_{i=4}^{\hat{N}} \frac{1}{2m_i} \delta_{i_k i} \frac{m_i}{M} = -\frac{1}{2M} + \frac{1}{2m_{i_k}} \frac{m_{i_k}}{M} = 0,$$

$$\begin{aligned} b_{1j_l} &= -\frac{1}{2m_2} \frac{m_2}{M} \frac{m_2}{m_2+m_3} - \frac{1}{2m_3} \frac{m_3}{M} \frac{m_3}{m_2+m_3} + \sum_{i=4}^{\hat{N}} \frac{1}{2m_i} \delta_{j_l i} \frac{m_i}{M} \\ &= -\frac{m_2}{2(m_2+m_3)M} - \frac{m_3}{2(m_2+m_3)M} + \frac{1}{2m_{j_l}} \frac{m_{j_l}}{M} \\ &= 0. \end{aligned}$$

Damit tritt in \tilde{P}_0^c der Ausdruck $\frac{1}{2M}\Delta_{\eta_1}$ auf, aber keine gemischten Terme der Form $\nabla_{\eta_1} \cdot \nabla_{\eta_j}$ mit $j \neq 1$.

Weiter sind

$$b_{22} = \sum_{i=1}^{\hat{N}} \frac{1}{2m_i} (m_i \phi(i))^2 = \sum_{i \in \dot{C}_1} \frac{m_i}{2M_1^2} + \sum_{i \in \dot{C}_2} \frac{m_i}{2M_2^2} = \frac{1}{2M_1} + \frac{1}{2M_2},$$

$$b_{23} = \frac{1}{2m_2} m_2 \phi(2) - \frac{1}{2m_3} m_3 \phi(3) = -\frac{1}{2M_2} + \frac{1}{2M_2} = 0,$$

$$\begin{aligned} b_{2i_k} &= -\frac{1}{2m_1} m_1 \phi(1) + \sum_{i=4}^{\hat{N}} \frac{1}{2m_i} m_{i_k} \phi(i_k) \delta_{ii_k} \\ &= -\frac{1}{2M_1} + \frac{1}{2M_1} \\ &= 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b_{2j_l} &= -\frac{1}{2m_2} m_2 \phi(2) \frac{m_2}{m_2 + m_3} - \frac{1}{2m_3} m_3 \phi(3) \frac{m_3}{m_2 + m_3} + \sum_{i=4}^{\hat{N}} \frac{1}{2m_i} m_{j_l} \phi(j_l) \delta_{ij_l} \\ &= \frac{1}{2M_2} \left(\frac{m_2}{m_2 + m_3} \right) - \frac{1}{2M_2} \\ &= 0, \end{aligned}$$

so daß in Bezug auf den Interclusterabstand η_2 nur der Ausdruck $(\frac{1}{2M_1} + \frac{1}{2M_2})\Delta_{\eta_2}$ übrigbleibt.

In Zusammenhang mit dem Kernabstand im zweiten Cluster, η_3 , ergeben sich sofort

$$b_{33} = \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3},$$

$$b_{3i_k} = 0,$$

$$b_{3j_l} = -\frac{1}{m_2 + m_3} + \frac{1}{m_2 + m_3} = 0,$$

da in der dritten Zeile der Matrix nur in der zweiten und dritten Spalte von 0 verschiedene Einträge stehen.

Die verbleibenden Koeffizienten sind schließlich

$$\begin{aligned}
b_{i_k i_{\bar{k}}} &= \frac{1}{2m_1}(-1)^2 + \sum_{i=4}^{\hat{N}} \frac{1}{2m_i} \delta_{i_k i} \delta_{i_{\bar{k}} i} = \frac{1}{2m_1} + \frac{1}{2m_{i_k}} \delta_{i_k i_{\bar{k}}}, \\
b_{i_k j_l} &= 0 + 0 + \sum_{i=4}^{\hat{N}} \frac{1}{2m_i} \delta_{i_k i} \delta_{j_l i} = \delta_{i_k j_l} = 0, \\
b_{j_i j_l} &= \frac{1}{2m_2} \left(-\frac{m_2}{m_2 + m_3} \right)^2 + \frac{1}{2m_3} \left(-\frac{m_3}{m_2 + m_3} \right)^2 + \sum_{i=4}^{\hat{N}} \frac{1}{2m_i} \delta_{j_i i} \delta_{j_l i} \\
&= \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3} + \delta_{j_i j_l} \frac{1}{2m_{j_i}}.
\end{aligned}$$

Eingesetzt in Gleichung (A.2) erhält man, nachdem die Elektronenmassen gleich 1 gesetzt wurden,

$$\begin{aligned}
\tilde{P}_{0,\eta} &= -\frac{1}{2M} \Delta_{\eta_1} - h^2 \Delta_{\eta_2} - \sum_{i \in \dot{C}_1} \frac{1}{2} \Delta_{\eta_i} - \frac{1}{2m_1} \left(\sum_{i \in \dot{C}_1} \nabla_{\eta_i} \right)^2 \\
&\quad - \left(\frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3} \right) \Delta_{\eta_3} - \sum_{i \in \dot{C}_2} \frac{1}{2} \Delta_{\eta_i} - \left(\frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3} \right) \left(\sum_{i \in \dot{C}_2} \nabla_{\eta_i} \right)^2,
\end{aligned}$$

was wegen der Zuordnungen $\eta_1 = s$, $\eta_2 = x$, $\eta_3 = z$ und $\eta_i = y_i$ für $i \in \dot{C}_1 \cup \dot{C}_2$ gerade die Behauptung der Proposition ist. \blacksquare

A.2 Definitionsbereich des Operators der internen kinetischen Energie

Wir verwenden zunächst weiter die Bezeichnungen des vorigen Kapitels.

Mit Blick auf Gleichung (A.3) ist

$$P_0^c := - \sum_{k=3}^{\hat{N}} \sum_{l=3}^{\hat{N}} b_{kl} \nabla_{\eta_k} \cdot \nabla_{\eta_l}$$

der Operator der internen kinetischen Energie, denn es treten hier alleine die Ableitungen nach den clusterinternen Koordinaten η_i , $i \geq 3$, auf.

Wir beweisen

Proposition A.2.1 :

Der Operator P_0^c ist selbstadjungiert auf $H^2(\mathbb{R}^{n(N+1)})$ und wesentlich selbstadjungiert auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^{n(N+1)})$.

Es gilt

$$\sigma(P_0^c) = \sigma_{ess}(P_0^c) = [0, \infty[\quad . \quad (\text{A.4})$$

Beweis:

Beim Beweis verwenden wir erneut Teile der Diplomarbeit von Carsten Erdmann.

Es ist unter unseren Voraussetzungen und mit den verwendeten Koordinaten möglich, wie wir anschließend nachweisen, Resultate aus [Erd], Kapitel III, zu benutzen.

Dort wird in Korollar (4) gezeigt, daß der Operator P_0^c elliptisch ist; in Satz (10) wird die Selbstadjungiertheit und wesentliche Selbstadjungiertheit¹ bewiesen. Die Korollare (11) und (12) bringen dann die behauptete Aussage über die Spektren und den maximalen Definitionsbereich $H^2(\mathbb{R}^{n(N+1)})$. Damit ist die Proposition vollständig bewiesen.

Um den Nachweis der Anwendbarkeit dieser Resultate aus [Erd] zu erbringen, bemerken wir zunächst, daß der einzige Unterschied die Wahl der Koordinaten ist. Die Argumentation von Erdmann beruht im wesentlichen auf der Tatsache, daß die Matrix $(\tilde{b}_{kl}) \in \mathcal{M}(N+1, N+1)$ positiv definit ist. Alle anderen Argumente haben nichts mit der speziellen Wahl der Koordinaten zu tun.²

¹Bei Erdmann wird die wesentliche Selbstadjungiertheit des Operators auf $C_0^\infty(\mathbb{R}^{n(N+1)})$ bewiesen. Man sieht aber, daß der dortige Beweis auch für $\mathcal{S}(\mathbb{R}^{n(N+1)})$ richtig ist.

²Wir müssen also die entsprechende Aussage von Lemma (1) aus [Erd] (Kapitel III) zeigen und merken an, daß die Transformationsmatrix dort mit (L_{ik}) bezeichnet wird.

Wir nehmen ohne Beschränkung der Allgemeinheit an, daß $C_1 = \{4, \dots, n_1 + 3\}$ und $C_2 = \{n_1 + 4, \dots, N + 3\}$ gelten. Außerdem ist es nützlich, die Koordinatenbezeichnungen des vorigen Kapitels noch einmal zu modifizieren. Wir setzen $(\theta_1, \dots, \theta_{N+1}) := (\eta_3, \eta_4, \dots, \eta_{N+3}) = (z, y_1, \dots, y_N)$.

Für den Operator der internen kinetischen Energie erhalten wir dementsprechend

$$P_0^c = \sum_{k=1}^{N+1} \sum_{l=1}^{N+1} \tilde{b}_{kl} \nabla_{\theta_k} \cdot \nabla_{\theta_l},$$

und wollen nun zeigen, daß (\tilde{b}_{kl}) positiv definit ist.

Um Schreibarbeit zu sparen, verwenden wir die Abkürzungen $m_{23} := \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3}$, $n_2 := N - n_1$ und erhalten

$$(\tilde{b}_{kl}) = \begin{pmatrix} m_{23} & 0 & 0 \\ 0 & D_{C_1} & 0 \\ 0 & 0 & D_{C_2} \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

mit der (n_1, n_1) -Matrix D_{C_1} und der (n_2, n_2) -Matrix D_{C_2} .

Dabei gelten

$$D_{C_1} = \begin{pmatrix} (\frac{1}{2m_1} + 1) & \frac{1}{2m_1} & \cdots & \frac{1}{2m_1} \\ \frac{1}{2m_1} & (\frac{1}{2m_1} + 1) & \cdots & \frac{1}{2m_1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{1}{2m_1} & \cdots & (\frac{1}{2m_1} + 1) & \frac{1}{2m_1} \\ \frac{1}{2m_1} & \cdots & \frac{1}{2m_1} & (\frac{1}{2m_1} + 1) \end{pmatrix},$$

und

$$D_{C_2} = \begin{pmatrix} (m_{23} + 1) & m_{23} & \cdots & m_{23} \\ m_{23} & (m_{23} + 1) & \cdots & m_{23} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ m_{23} & \cdots & (m_{23} + 1) & m_{23} \\ m_{23} & \cdots & m_{23} & (m_{23} + 1) \end{pmatrix}.$$

Es ist $m_{23} > 0$, und wegen der Gestalt von (\tilde{b}_{kl}) bleibt zu zeigen, daß die Matrizen D_{C_1} und D_{C_2} positiv definit sind.

Da beide Matrizen von derselben Gestalt sind, dürfen uns dabei auf D_{C_2} beschränken und schreiben. Diese schreiben wir folgendermaßen als Summe:

$$D_{C_2} = \underbrace{\begin{pmatrix} m_{23} & m_{23} & \cdots & m_{23} \\ m_{23} & m_{23} & \cdots & m_{23} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ m_{23} & \cdots & m_{23} & m_{23} \\ m_{23} & \cdots & m_{23} & m_{23} \end{pmatrix}}_{=: \tilde{D}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{=: I_{n_2}} .$$

Die zweite Matrix ist offensichtlich positiv definit, und wir zeigen jetzt, daß die erste Matrix positiv semidefinit ist.

Für $\vartheta = (\vartheta_1, \dots, \vartheta_{n_2}) \in \mathbb{R}^{n_2}$ ist nämlich

$$\begin{aligned} \vartheta^T \tilde{D} \vartheta &= (\vartheta_1, \dots, \vartheta_{n_2}) \begin{pmatrix} m_{23} & m_{23} & \cdots & m_{23} \\ m_{23} & m_{23} & \cdots & m_{23} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ m_{23} & \cdots & m_{23} & m_{23} \\ m_{23} & \cdots & m_{23} & m_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vartheta_1 \\ \vartheta_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \vartheta_{n_2} \end{pmatrix} \\ &= m_{23}(\vartheta_1, \dots, \vartheta_{n_2}) \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n_2} \vartheta_i \\ \sum_{i=1}^{n_2} \vartheta_i \\ \cdot \\ \cdot \\ \sum_{i=1}^{n_2} \vartheta_i \\ \sum_{i=1}^{n_2} \vartheta_i \end{pmatrix} \\ &= m_{23} \left(\vartheta_1 \sum_{i=1}^{n_2} \vartheta_i, \dots, \vartheta_{n_2} \sum_{i=1}^{n_2} \vartheta_i \right) \\ &= m_{23} \left(\sum_{i=1}^{n_2} \vartheta_i \right)^2 \\ &\geq 0 . \end{aligned}$$

Damit ist in der Tat (\tilde{b}_{kl}) positiv definit.

■

A.3 Zwei Ungleichungen

Wir beweisen nun zwei Ungleichungen, die im Hauptteil gebraucht werden und den Ausdruck $\langle \cdot \rangle := (1 + |\cdot|^2)^{\frac{1}{2}}$ betreffen.

Lemma A.3.1 :

Für $\rho > 0$ gilt

$$\langle \eta_1 + \eta_2 \rangle^{-\rho} \leq 2^{\frac{\rho}{2}} \langle \eta_1 \rangle^{-\rho} \langle \eta_2 \rangle^{\rho} \quad (\eta_1, \eta_2 \in \mathbb{R}^d) \quad . \quad (\text{A.6})$$

Beweis:

Zunächst hat man die Äquivalenz

$$(\text{A.6}) \Leftrightarrow \frac{1}{1 + |\eta_1 + \eta_2|^2} \leq 2 \frac{1 + |\eta_2|^2}{1 + |\eta_1|^2} \Leftrightarrow \frac{1 + |\eta_1|^2}{1 + |\eta_1 + \eta_2|^2} \leq 2(1 + |\eta_2|^2) \quad .$$

Daß die Ungleichung ganz rechts wahr ist, folgt aus

$$\begin{aligned} \frac{1 + |\eta_1|^2}{1 + |\eta_1 + \eta_2|^2} & \stackrel{\theta = \eta_1 + \eta_2}{=} \frac{1 + |\theta - \eta_2|^2}{1 + |\theta|^2} \\ & \leq \frac{1 + |\theta - \eta_2|^2 + |\theta + \eta_2|^2}{1 + |\theta|^2} \\ & \stackrel{\text{Parallelogrammregel}}{=} \frac{1 + 2|\theta|^2 + 2|\eta_2|^2}{1 + |\theta|^2} \\ & \leq 2 \frac{1 + |\theta|^2 + |\eta_2|^2}{1 + |\theta|^2} \\ & = 2 \left(1 + \underbrace{\frac{1}{1 + |\theta|^2} |\eta_2|^2}_{\geq 1} \right) \\ & \leq 2(1 + |\eta_2|^2) \quad . \end{aligned}$$

Das Lemma ist damit bewiesen. ■

Lemma A.3.2 :

Für $L \in \mathcal{B}(R^{n(N+1)}; R^n)$ und $C := \max\{\|L\|_{\mathcal{B}}, 1\}$ gilt

$$\bigvee_{\tilde{y} \in R^{n(N+1)}} \langle L(\tilde{y}) \rangle_{R^n} \leq \sqrt{C} \langle \tilde{y} \rangle_{R^{n(N+1)}} \quad (\text{A.7})$$

Beweis:

Für $(\tilde{y}) \in \mathbb{R}^{n(N+1)}$ gilt wegen der Monotonie der Wurzelfunktion

$$\begin{aligned}\langle L(\tilde{y}) \rangle_{\mathbb{R}^n} &= (1 + |L(\tilde{y})|^2)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq (1 + \|L\|_{\mathcal{B}}^2 |\tilde{y}|^2)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq \sqrt{C} (1 + |\tilde{y}|^2)^{\frac{1}{2}} \\ &= \sqrt{C} \langle \tilde{y} \rangle_{\mathbb{R}^{n(N+1)}},\end{aligned}$$

und die Behauptung ist bereits bewiesen. ■

A.4 Regularität der Resolvente von $P_{el}(x)$

Wir werden in diesem Abschnitt die Norm-Resolventenstetigkeit der Operatoren $\{P_{el}(x) \mid x \in \mathbb{R}^n\}$ (Lemma A.4.1) und die beliebige Differenzierbarkeit der Resolventen (Lemma A.4.2) beweisen, sowie eine Darstellung dieser Ableitung (Lemma A.4.3) herleiten.

Zuvor erinnern wir an die Vereinbarungen

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_c &= L^2(\mathbb{R}_{y,z}^{n(N+1)}) \\ R_\zeta(x) &= (\zeta - P_{el}(x))^{-1} \quad .\end{aligned}$$

Um Schreibarbeit zu sparen, werden wir gelegentlich die Abkürzungen $R := R_\zeta(x)$ und $\mathcal{B} := \mathcal{B}(\mathcal{H}_c)$ benutzen.

Lemma A.4.1 :

Unter der Voraussetzung (D_ρ) gilt für $\zeta \in \bigcap_{x \in \mathbb{R}^n} \rho(P_{el}(x))$

$$R_\zeta(\cdot) \in C\left(\mathbb{R}^n; \mathcal{B}(\mathcal{H}_c)\right) \quad .$$

Die Operatorfamilie $\{P_{el}(x) \mid x \in \mathbb{R}^n\}$ ist norm-resolventenstetig.

Beweis:

Es muß gezeigt werden

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} \|R_\zeta(x + \xi) - R_\zeta(x)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_c)} = 0 \quad (x \in \mathbb{R}^n, \Im(z) \neq 0) \quad .$$

Nach [RS1] (Theorem VIII.19) reicht der Nachweis von

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} \|R_i(x + \xi) - R_i(x)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_c)} = 0 \quad (x \in \mathbb{R}^n) \quad .$$

Dazu sei $x \in \mathbb{R}^n$ beliebig. Nach der zweiten Resolventenidentität und der Selbstadjungiertheit der $P_{el}(x)$ folgt

$$\begin{aligned}\|R_i(x + \xi) - R_i(x)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_c)} &= \|R_i(x + \xi) (I_c(x + \xi) - I_c(x)) R_i(x)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_c)} \\ &\leq \underbrace{\|R_i(x + \xi)\|_{\mathcal{B}}}_{\leq 1} \|I_c(x + \xi) - I_c(x)\|_{\mathcal{B}} \underbrace{\|R_i(x)\|_{\mathcal{B}}}_{\leq 1},\end{aligned}$$

und der Beweis ist vollbracht, wenn wir

$$\lim_{\|\xi\| \rightarrow 0} \|I_c(x + \xi) - I_c(x)\|_{\mathcal{B}}$$

zeigen können.

Dazu wählen wir $\epsilon > 0$ beliebig und zeigen, daß mit geeignetem $C \geq 0$ für $\|\xi\| < \epsilon$ gilt

$$\|I_c(x + \xi) - I_c(x)\|_{\mathcal{B}} \leq \epsilon C \quad . \quad (\text{A.8})$$

Hierzu bemerken wir, daß wegen (D_ρ) der Gradient von I_c global beschränkt ist:

$$\sup_{(x,y,z) \in \mathbf{R}^{n(N+2)}} \|\nabla_x I_c(x)(y, z)\| =: C < \infty,$$

Nach dem Mittelwertsatz existiert jetzt ein $s_0 \in [0, 1]$ derart, daß

$$\begin{aligned} & \sup_{0 < \|\xi\| < \epsilon} \sup_{(y,z) \in \mathbf{R}^{n(N+1)}} \left| I_c(x + \xi)(y, z) - I_c(x)(y, z) \right| \\ &= \sup_{0 < \|\xi\| < \epsilon} \sup_{(y,z) \in \mathbf{R}^{n(N+1)}} \left| \nabla_x I_c(x + s_0(\xi - x))(y, z) \cdot \xi \right| \\ &\leq \sup_{0 < \|\xi\| < \epsilon} \underbrace{\sup_{(x,y,z) \in \mathbf{R}^{n(N+2)}} \|\nabla_x I_c(x)(y, z)\|}_{=: C < \infty} \|\xi\| \\ &\leq \epsilon C, \end{aligned}$$

womit die Gleichung (A.8) für $\|\xi\| < \epsilon$ bewiesen ist. ■

Lemma A.4.2 :

Unter der Voraussetzung (D_ρ) gilt für $\zeta \in \bigcap_{x \in \mathbf{R}^n} \rho(P_{ei}(x))$

$$R_\zeta(\cdot) \in C^\infty\left(\mathbf{R}_x^n; \mathcal{B}(\mathcal{H}_c)\right). \quad (\text{A.9})$$

Beweis:

Wie beim Beweis der Stetigkeit ist auch hier die Anwendung des Mittelwertsatzes der Kern des Beweises. Wir zeigen, daß R_ζ nach allen Koordinaten x_j stetig partiell differenzierbar ist und werden dabei erkennen, daß man analog für höhere Ableitungen vorgehen kann.

Mit $\{e_j\}_{j=1}^n$ bezeichnen wir die Standardbasis des \mathbf{R}_x^n , ∂_x^j sei die partielle Ableitung nach der j -ten Koordinate. Für beliebiges $x \in \mathbf{R}^n$ und $1 \leq j \leq n$ schreibt sich der Grenzwert des Differenzenquotienten dann wie folgt, wenn man erneut die zweite Resolventenidentität anwendet:

$$\begin{aligned} \partial_x^j R_\zeta(x) &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{R_\zeta(x + te_j) - R_\zeta(x)}{t} \\ &= \lim_{t \rightarrow 0} R_\zeta(x + te_j) \lim_{t \rightarrow 0} \frac{I_c(x + te_j) - I_c(x)}{t} R_\zeta(x), \end{aligned}$$

wobei wir den Limes in der Operatornorm zu bilden haben.

Nach dem vorigen Lemma ist $\lim_{t \rightarrow 0} R_\zeta(x + te_j) = R_\zeta(x)$. Weiter zeigen wir

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{I_c(x + te_j) - I_c(x)}{t} = (\partial_x^j I_c)(x) \quad . \quad (\text{A.10})$$

Dazu sei wieder $\epsilon > 0$. Nach dem Mittelwertsatz existiert zu t ein s_t mit $|s_t| < |t|$ derart, daß

$$\frac{I_c(x + te_j) - I_c(x)}{t} - (\partial_x^j I_c)(x)(y, z) = (\partial_x^j I_c)(x + s_t e_j)(y, z) - (\partial_x^j I_c)(x)(y, z),$$

und wegen der gleichmäßigen Stetigkeit aller Ableitungen von I_c auf $\mathbb{R}^{n(N+2)}$ existiert $C > 0$ mit

$$\begin{aligned} & \sup_{0 < |t| < \epsilon} \sup_{(y, z) \in \mathbb{R}^{n(N+1)}} \left| \frac{I_c(x + te_j) - I_c(x)}{t} - (\partial_x^j I_c)(x)(y, z) \right| \\ &= \sup_{0 < |t| < \epsilon} \sup_{(y, z) \in \mathbb{R}^{n(N+1)}} \left| (\partial_x^j I_c)(x + s_t e_j)(y, z) - (\partial_x^j I_c)(x)(y, z) \right| \\ &\leq \sup_{0 < |t| < \epsilon} C \|s_t e_j\| \\ &= C \sup_{0 < |t| < \epsilon} |s_t| \\ &\leq \epsilon C \quad . \end{aligned}$$

Damit ist

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left\| \frac{R_\zeta(x + te_j) - R_\zeta(x)}{t} - R_\zeta(x)(\partial_x^j I_c)(x)R_\zeta(x) \right\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_c)} = 0$$

nachgewiesen und somit R_ζ nach allen x_j einmal stetig partiell differenzierbar.

Entsprechend der Voraussetzung (D_ρ) gilt die Gleichung (A.10) aber nicht nur für I_c selbst, sondern kann analog auch für beliebige partielle Ableitungen ∂_x^α ($\alpha \in \mathbb{N}_0^n$) bewiesen werden:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{(\partial_x^\alpha I_c)(x + te_j) - (\partial_x^\alpha I_c)(x)}{t} = (\partial_x^j \partial_x^\alpha I_c)(x) \quad (1 \leq j \leq n).$$

Benutzt man dieses Resultat beim Differenzieren einer ersten partiellen Ableitung, so bekommt man nach der Leibnizregel

$$\begin{aligned} \partial_x^k \partial_x^j R_\zeta &= \partial_x^k \left(R_\zeta(\partial_x^j I_c)R_\zeta \right) \\ &= R_\zeta(\partial_x^k I_c)R_\zeta(\partial_x^j I_c)R_\zeta + R_\zeta(\partial_x^k \partial_x^j I_c)R_\zeta + R_\zeta(\partial_x^j I_c)R_\zeta(\partial_x^k I_c)R_\zeta \quad . \end{aligned}$$

Man erkennt auf diese Weise, daß auch alle zweiten partiellen Ableitungen stetig sind.

Da man dieses Verfahren offensichtlich beliebig oft fortsetzen kann, ergibt sich, daß beliebige partielle Ableitungen von R_ζ existieren und stetig sind. Daher ist $R_\zeta \in C^\infty(\mathbb{R}^n; \mathcal{B}(\mathcal{H}_c))$ und die Behauptung des Lemmas bewiesen. ■

Lemma A.4.3 :

Es gelte wieder (D_ρ) . Für $\alpha \in \mathbb{N}_0^n$ mit $|\alpha| > 0$ existieren natürliche Zahlen $c_{\gamma_1 \dots \gamma_l}$ derart, daß

$$\partial_x^\alpha R_\zeta = \sum_{l=1}^{|\alpha|} \sum_{\substack{\gamma_1 + \dots + \gamma_l = \alpha \\ 0 \neq \gamma_i \in \mathbb{N}_0^n}} c_{\gamma_1 \dots \gamma_l} R_\zeta(\partial_x^{\gamma_1} I_c) R_\zeta(\partial_x^{\gamma_2} I_c) R_\zeta \dots R_\zeta(\partial_x^{\gamma_l} I_c) R_\zeta \quad (\text{A.11})$$

Beweis:

Wir werden den Beweis induktiv über $|\alpha|$ führen.

Um die Ausdrücke übersichtlich zu halten, bezeichnen wir für $1 \leq l$ mit $I_\alpha(l)$ die l -Tupel von Multiindices ungleich Null, deren Summe gerade α ist:

$$I_\alpha(l) := \{(\gamma_1, \dots, \gamma_l) \mid 0 \neq \gamma_i \in \mathbb{N}_0^n, \gamma_1 + \dots + \gamma_l = \alpha\}$$

Weiter vereinbaren wir

$$S(\gamma_1, \dots, \gamma_l) := R(\partial_x^{\gamma_1} I_c) R \dots R(\partial_x^{\gamma_l} I_c) R, \quad (\text{A.12})$$

und die Gleichung (A.11) schreibt sich jetzt als

$$\partial_x^\alpha R = \sum_{l=1}^{|\alpha|} \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_l) \in I_\alpha(l)} c_{\gamma_1 \dots \gamma_l} S(\gamma_1, \dots, \gamma_l) \quad . \quad (\text{A.13})$$

Für den Induktionsanfang ist $|\alpha| = 1$, und wir notieren $I_\alpha(1) = \{\alpha\}$.

Es ist zu zeigen, daß c_α existiert mit

$$\partial_x^\alpha R = c_\alpha R_\zeta(\partial_x^\alpha I_c) R_\zeta \quad .$$

Dieses wurde beim Beweis des vorigen Lemmas mit $c_\alpha = 1$ bereits nachgewiesen.

Um den Induktionsschritt zu zeigen, nehmen wir an, daß ein $L \in \mathbb{N}$ existiert, derart daß die Aussage des Lemmas für alle $\beta \in \mathbb{N}_0^n$ mit $|\beta| = L - 1 \in \mathbb{N}$ wahr ist.

Nun sei $\alpha \in \mathbb{N}_0^n$ mit $|\alpha| = L$ beliebig, so daß wir schreiben können $\alpha = \beta + e$ mit $|e| = 1$.

Für $l < |\beta|$ ergibt sich durch Anwendung der Leibnizregel auf $(\gamma_1, \dots, \gamma_l) \in I_\beta(l)$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{c_{\gamma_1 \dots \gamma_l}} \partial_x^e S(\gamma_1, \dots, \gamma_l) &= \partial_x^e \left(R(\partial_x^{\gamma_1} I_c) R(\partial_x^{\gamma_2} I_c) R \dots R(\partial_x^{\gamma_l} I_c) R \right) \\
&= R(\partial_x^e I_c) R(\partial_x^{\gamma_1} I_c) R(\partial_x^{\gamma_2} I_c) R \dots R(\partial_x^{\gamma_l} I_c) R \\
&\quad + R(\partial_x^{\gamma_1} I_c) R(\partial_x^e I_c) R \dots R(\partial_x^{\gamma_l} I_c) \\
&\quad + \dots + \dots \\
&\quad + R(\partial_x^{\gamma_1} I_c) R(\partial_x^{\gamma_2} I_c) R \dots R(\partial_x^{\gamma_l} I_c) R(\partial_x^e I_c) R \\
&\quad + R(\partial_x^{e+\gamma_1} I_c) R(\partial_x^{\gamma_2} I_c) R \dots R(\partial_x^{\gamma_l} I_c) R \\
&\quad + R(\partial_x^{\gamma_1} I_c) R(\partial_x^{e+\gamma_2} I_c) R \dots R(\partial_x^{\gamma_l} I_c) R \\
&\quad + \dots + \dots \\
&\quad + R(\partial_x^{\gamma_1} I_c) R(\partial_x^{\gamma_2} I_c) R \dots R(\partial_x^{e+\gamma_l} I_c) R \quad .
\end{aligned}$$

Wir berechnen nun $\partial_x^\alpha R$, wobei wir die Induktionsvoraussetzung und die eben hergeleitete Darstellung von $\partial_x^e S(\gamma_1, \dots, \gamma_l)$ benutzen:

$$\begin{aligned}
\partial_x^\alpha R &= \partial_x^e \left(\partial_x^\beta R \right) \\
&\stackrel{I.V.}{=} \partial_x^e \left[\sum_{l=1}^{|\beta|} \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_l) \in I_\beta(l)} c_{\gamma_1 \dots \gamma_l} S(\gamma_1, \dots, \gamma_l) \right] \\
&= \sum_{l=1}^{|\beta|} \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_l) \in I_\beta(l)} c_{\gamma_1 \dots \gamma_l} \left[S(e, \gamma_1, \dots, \gamma_l) + \dots + S(\gamma_1, \dots, \gamma_l, e) \right] \\
&\quad + \sum_{l=1}^{|\beta|} \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_l) \in I_\beta(l)} c_{\gamma_1 \dots \gamma_l} \left[S(e + \gamma_1, \dots, \gamma_l) + \dots + S(\gamma_1, \dots, \gamma_l + e) \right] \quad .
\end{aligned}$$

Wegen $\alpha = e + \beta$ hat man für $1 \leq l \leq L - 1$ die Mengengleichheiten

$$\begin{aligned}
I_\alpha(l+1) &= \left\{ (e, \gamma_1, \dots, \gamma_l), \dots, (\gamma_1, \dots, \gamma_l, e) \mid (\gamma_1, \dots, \gamma_l) \in I_\beta(l) \right\}, \\
I_\alpha(l) &= \left\{ (e + \gamma_1, \dots, \gamma_l), \dots, (\gamma_1, \dots, e + \gamma_l) \mid (\gamma_1, \dots, \gamma_l) \in I_\beta(l) \right\},
\end{aligned}$$

so daß man weiter erhält

$$\begin{aligned}
\partial_x^\alpha R &= \sum_{l=2}^{|\alpha|} \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_l) \in I_\alpha(l)} \tilde{c}_{\gamma_1 \dots \gamma_l} S(\gamma_1, \dots, \gamma_l) \\
&\quad + \sum_{l=1}^{|\alpha|-1} \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_l) \in I_\alpha(l)} \hat{c}_{\gamma_1 \dots \gamma_l} S(\gamma_1, \dots, \gamma_l) \quad .
\end{aligned}$$

Dabei gehen die Koeffizienten $\tilde{c}_{\gamma_1 \dots \gamma_l}$ und $\hat{c}_{\gamma_1 \dots \gamma_l}$ aus den alten $c_{\gamma_1 \dots \gamma_l}$ hervor und sind daher natürliche Zahlen. Faßt man in der letzten Gleichung die mehrfach vorkom-

menden Terme zusammen, so ist mit geeigneten Koeffizienten schließlich

$$\partial_x^\alpha R = \sum_{l=1}^{|\alpha|} \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_l) \in I_\alpha(l)} c_{\gamma_1 \dots \gamma_l} S(\gamma_1, \dots, \gamma_l) \quad .$$

Damit haben wir den Induktionsschritt bewiesen, denn dies ist gerade die Induktionsbehauptung für α .

Der Induktionsbeweis ist damit abgeschlossen und das Lemma bewiesen. ■

A.5 Die Operatoren $\langle \cdot \rangle^\tau R_\zeta(x) \langle \cdot \rangle^{-\tau}$ und $\langle \cdot \rangle^\tau R_\zeta \langle \cdot \rangle^{-\tau}$

In diesem Abschnitt wird gezeigt, daß die Operatoren des Typs $\langle \cdot \rangle^\tau (\zeta - P_{el}(x))^{-1} \langle \cdot \rangle^{-\tau}$ beziehungsweise $\langle \cdot \rangle^\tau (\zeta - P^c)^{-1} \langle \cdot \rangle^{-\tau}$ für $\tau \geq 0$ beschränkte Operatoren in $\mathcal{B}(\mathcal{H}_c)$ sind. Dabei sei an die Bezeichnungen $R_\zeta(x) = (\zeta - P_{el}(x))^{-1}$ und $R_\zeta = (\zeta - P^c)^{-1}$ aus dem Hauptteil erinnert.

Wir erwähnen als erstes, daß für $\tau \geq 0$ die Funktion $\langle \cdot \rangle^\tau : \mathbb{R}^{n(N+1)} \rightarrow \mathbb{R}$ differenzierbar ist, und man durch einfaches Differenzieren nachweist, daß sie für $\tau \leq 1$ inklusive aller ihrer Ableitungen global beschränkt ist:

$$\sup_{(y,z) \in \mathbb{R}^{n(N+1)}} \left| (\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau)(y, z) \right| < \infty \quad (\alpha \in \mathbb{N}_0^{n(N+1)}, \tau \leq 1),$$

wobei wir die Abkürzung $\partial^\alpha := \partial_{y,z}^\alpha$ verwenden. Damit gilt

$$(\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau) \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_c) \quad (\alpha \in \mathbb{N}_0^{n(N+1)}, \tau \leq 1). \quad (\text{A.14})$$

Um Schreibarbeit zu sparen, seien wahlweise $G := I^c$ beziehungsweise $G := I^c + I_c(x)$ und $R := (P_0^c + G + i)^{-1}$ sowie $R_0 := (P_0^c + i)^{-1}$. In beiden Fällen ist der Multiplikationsoperator G unter der Voraussetzung (D_ρ) ein beschränkter Operator und damit relativ beschränkt zu $P_0^c + G$ mit beliebig kleiner Schranke.

Mit dieser Notation ist zunächst $\partial^\alpha R_0 \partial^\beta \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_c)$ für $|\alpha| + |\beta| \leq 2$. Wegen der relativen Beschränktheit gilt dann auch

$$\partial^\alpha R \partial^\beta \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_c) \quad (|\alpha| + |\beta| \leq 2). \quad (\text{A.15})$$

Da wir später die Resolvente entlang eines Weges in der Resolventenmenge integrieren, und wir dann auch eine uniforme Schranke für x brauchen werden, bemerken wir an dieser Stelle, daß im Fall $R = R_\zeta(x)$ die Norm alleine durch den Abstand von ζ zum Spektrum von $P_{el}(x)$ bestimmt wird.

Bevor wir zur eigentlichen Proposition A.5.2 kommen, beweisen wir ein Lemma, das dort beim Beweis gebraucht wird.

Lemma A.5.1 :

Für $\tau \leq 1$ und $\tilde{\alpha} \in \mathbb{N}_0^{n(N+1)}$ existieren beschränkte Funktionen $A_\gamma, B \in C^\infty(\mathbb{R}^{n(N+1)}; \mathbb{R})$ derart, daß

$$\left[(\partial^{\tilde{\alpha}} \langle \cdot \rangle^\tau), R \right] = \sum_{|\gamma|=1} R A_\gamma \partial^\gamma R + R B R \quad . \quad (\text{A.16})$$

Weiter gilt für $|\alpha| + |\beta| \leq 2$

$$\partial^\alpha \left[(\partial^{\tilde{\alpha}} \langle \cdot \rangle^\tau), R \right] \partial^\beta \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_c) \quad (\text{A.17})$$

Beweis:

Durch Kommutatorbildung $[P_0^c, (\partial^{\tilde{\alpha}}\langle \cdot \rangle^\tau)]$ fallen die Ableitungen 2. Ordnung des Differentialoperators P_0^c heraus, und man hat

$$\left[P_0^c, (\partial^{\tilde{\alpha}}\langle \cdot \rangle^\tau) \right] = \sum_{|\gamma|=1} A_\gamma \partial^\gamma + B \quad .$$

Die A_γ und B sind dabei Summen von Ableitungen der Funktion $\langle \cdot \rangle^\tau$ maximaler Ordnung $|\tilde{\alpha}| + 1$. Diese Funktionen sind demnach beliebig oft differenzierbar und beschränkt auf $\mathbb{R}^{n(N+1)}$, wie wir eingangs dieses Kapitels festgestellt haben, und induzieren deswegen auch beschränkte Multiplikationsoperatoren.

Nutzt man weiter aus, daß die Multiplikationsoperatoren G und $(\partial^{\tilde{\alpha}}\langle \cdot \rangle^\tau)$ miteinander kommutieren, so ergibt sich mit $R(P_0^c + G + i) = Id_{\mathbb{R}^{n(N+1)}}$

$$\begin{aligned} \left[(\partial^{\tilde{\alpha}}\langle \cdot \rangle^\tau), R \right] &= (\partial^{\tilde{\alpha}}\langle \cdot \rangle^\tau)R - R(\partial^{\tilde{\alpha}}\langle \cdot \rangle^\tau) \\ &= R(P_0^c + G + i)(\partial^{\tilde{\alpha}}\langle \cdot \rangle^\tau)R - R(\partial^{\tilde{\alpha}}\langle \cdot \rangle^\tau)(P_0^c + G + i)R \\ &= R \left[P_0^c + G + i, (\partial^{\tilde{\alpha}}\langle \cdot \rangle^\tau) \right] R \\ &= R \left[P_0^c, (\partial^{\tilde{\alpha}}\langle \cdot \rangle^\tau) \right] R \\ &= R \left(\sum_{|\gamma|=1} A_\gamma \partial^\gamma + B \right) R \quad . \end{aligned}$$

Damit ist die erste Behauptung bewiesen.

Für $|\alpha| + |\beta| \leq 2$ gilt nach obiger Darstellung weiter

$$\begin{aligned} \partial^\alpha \left[(\partial^{\tilde{\alpha}}\langle \cdot \rangle^\tau), R \right] \partial^\beta &= \partial^\alpha R \left(\sum_{|\gamma|=1} A_\gamma \partial^\gamma + B \right) R \partial^\beta \\ &= \sum_{|\gamma|=1} \underbrace{\partial^\alpha R}_{\in \mathcal{B}} A_\gamma \underbrace{\partial^\gamma R \partial^\beta}_{\in \mathcal{B}} + \underbrace{\partial^\alpha R B R \partial^\beta}_{\in \mathcal{B}} \in \mathcal{B} \quad . \end{aligned}$$

Die Beschränktheit der Terme $\partial^\alpha R$, $\partial^\gamma R \partial^\beta$ und $R \partial^\beta$ folgt Gleichung (A.15). Lediglich auf die Operatoren $\partial^\alpha R A_\gamma \partial^\gamma R \partial^\beta$ im Fall $\alpha = 0$ und $|\beta| = 2$ ist diese Argumentation nicht anwendbar. Allerdings können wir hier schreiben

$$R A_\gamma \partial^\gamma R \partial^\beta = \underbrace{\left[R, A_\gamma \right] \partial^\gamma R \partial^\beta}_{\in \mathcal{B}} + A_\gamma \underbrace{R \partial^\gamma}_{\in \mathcal{B}} \underbrace{R \partial^\beta}_{\in \mathcal{B}} \in \mathcal{B} \quad .$$

Dabei ist $[R, A_\gamma] \partial^\gamma$ ein beschränkter Operator nach dem bisher schon Gezeigten, wenn man beachtet, daß die Funktionen A_γ selbst wieder vom Typ $(\partial^{\tilde{\beta}}\langle \cdot \rangle^\tau)$ mit $\tilde{\beta} \in \mathbb{N}_0^{n(N+1)}$ sind.

Damit ist auch die zweite Behauptung des Lemmas bewiesen. ■

Die nächste Proposition bringt sogar ein etwas umfangreicheres Resultat als nur die Beschränktheit der Operatoren $\langle \cdot \rangle^\tau R \langle \cdot \rangle^{-\tau}$.

Man findet Teile der Aussage der Proposition auch in [RS4] (Lemma 1, S.172, allerdings mit unvollständigem Beweis). Wir orientieren uns beim Beweis an [Je] (S.127 ff) und merken dabei an, daß der Beweis auch dort nicht ganz vollständig ist.

Proposition A.5.2 :

Unter der Voraussetzung (D_ρ) gelten für $\alpha, \beta \in N_0^{n(N+1)}$ mit $|\alpha| + |\beta| \leq 2$ und ζ in der Resolventenmenge von P^c beziehungsweise $P_{el}(x)$

$$\bigwedge_{\tau \geq 0} \langle \cdot \rangle^\tau \partial_{y,z}^\alpha (P^c + \zeta)^{-1} \partial_{y,z}^\beta \langle \cdot \rangle^{-\tau} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_c)$$

$$\bigwedge_{\tau \geq 0} \langle \cdot \rangle^\tau \partial_{y,z}^\alpha (P_{el}(x) + \zeta)^{-1} \partial_{y,z}^\beta \langle \cdot \rangle^{-\tau} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_c)$$

Im zweiten Fall ist die Schranke bei festem τ alleine durch den Abstand von ζ zum Spektrum von $P_{el}(x)$ bestimmt ist.

Beweis:

Wir führen den Beweis für beide Behauptungen gleichzeitig. Das ist möglich, weil man in erster Linie die Beschränktheit der $\partial^\alpha R \partial^\beta$ und das Lemma A.5.1 benutzt, welche sowohl für $R = (P^c + \zeta)^{-1}$ als auch $R = (P_{el}(x) + \zeta)^{-1}$ gültig sind. Ansonsten spielt der Unterschied zwischen beiden Operatoren im Verlauf des Beweises keine Rolle.

Wir setzen

$$I(l) \quad :\Leftrightarrow \quad \left(\bigwedge_{0 \leq \tau \leq l} \bigwedge_{|\alpha| + |\beta| \leq 2} \langle \cdot \rangle^\tau \partial^\alpha R \partial^\beta \langle \cdot \rangle^{-\tau} \in \mathcal{B} \right), \quad (\text{A.18})$$

und beweisen induktiv, daß $I(l)$ für alle $l \in \mathbb{N}$ wahr ist.

Den Induktionsanfang $I(1)$ zeigen wir ausführlich für alle zugelassenen α und β . Dabei verwenden wir immer wieder das Resultat aus Lemma A.5.1, was hier wegen $\tau \leq 1$ möglich ist, und benutzen die Identitäten

$$\begin{aligned} \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau &= (\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau) + \langle \cdot \rangle^\tau \partial^\alpha \quad (|\alpha| = 1), \\ \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau &= \langle \cdot \rangle^\tau \partial^\alpha + \left(\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau \right) + \left(\partial^e \langle \cdot \rangle^\tau \right) \partial^f + \left(\partial^f \langle \cdot \rangle^\tau \right) \partial^e \quad (\alpha = e + f, |e| = |f| = 1), \\ \langle \cdot \rangle^\tau R &= \left[\langle \cdot \rangle^\tau, R \right] + \langle \cdot \rangle^\tau R \quad . \end{aligned}$$

Für $\alpha = \beta = 0$ haben wir

$$\langle \cdot \rangle^\tau R \langle \cdot \rangle^{-\tau} = R + \left[\langle \cdot \rangle^\tau, R \right] \langle \cdot \rangle^{-\tau} \in \mathcal{B} \quad .$$

Jetzt sei $|\alpha| = 1$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \langle \cdot \rangle^\tau \partial^\alpha R \langle \cdot \rangle^{-\tau} &= \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau R \langle \cdot \rangle^{-\tau} - (\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau) R \langle \cdot \rangle^{-\tau} \\ &= \underbrace{\partial^\alpha R}_{\in \mathcal{B}} + \underbrace{\partial^\alpha [\langle \cdot \rangle^\tau, R]}_{\in \mathcal{B}} \langle \cdot \rangle^{-\tau} - \underbrace{(\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau)}_{\in \mathcal{B}} R \langle \cdot \rangle^{-\tau} \in \mathcal{B} \quad . \quad (\text{A.19}) \end{aligned}$$

Weiter folgt

$$\begin{aligned} R \partial^\alpha &= R \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau \langle \cdot \rangle^{-\tau} \\ &= R (\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau) \langle \cdot \rangle^{-\tau} + R \langle \cdot \rangle^\tau \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau} \\ &\stackrel{(\text{A.16})}{=} R (\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau) \langle \cdot \rangle^{-\tau} - [\langle \cdot \rangle^\tau, R] \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau} + \langle \cdot \rangle^\tau R \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau}, \quad (\text{A.20}) \end{aligned}$$

und wir erhalten nach Umstellung dieser Gleichung

$$\langle \cdot \rangle^\tau R \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau} = R \partial^\alpha - \underbrace{R (\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau)}_{\in \mathcal{B}} \langle \cdot \rangle^{-\tau} + \underbrace{[\langle \cdot \rangle^\tau, R]}_{\in \mathcal{B}} \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau} \in \mathcal{B} \quad .$$

Nun sei $|\alpha| = 2$, also $\alpha = e + f$ mit $|e| = |f| = 1$.

Die Stetigkeit von $\langle \cdot \rangle^\tau \partial^\alpha R \langle \cdot \rangle^{-\tau}$ folgt aus

$$\begin{aligned} \langle \cdot \rangle^\tau \partial^\alpha R \langle \cdot \rangle^{-\tau} &= \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau R \langle \cdot \rangle^{-\tau} - (\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau) R \langle \cdot \rangle^{-\tau} - (\partial^e \langle \cdot \rangle^\tau) \partial^f R \langle \cdot \rangle^{-\tau} - (\partial^f \langle \cdot \rangle^\tau) \partial^e R \langle \cdot \rangle^{-\tau} \\ &= \partial^\alpha R + \underbrace{\partial^\alpha [\langle \cdot \rangle^\tau, R]}_{\in \mathcal{B}} \langle \cdot \rangle^{-\tau} \\ &\quad - \underbrace{\left((\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau) + (\partial^e \langle \cdot \rangle^\tau) \partial^f + (\partial^f \langle \cdot \rangle^\tau) \partial^e \right)}_{\in \mathcal{B}} R \langle \cdot \rangle^{-\tau} \end{aligned}$$

folgt.

Weiter gilt

$$\begin{aligned} R \partial^\alpha &= R \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau \langle \cdot \rangle^{-\tau} \\ &= R \left((\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau) + (\partial^e \langle \cdot \rangle^\tau) \partial^f + (\partial^f \langle \cdot \rangle^\tau) \partial^e \right) \langle \cdot \rangle^{-\tau} + R \langle \cdot \rangle^\tau \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau} \\ &= \langle \cdot \rangle^\tau R \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau} - [\langle \cdot \rangle^\tau, R] \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau} \\ &\quad + R \left((\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau) + (\partial^e \langle \cdot \rangle^\tau) \partial^f + (\partial^f \langle \cdot \rangle^\tau) \partial^e \right) \langle \cdot \rangle^{-\tau} \quad . \end{aligned}$$

und folglich ist

$$\begin{aligned} \langle \cdot \rangle^\tau R \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau} &= R \partial^\alpha + \underbrace{[\langle \cdot \rangle^\tau, R]}_{\in \mathcal{B}} \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau} \\ &\quad - \underbrace{R \left((\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau) + (\partial^e \langle \cdot \rangle^\tau) \partial^f + (\partial^f \langle \cdot \rangle^\tau) \partial^e \right)}_{\in \mathcal{B}} \langle \cdot \rangle^{-\tau} \\ &\in \mathcal{B} \quad . \end{aligned}$$

Schließlich seien $|\alpha| = |\beta| = 1$. Wir differenzieren Gleichung (A.20) von links mit ∂^β und bekommen

$$\begin{aligned}\partial^\beta R \partial^\alpha &= \partial^\beta R (\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau) \langle \cdot \rangle^{-\tau} - \partial^\beta \left[\langle \cdot \rangle^\tau, R \right] \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau} + \partial^\beta \langle \cdot \rangle^\tau R \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau} \\ &= \partial^\beta R (\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau) \langle \cdot \rangle^{-\tau} - \partial^\beta \left[\langle \cdot \rangle^\tau, R \right] \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau} + (\partial^\beta \langle \cdot \rangle^\tau) R \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau} + \langle \cdot \rangle^\tau \partial^\beta R \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau},\end{aligned}$$

sowie nach dem Umstellen der Gleichung

$$\begin{aligned}\langle \cdot \rangle^\tau \partial^\beta R \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau} &= \partial^\beta R \partial^\alpha - \underbrace{\partial^\beta R (\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau) \langle \cdot \rangle^{-\tau}}_{\in \mathcal{B}} + \underbrace{\partial^\beta \left[\langle \cdot \rangle^\tau, R \right] \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau}}_{\in \mathcal{B}} - (\partial^\beta \langle \cdot \rangle^\tau) R \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-\tau} \\ &\in \mathcal{B}\end{aligned}$$

Damit sind alle Teilaussagen von $I(1)$ gezeigt und der Induktionsanfang ist bewiesen.

Um den Induktionsschritt zu beweisen, nehmen wir an, es gebe ein $l \in \mathbb{N}$, so daß $I(l)$ gilt.

Wir zeigen, daß auch $I(l+1)$ wahr ist. Hierzu sei $0 \leq \tau \leq 1$ beliebig.

Nach der Induktionsvoraussetzung gilt zunächst für $|\alpha| + |\beta| \leq 2$

$$\langle \cdot \rangle^l \partial^\alpha \left[\langle \cdot \rangle^\tau, R \right] \partial^\beta \langle \cdot \rangle^{-l} \in \mathcal{B}, \quad (\text{A.21})$$

was wir wie folgt einsehen:

$$\begin{aligned}\langle \cdot \rangle^l \partial^\alpha \left[\langle \cdot \rangle^\tau, R \right] \partial^\beta \langle \cdot \rangle^{-l} &\stackrel{(\text{A.16})}{=} \langle \cdot \rangle^l \partial^\alpha R \left(\sum_{|\gamma|=1} A_\gamma \partial^\gamma + B \right) R \partial^\beta \langle \cdot \rangle^{-l} \\ &= \langle \cdot \rangle^l \partial^\alpha R \left(\sum_{|\gamma|=1} \langle \cdot \rangle^{-l} A_\gamma \langle \cdot \rangle^l \partial^\gamma + \langle \cdot \rangle^{-l} B \langle \cdot \rangle^l \right) R \partial^\beta \langle \cdot \rangle^{-l} \\ &= \sum_{|\gamma|=1} \underbrace{\langle \cdot \rangle^l \partial^\alpha R \langle \cdot \rangle^{-l}}_{\in \mathcal{B} \text{ nach I.V.}} A_\gamma \underbrace{\langle \cdot \rangle^l \partial^\gamma R \partial^\beta \langle \cdot \rangle^{-l}}_{\in \mathcal{B} \text{ nach I.V.}} + \underbrace{\langle \cdot \rangle^l \partial^\alpha R \langle \cdot \rangle^{-l}}_{\in \mathcal{B} \text{ nach I.V.}} B \underbrace{\langle \cdot \rangle^l R \partial^\beta \langle \cdot \rangle^{-l}}_{\in \mathcal{B} \text{ nach I.V.}},\end{aligned}$$

wobei wir die Identität $A_\gamma = \langle \cdot \rangle^l A_\gamma \langle \cdot \rangle^{-l}$ benutzt haben.

Die jeweilige Anwendung der Induktionsvoraussetzung ist dabei offensichtlich mit Ausnahme des Falles $\alpha = 0$ und $|\beta| = 2$. Dort müssen wir wieder, wie beim Beweis der zweiten Aussage von Lemma A.5.1, den Kommutator $[A_\gamma, R]$ ins Spiel bringen und können damit zeigen, daß die Terme $\langle \cdot \rangle^l R A_\gamma \partial^\gamma R \langle \cdot \rangle^{-l}$ beschränkt sind.

Wir kommen zum Beweis von $I(l+1)$ und beginnen wieder mit $\alpha = \beta = 0$. Wir erhalten umgehend

$$\begin{aligned}\langle \cdot \rangle^{l+\tau} R \langle \cdot \rangle^{-(l+\tau)} &= \langle \cdot \rangle^l R \langle \cdot \rangle^\tau \langle \cdot \rangle^{-(l+\tau)} + \langle \cdot \rangle^l \left[\langle \cdot \rangle^\tau, R \right] \langle \cdot \rangle^{-(l+\tau)} \\ &= \langle \cdot \rangle^l R \langle \cdot \rangle^{-l} + \underbrace{\langle \cdot \rangle^l \left[\langle \cdot \rangle^\tau, R \right] \langle \cdot \rangle^{-l} \langle \cdot \rangle^{-\tau}}_{\in \mathcal{B} \text{ nach (A.21)}} \in \mathcal{B}.\end{aligned}$$

Im folgenden sei $|\alpha| = 1$.

Wir zeigen $\langle \cdot \rangle^{l+\tau} \partial^\alpha R \langle \cdot \rangle^{-l-\tau} \in \mathcal{B}$ für $|\alpha| = 1$, indem wir zunächst schreiben

$$\begin{aligned} \langle \cdot \rangle^{l+\tau} \partial^\alpha R \langle \cdot \rangle^{-l-\tau} &= \langle \cdot \rangle^l \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau R \langle \cdot \rangle^{-l-\tau} - \langle \cdot \rangle^l \left(\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau \right) R \langle \cdot \rangle^{-l} \langle \cdot \rangle^{-\tau} \\ &= \langle \cdot \rangle^l \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau R \langle \cdot \rangle^{-l-\tau} - \left(\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau \right) \langle \cdot \rangle^l R \langle \cdot \rangle^{-l} \langle \cdot \rangle^{-\tau} \quad . \end{aligned}$$

Die Induktionsvoraussetzung liefert direkt die Beschränktheit des zweiten Terms. Für den ersten erhalten wir

$$\begin{aligned} \langle \cdot \rangle^l \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau R \langle \cdot \rangle^{-l-\tau} &= \langle \cdot \rangle^l \left(\partial^\alpha R \langle \cdot \rangle^\tau + \partial^\alpha \left[\langle \cdot \rangle^\tau, R \right] \right) \langle \cdot \rangle^{-l} \langle \cdot \rangle^{-\tau} \\ &= \langle \cdot \rangle^l \partial^\alpha R \langle \cdot \rangle^\tau \langle \cdot \rangle^{-\tau} \langle \cdot \rangle^{-l} + \langle \cdot \rangle^l \partial^\alpha \left[\langle \cdot \rangle^\tau, R \right] \langle \cdot \rangle^{-l} \langle \cdot \rangle^{-\tau} \\ &= \underbrace{\langle \cdot \rangle^l \partial^\alpha R \langle \cdot \rangle^{-l}}_{\in \mathcal{B} \text{ nach (A.21)}} + \underbrace{\langle \cdot \rangle^l \partial^\alpha \left[\langle \cdot \rangle^\tau, R \right] \langle \cdot \rangle^{-l} \langle \cdot \rangle^{-\tau}}_{\in \mathcal{B} \text{ nach (A.21)}} \in \mathcal{B} \quad . \end{aligned}$$

Deshalb ist auch dieser ein stetiger Operator.

Auf entsprechende Weise sieht man

$$\begin{aligned} \langle \cdot \rangle^{l+\tau} R \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-l-\tau} &= \langle \cdot \rangle^l \langle \cdot \rangle^\tau R \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-l} \langle \cdot \rangle^{-\tau} \\ &= \langle \cdot \rangle^l \left[\langle \cdot \rangle^\tau, R \right] \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-l} \langle \cdot \rangle^{-\tau} + \langle \cdot \rangle^l R \langle \cdot \rangle^\tau \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-l} \langle \cdot \rangle^{-\tau} \\ &= \underbrace{\langle \cdot \rangle^l \left[\langle \cdot \rangle^\tau, R \right] \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-l} \langle \cdot \rangle^{-\tau}}_{\in \mathcal{B} \text{ nach (A.21)}} + \underbrace{\langle \cdot \rangle^l R \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-l}}_{\in \mathcal{B} \text{ nach (A.21)}} - \underbrace{\langle \cdot \rangle^l R \left(\partial^\alpha \langle \cdot \rangle^\tau \right) \langle \cdot \rangle^{-l} \langle \cdot \rangle^{-\tau}}_{\in \mathcal{B} \text{ nach (A.21)}} \in \mathcal{B} \quad . \end{aligned}$$

Mit analogem Vorgehen läßt sich auch die Beschränktheit der Operatoren $\langle \cdot \rangle^{l+\tau} \partial^\alpha R \langle \cdot \rangle^{-l-\tau}$, $\langle \cdot \rangle^{l+\tau} R \partial^\alpha \langle \cdot \rangle^{-l-\tau}$ für $|\alpha| = 2$ und $\langle \cdot \rangle^{l+\tau} \partial^\alpha R \partial^\beta \langle \cdot \rangle^{-l-\tau}$ für $|\alpha| = |\beta| = 1$ zeigen.

Damit ist dann auch der Induktionsschritt bewiesen und der Beweis der Proposition vollendet. ■

Als Korollar dieses Lemmas erhalten wir:

Korollar A.5.3 :

Unter der Voraussetzung (D_ρ) existiert für $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^{n(N+1)}$ mit $|\alpha| + |\beta| \leq 2$ ein $c_{\alpha\beta} > 0$ mit

$$\left\| \partial^\alpha \Pi(x) \partial^\beta \right\| \leq c_{\alpha\beta} \quad . \quad (\text{A.22})$$

Beweis:

Entsprechend der Bedingung (H_δ) aus der Stabilitätsvoraussetzung existieren geschlossene Wege $\Gamma(x) \subset \rho(P_{el}(x))$ mit $\sup_{x \in \mathbb{R}^n} L(\Gamma(x)) < \infty$ und

$$\Pi(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma(x)} (\zeta - P_{el}(x))^{-1} d\zeta \quad .$$

Dabei ist $d(\Gamma(x), \sigma(P_{el}(x))) \geq \delta$ für $x \in \mathbb{R}^n$.

Wir erhalten

$$\begin{aligned} \|\partial^\alpha \Pi(x) \partial^\beta\| &\leq \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma(x)} \|\partial^\alpha (\zeta - P_{el}(x))^{-1} \partial^\beta\| d\zeta \\ &\leq \frac{1}{2\pi} L(\Gamma(x)) \sup_{\zeta \in \Gamma(x)} \|\partial^\alpha (\zeta - P_{el}(x))^{-1} \partial^\beta\|, \end{aligned}$$

wobei dieses Supremum nach der vorigen Proposition wegen $d(\Gamma(x), \sigma(P_{el}(x))) \geq \delta$ alleine von α und β abhängt. ■

A.6 Ergänzung zum Beweis von Proposition 3.1.8

Im folgenden gelten die Voraussetzungen und Bezeichnungen des dritten Kapitels. Im Hauptteil wird beim Beweis von 3.1.8 die folgende Implikation benötigt:

Lemma A.6.1 :

Für $\alpha \in N_0^n$ gilt

$$\|\partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0) \Pi_0\| = O(\langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho}) \implies \|\partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0)\| = O(\langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho}) \quad . \quad (\text{A.23})$$

Beweis:

Wir führen den Beweis durch Vollständige Induktion über $|\alpha|$:

Für den Induktionsanfang sei $\alpha = 0$.

Da die $\Pi(x)$ Projektionen sind gilt die Identität

$$\begin{aligned} \Pi(x) - \Pi_0 &= (\Pi(x) - \Pi_0)^2 - 2\Pi_0 + \Pi(x)\Pi_0 + \Pi_0\Pi(x) \\ &= (\Pi(x) - \Pi_0)^2 + (\Pi(x) - \Pi_0)\Pi_0 + \Pi_0(\Pi(x) - \Pi_0), \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

und deren Selbstadjungiertheit liefert außerdem

$$\begin{aligned} \|(\Pi(x) - \Pi_0)\Pi_0\| &= \|[(\Pi(x) - \Pi_0)\Pi_0]^*\| \\ &= \|\Pi_0^*(\Pi(x) - \Pi_0)^*\| \\ &= \|\Pi_0(\Pi(x) - \Pi_0)\| \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Nach Lemma 3.1.4 existiert ein $R_0 > 0$ mit der Eigenschaft

$$\|\Pi(x) - \Pi_0\| \leq \frac{1}{2} \quad (|x| \geq R_0) \quad .$$

Wenden wir auf (A.24) die Dreiecksgleichung an, so folgt für $|x| \geq R_0$

$$\begin{aligned} \|\Pi(x) - \Pi_0\| &\leq \frac{1}{2}\|\Pi(x) - \Pi_0\| + \|[(\Pi(x) - \Pi_0)\Pi_0]\| + \|[\Pi_0(\Pi(x) - \Pi_0)]\| \\ &\stackrel{(\text{A.25})}{=} \frac{1}{2}\|\Pi(x) - \Pi_0\| + 2\|[(\Pi(x) - \Pi_0)\Pi_0]\|, \end{aligned}$$

also

$$\|\Pi(x) - \Pi_0\| \leq 4\|(\Pi(x) - \Pi_0)\Pi_0\| \quad .$$

Dieses liefert unmittelbar die Induktionsbehauptung für $\alpha = 0$.

Es sei jetzt $\alpha \in N_0^n$ mit $|\alpha| > 0$ gegeben und die Behauptung des Lemmas bereits für alle $\beta \in N_0^n$ mit $|\beta| < |\alpha|$ bewiesen.

Weiter gelte $\|\partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0) \Pi_0\| = O(\langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho})$. Deswegen können wir die Ungleichungen

$$\|\partial_x^\beta (\Pi(x) - \Pi_0)\| \leq d_\beta \langle x \rangle^{-|\beta|} \quad (|\beta| < |\alpha|), \quad (\text{A.26})$$

$$\|\partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0) \Pi_0\| \leq d_\alpha \langle x \rangle^{-|\alpha|} \quad (\text{A.27})$$

notieren, die mit geeigneten d_β und d_α erfüllt sind.

Zu zeigen ist $\|\partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0)\| = O(\langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho})$.

Wir benutzen wieder die Identität (A.24), die wir jetzt auf beiden Seiten differenzieren. Nach der Leibnizregel erhält man

$$\begin{aligned} \partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0) &= \sum_{0 < \beta < \alpha} c_{\alpha,\beta} \partial_x^\beta (\Pi(x) - \Pi_0) \partial_x^{\alpha-\beta} (\Pi(x) - \Pi_0) \\ &+ \left(\partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0) \right) (\Pi(x) - \Pi_0) + (\Pi(x) - \Pi_0) \partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0) \\ &+ \partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0) \Pi_0 + \Pi_0 \partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0) \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

Da differenzieren und adjungieren der Operatoren $\Pi(x)$ miteinander vertauscht werden können, bekommen wir aus Gleichung (A.25) außerdem

$$\|\partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0) \Pi_0\| = \|\Pi_0 \partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0)\| \quad .$$

Wir wählen diesmal $R_0 > 0$ derart, daß $\|\Pi(x) - \Pi_0\| \leq \frac{1}{4}$ für $(|x| \geq R_0)$ und erhalten so

$$\begin{aligned} \|\partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0)\| &\leq \sum_{0 < \beta < \alpha} c_{\alpha,\beta} \|\partial_x^\beta (\Pi(x) - \Pi_0)\| \|\partial_x^{\alpha-\beta} (\Pi(x) - \Pi_0)\| \\ &+ \|\partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0)\| \|\Pi(x) - \Pi_0\| + \|\Pi(x) - \Pi_0\| \|\partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0)\| \\ &+ \|\partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0) \Pi_0\| + \|\Pi_0 \partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0)\| \\ &\stackrel{(\text{A.26}), |x| \geq R_0}{\leq} \sum_{0 < \beta < \alpha} c_{\alpha,\beta} d_\beta \langle x \rangle^{-|\beta|-\rho} d_{\alpha-\beta} \langle x \rangle^{-|\alpha-\beta|-\rho} + 2d_\alpha \langle x \rangle^{-|\alpha|-\rho} \\ &+ \frac{1}{2} \|\partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0)\| + 2\|\partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0) \Pi_0\| \\ &\stackrel{(\text{A.27})}{\leq} \left(\sum_{0 < \beta < \alpha} c_{\alpha,\beta} d_\beta d_{\alpha-\beta} \right) \langle x \rangle^{-|\alpha|-2\rho} + 2d_\alpha \langle x \rangle^{-|\alpha|} \\ &+ \frac{1}{2} \|\partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0)\| \quad . \end{aligned}$$

Mit entsprechendem $d > 0$ folgt daraus

$$\|\partial_x^\alpha (\Pi(x) - \Pi_0)\| \leq d \langle x \rangle^{-|\alpha|},$$

womit der Induktionsschritt bewiesen ist. ■

Literaturverzeichnis

- [Ag] S. Agmon: *Lectures on Exponential Decay of Solutions of Second-Order Elliptic Equations*. Princeton University Press, 1982
- [BO] M. Born, R. Oppenheimer: *Zur Quantentheorie der Molekeln*. Annalen der Physik, 84, 457, 1927
- [CDS] J.M. Combes, P. Duclos, R. Seiler: *The Born Oppenheimer Approximation*. Rigorous Atomic and Molecular Physics, eds. Wightman and Velo, Plenum, New York, 1981.
- [CFKS] H.L. Cycon, R.G. Fröse, W. Kirsch, B. Simon: *Schroedinger operators with application to quantum mechanics and global geometry*. Springer Verlag, 1987.
- [CS1] J.M. Combes, R. Seiler: *Regularity and asymptotic properties of the discrete spectrum of electronic Hamiltonians*. Int. J. of Quantum Chemistry Vol.14, 213-229, 1978.
- [CS2] J.M. Combes, R. Seiler: *Spectral properties of atomic and molecular systems*. Ed. G. Wooley, Plenum, 435-482, 1982.
- [Erd] C. Erdmann: *Ueber das wesentliche Spektrum von Mehrteilchen Schroedingeroperatoren*. Diplomarbeit, TU Berlin, 1979.
- [HiSi] P.D. Hislop, I.M. Sigal: *Introduction to Spectral Theory*. Springer Verlag, New York, 1996.
- [Je] T. Jecko: *Sections effciaces totales d'une molecule diatomique dans l approximation de Born-Oppenheimer*. These de Doctorat, Universite de Nantes, 1996.
- [K] T. Kato: *Perturbation Theory for Linear Operators*. Springer Verlag, Berlin, Reprint of the 1980 Edition
- [KMW] M. Klein, A. Martinez, X.P. Wang : *On the Born-Oppenheimer Approximation of Wave Operators in Molecular Scattering Theory*. Commun. Math. Phys. 152, 73-95, 1993.

- [RA] A.Raphaelian: *Ion-Atom Scattering within a Born-Oppenheimer Framework*. Doktorarbeit, TU Berlin, 1986
- [RS1] M. Reed, B. Simon: *Methods of Modern Mathematical Physics, Band I : Functional Analysis*. Academic Press, 1972.
- [RS2] M. Reed, B. Simon: *Methods of Modern Mathematical Physics, Band II : Fourier Analysis, Self-Adjointness*. Academic Press, 1975.
- [RS3] M. Reed, B. Simon: *Methods of Modern Mathematical Physics, Band III : Scattering Theory*. Academic Press, 1979.
- [RS4] M. Reed, B. Simon: *Methods of Modern Mathematical Physics, Band IV : Analysis of Operators*. Academic Press, 1978.
- [Vo] Michael Voßbeck: *Zur Zwei-Cluster-Zerlegung eines drei-atomigen Moleküls*. Diplomarbeit, TU Berlin, Juni 1999