
Über die Grundzustandsdichte relativistischer Coulomb-Systeme

Dissertation
an der Fakultät für Mathematik, Informatik und Statistik
der Ludwig-Maximilians-Universität
München

eingereicht von
Konstantin Merz

München, den 12. April 2019

Erstgutachter: Prof. Dr. Heinz Siedentop
Zweitgutachter: Prof. Dr. Simone Warzel
Drittgutachter: Prof. Dr. Volker Bach
Tag der mündlichen Prüfung: 16. Juli 2019

Danksagung

Zuerst möchte ich meinen Dank meinem Doktorvater Herrn Professor Heinz Siedentop aussprechen, der diese Arbeit angeregt hat, sie betreute und mir deren Durchführung ermöglichte. Ohne seine Expertise und gewissenhafte Führung wäre die Arbeit nicht zustande gekommen. Er hatte stets ein offenes Ohr für Fragen und Probleme meinerseits und gab mir immer wertvolle Ratschläge und Inspirationen während zahlreicher Diskussionen, aus denen ich sehr viel lernen konnte. Ich möchte mich bei ihm auch dafür bedanken, dass er mich stets gefordert und auch motiviert hat, die hier erarbeiteten Ergebnisse mit der wissenschaftlichen Gemeinde zu diskutieren und zu präsentieren. Dadurch durfte ich viele Bekanntschaften mit bereits etablierten Kollegen und anderen Nachwuchsforschern machen, welche zu anregenden Diskussionen führten. Schließlich sorgte er auch innerhalb der Arbeitsgruppe für ein stets sehr positives Arbeitsklima. Für all das bin ich ihm ewig dankbar.

Als Nächstes möchte ich mich bei Herrn Professor Rupert Frank für die exzellente Kooperation bedanken. Die Diskussionen mit ihm gaben mir sehr viele Ideen und Inspirationen. Es war immer eine große Freude mit ihm zusammenzuarbeiten und auch von ihm zu lernen.

Weiter danke ich auch Herrn Dr. Jean-Claude Cuenin dafür, dass er sich die Zeit genommen hat, um über meine Fragen zu diskutieren. Viel mehr danke ich ihm allerdings für die vielen erleuchtenden Diskussionen und, dass er mich dazu motivierte mich mit Themen und Literatur zu beschäftigen, die zunächst weit außerhalb meines primären Forschungsgebiets zu liegen schienen. Diese Gespräche zeigten mir viele neue Perspektiven auf und halfen mir sehr dabei Mathematik besser zu verstehen und zu genießen.

Ich bedanke mich bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die großzügige Bereitstellung finanzieller Mittel im Rahmen des Programmes SI 348/15-1, welche mir die Durchführung dieser Dissertation und die Teilnahme an Workshops und Konferenzen ermöglichte. Des Weiteren möchte ich auch dem Mentoring-Programm der Ludwig-Maximilians-Universität für finanzielle Unterstützung danken, welche mir die Teilnahme an weiteren Konferenzen, Workshops und Schulen ermöglicht hat. Neben vielen anregenden mathematischen Diskussionen durfte ich dabei auch viele neue Freundschaften schließen.

Unserer Arbeitsgruppe danke ich für das durchweg positive Arbeitsklima, wertvolle Diskussionen und die schönen Kaffeerrunden am Nachmittag.

Meiner Familie und meinen Freunden bin ich für ihre Nachsicht und Geduld, aber auch für ihre Motivation und ihre guten Zusprüche dankbar.

Schließlich bin ich meinen Eltern auf ewig dankbar für ihre Aufmunterungen, ihre Unterstützung, ihre Zeit, ihre Ratschläge und noch vieles mehr. Ohne sie wäre diese Arbeit ebenfalls nie zustande gekommen.

Zusammenfassung

Diese Dissertation widmet sich den Eigenschaften von Grundzuständen großer, relativistischer Coulomb-Systeme. Ein Beispiel für ein solches System ist ein neutrales Atom. Diese können durch relativistische Vielteilchen-Hamilton-Operatoren beschrieben werden, wie zum Beispiel den Chandrasekhar- oder projizierten Coulomb–Dirac-Operatoren.

Atome mit hoher Kernladungszahl weisen zwei besonders interessante Längenskalen auf, die Thomas–Fermi- und die Scott–Längenskala. Auf Ersterer befindet sich der Großteil der Elektronen, die zur führenden Ordnung der Grundzustandsenergie im Grenzwert großer Teilchenzahlen beitragen. Elektronen, die sich auf der Scott-Skala befinden, sind sehr nahe am Kern lokalisiert und verursachen Quantenkorrekturen der Grundzustandsenergie. Wegen des Heisenbergschen Unschärfepinzips muss davon ausgegangen werden, dass die Geschwindigkeit dieser Elektronen ein wesentlicher Bruchteil der Lichtgeschwindigkeit ist und die Quantenkorrekturen daher zusätzlich relativistisch korrigiert werden. Das Ziel dieser Arbeit ist das Studium der Einteilchendichte eines Grundzustands auf diesen beiden Längenskalen im Grenzwert großer Teilchenzahlen.

Auf der Thomas–Fermi-Längenskala zeigen wir, dass die reskalierte Einteilchendichte eines Grundzustands gegen die wasserstoffartige Thomas–Fermi-Dichte konvergiert. Wir zeigen zuerst schwache Konvergenz in den semiklassischen L^p -Räumen für den Chandrasekhar- und den Brown–Ravenhall-Operator. In einer gemeinsamen Arbeit mit Heinz Siedentop [125] beweisen wir außerdem die Konvergenz der Dichte in der Coulomb-Norm für den Chandrasekhar-, den Brown–Ravenhall- und den Furry-Operator. Diese Ergebnisse zeigen, dass sich der Hauptteil der Elektronen eines relativistisch beschriebenen Atoms dennoch nicht-relativistisch verhält.

Auf der Scott-Skala beweisen wir, basierend auf einer Zusammenarbeit mit Rupert L. Frank, Heinz Siedentop und Barry Simon [67], dass die reskalierte Einteilchendichte eines Grundzustands des Chandrasekhar-Operators schwach gegen die Summe der Quadrate der Eigenfunktionen des entsprechenden Einteilchen-Wasserstoff-Operators konvergiert. Die Konvergenz gilt sowohl für die gesamte Dichte als auch in jedem festen Drehimpulskanal. Die Klasse der erlaubten Test-Funktionen, für die diese Konvergenzen gelten, beinhaltet kompakt getragene Funktionen, die integrierbar oder durch ein Vielfaches des Coulomb-Potentials beschränkt sind. Dies bestätigt die von Lieb [115] geäußerte, sogenannte starke Scott-Vermutung für relativistische Coulomb-Systeme und zeigt insbesondere, dass kernnahe Elektronen relativistische Korrekturen erzeugen. Als Nebenprodukt erhalten wir außerdem eine punktweise obere Schranke an die relativistische Wasserstoff-Dichte, welche im Einklang mit dem asymptotischen Verhalten der nicht-relativistischen Wasserstoff-Dichte für große Abstände zum Kern steht. Im Anschluß illustrieren wir, wie diese Ergebnisse auf den Furry-Operator verallgemeinert werden können.

Ein wichtiges Werkzeug für den Beweis der starken Scott-Vermutung basiert auf einer Zusammenarbeit mit Rupert L. Frank und Heinz Siedentop [66]. Wir betrachten den frak-

tionalen Laplace-Operator mit Hardy-Potential und kritischer oder subkritischer Kopplungskonstante. Es wird gezeigt, dass die L^2 -Normen, die durch Potenzen dieses Operators erzeugt werden, zu den L^2 -Normen, die durch Potenzen des fraktionalen Laplace-Operators erzeugt werden, äquivalent sind. Darüberhinaus erhalten wir verallgemeinerte und umgekehrte Hardy-Ungleichungen. Eine Verallgemeinerung auf L^p ist möglich, wenn ein Mikhlin-Multiplikator-Satz für den verallgemeinerten Hardy-Operator bewiesen werden kann, was bisher nur für positive Kopplungskonstanten gelungen ist. Dies ist eine Verallgemeinerung des Ergebnisses für den gewöhnlichen, nicht-fraktionalen Hardy-Operator von Killip u. a. [102].

Abstract

This dissertation is dedicated to the study of properties of large relativistic Coulomb systems, a neutral atom being one particular example. Such systems can be described by relativistic many-particle quantum Hamiltonians such as the Chandrasekhar or projected Coulomb–Dirac operators.

Heavy atoms possess two very interesting length scales, namely the Thomas–Fermi and the Scott length scale. The bulk of the electrons contributing to the leading order of the ground state energy in the limit of large particle numbers is located on the former length scale and is described semiclassically. Electrons on the Scott length scale are localized very close to the nucleus and generate quantum corrections to the ground state energy. By Heisenberg’s uncertainty principle, the innermost electrons’ velocities are a substantial fraction of the velocity of light. Consequently, a relativistic description is mandatory. The aim of this thesis is to give new insights on properties of the one-particle ground state density on these two length scales in the limit of large particle numbers.

Our first result shows that the rescaled one-particle density of a ground state on the Thomas–Fermi length scale converges to the hydrogenic Thomas–Fermi density. We show that the density converges weakly in the semiclassical L^p spaces for the Chandrasekhar and the Brown–Ravenhall operator. Moreover, based on a joint work with Heinz Siedentop [125], we prove that the density also converges in Coulomb norm for the Chandrasekhar, the Brown–Ravenhall, and the Furry operator. These results show that the bulk of the electrons in a relativistically described system in fact still behaves non-relativistically.

Based on a joint work with Rupert L. Frank, Heinz Siedentop, and Barry Simon [67], we prove that the rescaled one-particle density of a ground state of the Chandrasekhar operator on the Scott length scale converges weakly to the sum of the squares of the eigenfunctions of the corresponding one-particle operator. In particular, we show convergence in each fixed angular momentum channel and convergence of the total density. The class of test functions for which this weak convergence holds contains in particular compactly supported functions that are integrable or bounded by a multiple of the Coulomb potential. This proves Lieb’s so-called strong Scott conjecture [115] for relativistic Coulomb systems and shows in particular that relativistic effects occur close to the nucleus. As a byproduct we obtain a pointwise upper bound on the relativistic hydrogenic density which is in accordance with the asymptotic behavior of the non-relativistic hydrogenic density for large distances to the nucleus. Afterwards, we generalize these results to the Furry operator.

One crucial tool for the proof of the strong Scott conjecture is established in a joint work with Rupert L. Frank and Heinz Siedentop [66]. We consider the fractional Laplace operator with Hardy potential and critical or subcritical coupling constant. We show that the L^2 norms that are generated by powers of this operator are equivalent to the norms generated by powers of the fractional Laplacian. Moreover, we derive generalized and reversed Hardy inequalities

for this generalized Hardy operator. A generalization of these results to L^p is possible if a Mihlin multiplier theorem associated to this operator can be proven. So far, this was only feasible if the coupling constant is positive. This is a generalization of the result concerning the ordinary, non-fractional Hardy operator, obtained by Killip et al [102].

Vorwort

Die Dissertation ist in drei Teile gegliedert. In der Einleitung geben wir einen Überblick über Vielteilchen-Quantenmechanik, insbesondere über große Coulombsysteme. Wir argumentieren dann, weshalb eine relativistische Beschreibung solcher Systeme im Grenzfall großer Teilchenzahlen notwendig ist und geben eine Auswahl relativistischer Modelle. Die Einleitung schließt mit einer Zusammenfassung der erarbeiteten Ergebnisse und in der Arbeit verwendeter Notation.

Die anschließenden Kapitel beinhalten die präzisen Definitionen des vorliegenden Systems sowie die Formulierungen der Hauptresultate und deren Beweise. Die meisten Resultate wurden in wissenschaftlichen Kollaborationen erarbeitet. Das Verhältnis zu diesen, beziehungsweise den daraus hervorgegangenen Publikationen, wird zu Beginn jedes Kapitels hervorgehoben.

Schließlich formulieren wir einige offene Fragen, die im Zusammenhang mit den Ergebnissen der Dissertation stehen und diskutieren Ansätze zur Lösung dieser Probleme.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
1.1	Vielteilchen-Quantenmechanik und Resultate für schwere Atome	1
1.2	Thomas–Fermi-Theorie	4
1.3	Ortsraumdarstellungen relativistischer Hamilton-Operatoren	5
1.3.1	Chandrasekhar-Operator	5
1.3.2	Coulomb–Dirac-Operatoren	6
1.4	Zusammenfassung der Ergebnisse	10
2	Semiklassische Dichte mittels Scott-Korrektur	15
3	Schwache Konvergenz im Chandrasekhar-Modell	19
3.1	Einführung	19
3.2	Definitionen und Resultate	19
3.3	Reduzierung auf ein Einteilchen-Problem und Lokalisierung	21
3.4	Energie in der inneren Region	23
3.5	Energie in der mittleren Region	24
3.6	Die Thomas–Fermi-Region	25
3.7	Zusammenführung und Beweis von Satz 3.2.1	31
4	Schwache Konvergenz im Brown–Ravenhall-Modell	33
4.1	Einführung	33
4.2	Überblick über das Modell, Definitionen und Resultat	34
4.3	Beweis von Behauptung 4.2.2 für $\gamma \leq 2/\pi$	36
4.4	Kommutatoren mit der \mathcal{T} -Transformation	38
4.5	Beweis von Behauptung 4.2.2 für $\gamma < \gamma_B$	48
4.5.1	Energie in der inneren Region	50
4.5.2	Energie in der mittleren Region	52
4.5.3	Die Thomas–Fermi-Region	53
5	Starke Scott-Vermutung im Chandrasekhar-Modell	55
5.1	Einführung, Definitionen und Resultate	55
5.2	Differenzierbarkeit der Summe negativer Eigenwerte	60
5.2.1	Differenzierbarkeit unter einer Spurklasse-Bedingung	61
5.2.2	Eine Verallgemeinerung	65
5.3	Test-Funktionen und Resultate für festen Drehimpuls	71
5.3.1	Test-Funktionen für festen Drehimpuls	72
5.3.2	Ergebnisse für festen Drehimpuls	72

5.3.3	Beweis von Behauptung 5.3.3	73
5.3.4	Beweis von Behauptung 5.3.4	76
5.4	Kontrolle großer Drehimpulse	77
5.4.1	Neue Klasse von Funktionen und eine Majorante	77
5.4.2	Beweis von Behauptung 5.4.3	79
5.4.3	Beweis von Satz 5.1.1 zur Existenz von ρ^H	83
5.5	Beweis der Konvergenzresultate	85
5.5.1	Beweis von Satz 5.1.2 (fester Drehimpuls)	85
5.5.2	Beweis von Satz 5.1.3 (alle Drehimpulse)	89
6	Starke Scott-Vermutung im Furry-Modell	93
6.1	Einführung, Definitionen und Resultate	93
6.2	Anwendung der Feynman–Hellmann-Sätze im Furry-Bild – fester Drehimpuls	100
6.2.1	Vergleich der Chandrasekhar- und Furry-Operatoren	103
6.2.2	Beweis von Behauptung 6.2.4	105
6.2.3	Beweis von Behauptung 6.2.5	107
6.3	Kontrolle großer Drehimpulse	110
6.3.1	Beweis von Behauptung 6.3.1	111
6.3.2	Beweis von Satz 6.1.1 zur Existenz von ρ^H	116
6.4	Beweis der Konvergenzresultate	119
7	Hardy-Operatoren und Sobolew-Normen in L^2	125
7.1	Einleitung und Hauptresultat	125
7.1.1	Überblick über Hardy-Operatoren	125
7.1.2	Definitionen, Hauptresultat und Anwendungen	127
7.2	Wärmeleitungs- und Riesz-Kerne	133
7.3	Differenz der Wärmeleitungskerne	135
7.4	Eine Verallgemeinerung	140
8	Hardy-Operatoren und Sobolew-Normen in L^p	143
8.1	Einleitung und Hauptresultat	143
8.2	Ein Mikhlin-Multiplikator-Theorem für $\mathcal{L}_{a,\alpha}$	148
8.3	Littlewood–Paley-Theorie	157
8.4	Beweis von Behauptung 8.1.5 und Satz 8.1.2	162
8.5	Eine Verallgemeinerung	165
9	Offene Fragen	169
A	Anhang zur semiklassischen Dichte im Brown–Ravenhall-Modell	173
A.1	Kommutator mit den \mathcal{T} -Transformationen	173
A.1.1	Das y -Integral	174
A.1.2	Das z -Integral	177
A.1.3	Lokalisierungspotential der ersten Komponente der \mathcal{T} -Transformation	191
A.2	Vergleich der verdrehten und unverdrehten Potentiale	192
A.3	Pseudo-Differential- und singuläre Integral-Operatoren	196

B	Anhang zur starken Scott-Vermutung im Chandrasekhar-Modell	199
B.1	Beweise der Lemmata 5.3.9 und 5.4.5	199
B.2	Einfacher Beweis für eine obere Schranke für die nicht-relativistische Wasserstoffdichte	202
C	Anhang zur starken Scott-Vermutung im Furry-Modell	205
D	Anhang zu Hardy-Operatoren und Sobolew-Normen in L^p	207
D.1	Ein Hörmander-Multiplikator-Theorem für $ p ^\alpha + V$	207
D.2	Ein Hörmander-Multiplikator-Theorem für $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ mit $a \geq 0$	217
D.3	Hardy–Sobolew-Ungleichungen	224
	Literaturverzeichnis	229
	Eidesstattliche Versicherung	241

Kapitel 1

Einführung und Überblick über relativistische Modelle der Quantenmechanik

1.1 Vielteilchen-Quantenmechanik und Resultate für schwere Atome

Die Grundzustandsenergie großer Coulomb-Systeme, wie beispielsweise Atome oder Moleküle, als auch die Verteilung der Elektronen in solchen Systemen, sind von fundamentalem Interesse in der Physik und der Quantenchemie. Systeme auf atomaren Längenskalen werden quantenmechanisch beschrieben. Ihr Verständnis beruht auf präzisen Untersuchungen des zugrundeliegenden Hamilton-Operators. Beispielsweise beschreibt

$$\sum_{\nu=1}^N \left(-\frac{1}{2} \Delta_{\nu} - \frac{Z}{|x_{\nu}|} \right) + \sum_{1 \leq \nu < \mu \leq N} \frac{1}{|x_{\nu} - x_{\mu}|} \quad \text{in} \quad \bigwedge_{\nu=1}^N L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^q) \quad (1.1)$$

ein nicht-relativistisches Atom in der Born–Oppenheimer-Approximation. Hierbei bezeichnet $\bigwedge_{\nu=1}^N L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^q)$ den Unterraum der antisymmetrischen Funktionen aus $L^2(\mathbb{R}^{3N} : \mathbb{C}^{q^N})$. Das System besteht aus einem am Ursprung fixierten Kern mit Kernladung Z , der mit N Elektronen über das Coulomb-Potential wechselwirkt. Darüberhinaus wird die Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen untereinander berücksichtigt. Hierbei sind die physikalischen Einheiten so gewählt, dass $\hbar = |e| = m = 1$, wobei \hbar das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum, e die Elementarladung und m die Elektronenmasse bezeichnen. Die Zahl der Spin-Freiheitsgrade jedes Elektrons wird mit q bezeichnet. In der Realität ist $q = 2$. Wir konzentrieren uns von nun an auf den Fall neutraler Atome, das heißt $N = Z$.

Allerdings ist es – wie im klassischen Kepler-Problem – hoffnungslos, exakte Lösungen der (stationären) Schrödinger-Gleichung zu finden, wenn das System bereits aus mehr als zwei Teilchen besteht. Aus diesem Grund benötigt man Modelle für Vielteilchen-Quantensysteme, die einfacher zu lösen sind, aber das System immer noch hinreichend akkurat beschreiben. Dichtefunktionaltheorien sind vielversprechende Kandidaten solcher Modelle, da sie hochdimensionale, lineare Probleme auf niedrigdimensionale nicht-lineare Probleme reduzieren. Diese können beispielsweise mit Methoden der Funktionalanalysis und den partiellen Differentialgleichungen behandelt werden. Dichtefunktionaltheorien haben sich als sehr zweck-

dienlich in der Untersuchung von Eigenschaften von Grund- und angeregten Zuständen großer Coulomb-Systeme erwiesen. Der Hohenberg–Kohn-Satz [89] besagt beispielsweise, dass es ein Energie-Funktional gibt, welches nur von der Einteilchendichte abhängt, dessen Infimum exakt mit der wahren Grundzustandsenergie des Vielteilchensystems übereinstimmt. In der Praxis stellt sich leider heraus, dass es sehr schwer ist, dieses Funktional zu bestimmen, insbesondere, wenn man verlangt, dass das Funktional universell und nicht auf ein bestimmtes Atom oder Molekül zugeschnitten sein soll.

Der Durchbruch eines besonders simplen Dichtefunktional, der Thomas–Fermi-Theorie [173, 58, 59], gelang im Rahmen der grundlegenden Arbeit [119] von Lieb und Simon. Die Autoren zeigten, dass das Infimum des Thomas–Fermi-Funktional (Lenz [110]) mit der ersten Ordnung der asymptotischen Entwicklung der Grundzustandsenergie eines neutralen Atoms ($N = Z$) im Grenzwert großer Teilchenzahlen übereinstimmt. Diese wird durch den Hauptteil der Elektronen erzeugt, die sich auf Orbitalen im Abstand $Z^{-1/3}$ entfernt vom Kern befinden. Diese Längenskala wird auch als Thomas–Fermi-Längenskala bezeichnet. Darüberhinaus zeigten Lieb und Simon sowie Baumgartner [8], dass die auf der Thomas–Fermi-Längenskala reskalierte Einteilchendichte eines Grundzustands gegen den wasserstoffartigen Thomas–Fermi-Minimierer konvergiert.

Obwohl die Energie für $N \rightarrow \infty$ asymptotisch richtig durch die Thomas–Fermi-Theorie vorhergesagt wird, stellt sich heraus, dass die relative Genauigkeit für größere Atome nur etwa 10% beträgt. Tatsächlich ist die Thomas–Fermi-Energie, welche von der Größenordnung $Z^{7/3}$ ist, alleine zu tief, was für einige Diskussionen sorgte. Bereits 25 Jahre vor dem Erscheinen des Artikels von Lieb und Simon schlug Foldy [60], inspiriert von numerischen Resultaten, vor, dass der führende Term wie $Z^{12/5}$ skalieren sollte. Dagegen hatte Scott die Vermutung [152], dass die Energie durch die wenigen, aber hoch-energetischen, kernnahen Elektronen korrigiert werden müsste. Da diese nur von „endlich vielen“ Elektronen erzeugt würde, sollte die Größenordnung mit der der Eigenwerte des wasserstoffartigen Operators, sprich Z^2 , übereinstimmen. Diese Vermutung (Lieb [115] nannte sie Scott-Vermutung, siehe auch Simon [157, Problem 10b]) wurde später von Hughes [92, 93] (untere Schranke) und von Siedentop und Weikard [156, 153, 154, 155] (obere und untere Schranke) bewiesen. Damit verwandt ist die, ebenfalls von Lieb [115] geäußerte, sogenannte *starke Scott-Vermutung*. Sie besagt, dass die auf der Wasserstoff-Längenskala Z^{-1} reskalierte Einteilchendichte eines Grundzustands gegen die Summe der Quadrate der Eigenfunktionen des Wasserstoff-Hamilton-Operators konvergiert. Diese wurde von Iantchenko u. a. [95] bewiesen. Zudem wurde die Konvergenz der Einteilchendichtematrix [96] gezeigt. Für die Konvergenz der Dichte auf anderen Skalen verweisen wir auf [94]. Diese Effekte können als echte Quantenkorrekturen interpretiert werden.

Schließlich vermuteten Schwinger [151] sowie Englert und Schwinger [44, 45, 46], dass der dritte Term der asymptotischen Entwicklung wie $Z^{5/3}$ skalieren sollte und durch die Austauschenergie der Elektronen auf Längen $Z^{-2/3}$ entfernt vom Kern erzeugt werden müsse. Fefferman und Seco gelang der Beweis dieser Vermutung in einer Reihe von Arbeiten [55, 49, 57, 52, 50, 51, 53].

Die Resultate über die Grundzustandsenergie wurden in verschiedene Richtungen verallgemeinert. Beispielsweise wurde die Scott-Vermutung für Ionen (Bach [3, 2]), für Moleküle (Ivrii und Sigal [97], Solovej und Spitzer [163], Balodis [7]) und für Moleküle in magnetischen Feldern (Sobolev [160] und Ivrii [98]) bewiesen.

Allerdings ist es fragwürdig, schwere Atome (sprich $Z \gg 1$) nicht-relativistisch zu beschreiben, da der schwere Kern bereits den Hauptteil der Elektronen auf Orbitale lokalisiert, deren Abstände $Z^{-1/3}$ zum Kern betragen. Wegen des Heisenbergschen Unschärfepinzips ist da-

von auszugehen, dass sich insbesondere kernnahe Elektronen mit Geschwindigkeiten bewegen, die einen substantiellen Bruchteil der Lichtgeschwindigkeit c betragen. Aus diesem Grund ist eine relativistische Beschreibung unumgänglich. Beispiele für relativistische Operatoren sind der Chandrasekhar- und projizierte Coulomb–Dirac-Operatoren. Zu diesen gehören wiederum beispielsweise der Brown–Ravenhall- und der Furry-Operator. Letzterer findet auch Anwendungen in der Quantenchemie, um beispielsweise die Grundzustandsenergie großer Atome und Moleküle bis auf chemische Genauigkeit zu bestimmen, siehe beispielsweise Reiher und Wolf [145] für einen umfassenden Überblick.

Ein erstes Ergebnis über schwere, relativistisch beschriebene Atome lieferte Sørensen [139]. Er zeigte, dass für $Z, c \rightarrow \infty$ und fixiertem Quotient $Z/c = \gamma \leq 2/\pi$, die führende Ordnung der Grundzustandsenergie eines neutralen Atoms, welches durch den Chandrasekhar-Operator beschrieben wird, ebenfalls durch die Thomas–Fermi-Energie gegeben ist. Analoge Ergebnisse wurden von Cassanas und Siedentop [19] für den Brown–Ravenhall- mit $\gamma \leq 2/(\pi/2 + 2/\pi)$ und implizit von Handrek und Siedentop [80] für den Furry-Operator mit $\gamma < 1$ gezeigt. Diese Ergebnisse implizieren, dass sich der Hauptteil der Elektronen auf der Längenskala $Z^{-1/3}$ eines relativistisch beschriebenen Atoms immer noch nicht-relativistisch verhält.

Elektronen auf der Scott-Längenskala Z^{-1} befinden sich sehr viel näher am Kern und sollten wegen des Heisenbergschen Unschärfeprinzips Geschwindigkeiten von der Größenordnung der Lichtgeschwindigkeit aufweisen, weshalb relativistische Effekte zu erwarten sind. Dies wurde zuerst von Schwinger [151] vorhergesehen, der eine relativistische Korrektur des Z^2 -Terms herleitete, die kleiner als die nicht-relativistische ist. Dies ist zu erwarten, da die relativistische kinetische Energie (z.B. $\sqrt{p^2 + 1} - 1$), insbesondere für große Impulse, kleiner als die nicht-relativistische kinetische Energie ist. Eine solche Korrektur wurde dann auch von Frank u. a. [69] und Solovej u. a. [162] für den Chandrasekhar-, von Frank u. a. [70] für den Brown–Ravenhall- und schließlich von Handrek und Siedentop [80] für den Furry-Operator bewiesen.

Eine gemeinsame Eigenschaft relativistischer Operatoren ist, dass ihre kinetische Energie, zumindest für große Impulse, wie das Coulomb-Potential, also wie die inverse Länge skaliert. Dies hat zwei wichtige Konsequenzen. Erstens sind störungstheoretische Argumente für die Untersuchung dieser Operatoren oft nicht anwendbar. Zweitens können die Operatoren nur für hinreichend kleine Kopplungskonstanten des Coulomb-Potentials definiert werden.

Das Ziel dieser Arbeit ist das Studium der Einteilchendichte eines Grundzustands relativistischer Vielteilchen-Operatoren auf der Thomas–Fermi- und der Scott- beziehungsweise Wasserstoff-Längenskala im Grenzwert großer Teilchenzahlen. Da die Kopplungsstärke des Coulomb-Potentials des Kerns proportional zur Teilchenzahl ist, reskalieren wir die Operatoren und betrachten daher streng genommen den Grenzwert, in dem sowohl die Teilchenzahl, als auch die Lichtgeschwindigkeit gegen Unendlich gehen und ihr Quotient die kritische Kopplungskonstante nicht überschreitet. Wir betonen, dass dieser Grenzwert *nicht* der nicht-relativistische Grenzwert ist, in welchem die Lichtgeschwindigkeit unabhängig von der Kernladungszahl gegen Unendlich strebt.

Wir geben im Folgenden einen kurzen Überblick über die nicht-relativistische Thomas–Fermi-Theorie und anschließend über die relativistischen Operatoren, die in dieser Arbeit behandelt werden.

1.2 Thomas–Fermi-Theorie

Wir geben einen kurzen Überblick über die wichtigsten Eigenschaften der Thomas–Fermi-Theorie im neutralen Fall $\int_{\mathbb{R}^3} \rho = N = Z$. Einen sehr viel detaillierteren Überblick bietet Lieb [115] an, der teilweise auf den grundlegenden Arbeiten von Lieb und Simon [118, 119] beruht.

Das *Thomas–Fermi-Funktional* ist durch

$$\mathcal{E}_Z^{\text{TF}}(\rho) := \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{3}{10} \gamma_{\text{TF}} \rho^{5/3}(x) - \frac{Z}{|x|} \rho(x) \right) dx + D(\rho, \rho)$$

auf seinem natürlichen Definitionsbereich

$$\mathcal{I} := \{ \rho \in L^{5/3}(\mathbb{R}^3) : D(\rho, \rho) < \infty, \rho \geq 0 \}$$

definiert. Hierbei ist $\gamma_{\text{TF}} := (6\pi^2/q)^{2/3}$ die Thomas–Fermi-Konstante und $D(\rho, \rho)$ die elektrostatische Selbstenergie der Ladungsdichte ρ , die durch

$$D(\rho, \sigma) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\overline{\rho(x)\sigma(y)}}{|x-y|} dx dy$$

gegeben ist. Wir bemerken, dass D ein Skalarprodukt auf \mathcal{I} definiert und daher eine Norm, die sogenannte *Coulomb-Norm* $\|\rho\|_C := D(\rho, \rho)^{1/2}$, induziert. Das Infimum des Funktionals heißt *Thomas–Fermi-Energie* und ist durch

$$E^{\text{TF}}(Z) := \inf_{\mathcal{I}} \mathcal{E}_Z^{\text{TF}}$$

definiert. Es ist bekannt, dass ein Minimierer existiert und dieser eindeutig ist. Der Minimierer wird *Thomas–Fermi-Dichte* genannt und mit $\rho_Z^{\text{TF}}(x)$ bezeichnet. Das Thomas–Fermi-Funktional hat eine natürliche Längenskala, die sogenannte *Thomas–Fermi-Längenskala* $Z^{-1/3}$. Es gilt

$$\mathcal{E}_Z^{\text{TF}}(Z^2 \rho(Z^{1/3} \cdot)) = Z^{7/3} \mathcal{E}_1^{\text{TF}}(\rho(\cdot)),$$

das heißt die natürliche Energieskala des Thomas–Fermi-Funktional ist $Z^{7/3}$. Insbesondere folgt aus dieser Skalierungseigenschaft, dass der Minimierer $\rho_Z^{\text{TF}}(x) = Z^2 \rho_1^{\text{TF}}(Z^{1/3}x)$ erfüllt, wobei ρ_1^{TF} der wasserstoffartige Thomas–Fermi-Minimierer (sprich $Z = 1$) ist (Gombás [74]).

Aus den Arbeiten von Lieb und Simon [119] sowie Baumgartner [8] ist bekannt, dass die Thomas–Fermi-Theorie sowohl die Grundzustandsenergie als auch die Grundzustandsdichte auf der Thomas–Fermi-Längenskala des nicht-relativistischen Vielteilchen-Coulomb-Systems (1.1) zu führender Ordnung richtig beschreibt. Bezeichnet $E^{\text{S}}(Z)$ die Grundzustandsenergie (definiert als das Infimum des Spektrums) und $\rho_Z^{\text{S}}(x)$ die Einteilchendichte eines Grundzustands des Schrödinger-Operators (1.1), so gilt

$$\lim_{Z \rightarrow \infty} \frac{E^{\text{S}}(Z)}{Z^{7/3}} = E^{\text{TF}}(1)$$

und

$$\lim_{Z \rightarrow \infty} \int_M Z^{-2} \rho_Z^{\text{S}}(Z^{-1/3}x) dx = \int_M \rho_1^{\text{TF}}(x) dx$$

für alle beschränkten und messbaren Mengen $M \subseteq \mathbb{R}^3$.

Schließlich führen wir noch das *Thomas–Fermi-Potential*

$$\Phi_Z^{\text{TF}}(x) = \frac{Z}{|x|} - \rho_Z^{\text{TF}} * \frac{1}{|\cdot|}$$

ein. Es ist nicht-negativ, sphärisch symmetrisch, verhält sich bei Null wie das Coulomb-Potential und erfüllt im Unendlichen die Sommerfeld-Asymptotik [165], verhält sich dort also wie $|x|^{-4}$. Zudem genügt es der Skalierungsrelation $\Phi_Z^{\text{TF}}(x) = Z^{4/3}\Phi_1^{\text{TF}}(Z^{1/3}x)$. Das Thomas–Fermi-Potential und die -Dichte erfüllen die Thomas–Fermi-Gleichung

$$\gamma_{\text{TF}}\rho_Z^{\text{TF}}(x)^{2/3} = \Phi_Z^{\text{TF}}(x),$$

woraus ersichtlich ist, dass $\Phi_Z^{\text{TF}} \in L^{5/2}(\mathbb{R}^3)$

1.3 Ortsraumdarstellungen relativistischer Hamilton-Operatoren

In diesem Abschnitt stellen wir die in dieser Dissertation behandelten relativistischen Einteilchen-Operatoren vor. Wir geben ihre Definitions- und Formbereiche an und nennen Bedingungen an die Kopplungskonstante des Coulomb-Potentials, um sie definieren zu können. Zudem geben wir eine Zusammenfassung der hier benötigten Eigenschaften der Spektren. Ausführlichere Abhandlungen können beispielsweise den Büchern von Balinsky und Evans [6] und Thaller [171] sowie Matte und Stockmeyer [124] und den darin enthaltenen Referenzen entnommen werden.

1.3.1 Chandrasekhar-Operator

Der Chandrasekhar- beziehungsweise Herbst-Operator ist der simpelste der hier untersuchten Operatoren. Er wurde ursprünglich von Chandrasekhar benutzt, um die (Nicht-)Stabilität von Neutronensternen zu studieren [20] (siehe auch [120, 121] für eine Untersuchung des Kollapses von Neutronensternen). Der Einteilchen-Operator wurde erstmals von Herbst [87] und Weder [179, 180] untersucht. Wir definieren ihn als die Friedrichs-Erweiterung im Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^q)$ der zu

$$\sqrt{-c^2\Delta + c^4} - c^2 - \frac{Z}{|x|}$$

gehörigen quadratischen Form auf $C_c^\infty(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^q)$. Der Operator hat eine natürliche Längenskala, die sogenannte Wasserstoff-Längenskala c^{-1} . Für $\psi_c(x) := c^{3/2}\psi(cx)$ ist dies aus der Gleichheit

$$\left(\psi_c, \left[\sqrt{-c^2\Delta + c^4} - c^2 - \frac{Z}{|x|} \right] \psi_c \right) = c^2 \left(\psi, \left[\sqrt{-\Delta + 1} - 1 \frac{\gamma}{|x|} \right] \psi \right)$$

ersichtlich, wobei $\gamma := Z/c$. Die quadratische Form (auf $H^{1/2}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^q)$) ist genau dann von unten beschränkt, wenn $\gamma \leq 2/\pi$. Dies folgt aus der Ungleichung

$$\sqrt{-\Delta} - \frac{2/\pi}{|x|} \geq 0$$

(Kato [101, Kapitel 5, Gleichung (5.33)], Herbst [87, Theorem 2.5] und Weder [179]) sowie aus der Tatsache $|p| \geq \sqrt{p^2 + 1} - 1 \geq |p| - 1$. Tatsächlich zeigten Raynal u. a. [141], dass der tiefste Punkt des Spektrums echt größer ist als -1 , selbst, wenn $\gamma = 2/\pi$. Dies wurde bereits von Hardekopf und Sucher [81] numerisch angedeutet. Für $\gamma > 2/\pi$ ist er von unten unbeschränkt und somit „instabil“.

Für $\gamma < 2/\pi$ ist der quadratische Formbereich $H^{1/2}(\mathbb{R}^3)$. Da der Operator skalar ist und es keine Wechselwirkungen gibt, die den Spin der Elektronen miteinbeziehen, betrachten wir im Folgenden ohne Beschränkung der Allgemeinheit lediglich den Fall $q = 1$.

Da der Operator sphärisch symmetrisch ist, kommutiert er mit dem Erzeuger von Rotationen. Man kann daher den Hilbertraum in die direkte Summe

$$L^2(\mathbb{R}^3) = L^2(\mathbb{R}_+, r^2 dr) \otimes L^2(\mathbb{S}^2, d\omega) = \bigoplus_{\ell \in \mathbb{N}_0} \mathcal{H}_\ell$$

zerlegen. Hierbei ist $d\omega$ das normierte Lebesgue-Maß auf der zweidimensionalen Kugelschale \mathbb{S}^2 , $\mathcal{H}_\ell = L^2(\mathbb{R}_+, r^2 dr) \otimes K_\ell$ und K_ℓ der Eigenraum bezüglich des ℓ -ten Eigenwerts des Laplace–Beltrami-Operators auf \mathbb{S}^2 . Man stellt fest, dass die maximal erlaubte Kopplungskonstante mit dem Drehimpulskanal, auf welchen projiziert wird, steigt. Insbesondere ist der auf den ersten Drehimpulskanal eingeschränkte Chandrasekhar-Operator nach unten beschränkt, wenn $\gamma \leq \pi/2$, siehe [6, Lemma 2.2.3 und Theorem 2.2.4].

Obwohl die Eigenwerte $\lambda_{Z,n,\ell}$ ($n \in \mathbb{N}_0$) nicht explizit bekannt sind, folgt aus $\sqrt{p^2 + 1} - 1 \leq p^2/2$ und der unteren Schranke von Frank u. a. [70, Theorem 2.2], dass sie im ℓ -ten Drehimpulskanal den Abschätzungen

$$-\frac{Z^2}{2(n + \ell + 1)^2} \geq \lambda_{Z,n,\ell} \geq -\text{konst} \cdot \frac{Z^2}{(n + \ell + 1)^2}$$

genügen. Der Ausdruck auf der linken Seite der Ungleichung ist gerade der n -te Eigenwert des Schrödinger-Operators im Drehimpulskanal ℓ . Die relativistischen Eigenwerte haben also dieselbe Energiegrößenordnung, was aus der $x \mapsto x/c$ skalierten Form des Operators sofort ersichtlich ist, und dasselbe Verhalten in n und ℓ wie die nicht-relativistischen Wasserstoff-Eigenwerte. Diese Eigenschaften sind dem Verhalten der relativistischen kinetischen Energie für kleine Impulse $|p|$ geschuldet, da $\sqrt{p^2 + 1} - 1 = p^2/2 + \mathcal{O}(p^4)$.

Schließlich ist nach [87, Theorem 2.3] das Spektrum des Chandrasekhar-Operators für $\gamma < 2/\pi$ in $[0, \infty)$ absolut stetig, das heißt es gibt kein singulär-stetiges Spektrum und keine eingebetteten Eigenwerte. Insbesondere ist Null kein Eigenwert.

Obwohl der Chandrasekhar-Operator spektraltheoretisch gut verstanden ist, weist er dennoch einige physikalische Defizite auf. Erstens ist die kinetische Energie $\sqrt{p^2 + 1}$ nicht-lokal und verletzt damit eines der grundlegendsten physikalischen Prinzipien. Zweitens können wegen der Einschränkung $\gamma \leq 2/\pi$ an die Kopplungskonstante, nur Atome mit Kernladungszahlen kleiner als 88 beschrieben werden. Physikalisch geeignetere Operatoren basieren auf dem Dirac-Operator, den wir nun vorstellen.

1.3.2 Coulomb–Dirac-Operatoren

Im Jahre 1928 stellte Dirac [35, 36] eine Lorentz-invariante Bewegungsgleichung für quantenmechanische Teilchen mit Spin, die sich in einem externen elektromagnetischen Feld befinden,

auf, die sogenannte Dirac-Gleichung. Thallers Buch [171] gibt darüber eine umfassende Beschreibung. Für freie Teilchen lautet die Gleichung

$$i\partial_t\psi(t, x) = (-ic\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta c^2) \psi(t, x) \quad (1.2)$$

mit den Dirac-Matrizen $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$,

$$\alpha_j = \begin{pmatrix} 0_{\mathbb{C}^2} & \sigma_j \\ \sigma_j & 0_{\mathbb{C}^2} \end{pmatrix},$$

den Pauli-Matrizen $\boldsymbol{\sigma} := (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ und $\beta = \text{diag}(1, 1, -1, -1)$. Der Operator auf der rechten Seite von (1.2) heißt freier Dirac-Operator. Er wirkt auf Zustände $\psi(t, x) \in \mathbb{C}^4$, der zu Grunde liegende Hilbertraum ist $L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$. Der Definitionsbereich, auf dem der freie Dirac-Operator selbstadjungiert realisiert werden kann, ist $H^1(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$. Nach einer Blockdiagonalisierung durch die Foldy–Wouthuysen-Transformation nimmt er die Gestalt

$$U_{\text{FW}} (-ic\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta c^2) U_{\text{FW}}^* = \begin{pmatrix} \sqrt{-c^2\Delta + c^4} & 0 \\ 0 & -\sqrt{-c^2\Delta + c^4} \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

an. Daher ist das Spektrum gerade $(-\infty, -c^2] \cup [c^2, \infty)$. Physikalisch bedeutet das, dass Zustände „negative Energie“ besitzen können und es ein unendlich tiefes Energie-Reservoir, den sogenannten Dirac-See, gibt. Durch Einführen elektromagnetischer Felder und des Ladungskonjugationsoperators sieht man, dass diese Zustände als „Anti-Teilchen“ mit positiver Energie gedeutet werden können, das heißt sie haben zwar dieselbe Masse, aber umgekehrte elektrische Ladung. Solche Teilchen nennt man Positronen.

In dieser Arbeit sind wir vor allem an Dirac-Operatoren mit einem durch das Coulomb-Potential beschränktem sphärisch symmetrischen Potential interessiert. Der Einteilchen-Operator für das Wasserstoff-Problem, welcher zunächst auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$ definiert werden kann, ist durch

$$D_Z^H := -ic\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + c^2\beta - \frac{Z}{|x|} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$$

gegeben. Durch Skalieren von $x \mapsto x/c$ ist es wieder ersichtlich, dass D_Z^H unitär äquivalent zu

$$c^2 \left[-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta - \frac{\gamma}{|x|} \right] =: c^2 D_\gamma^H$$

ist, wobei wieder $\gamma := Z/c$.

Es ist bekannt, dass D_γ^H genau dann wesentlich selbstadjungiert ist, wenn $|\gamma| \leq \sqrt{3}/2$. Dies folgt aus den Resultaten von Weidmann [181], siehe auch [171, Theorem 4.4]. Für $\gamma \in (\sqrt{3}/2, 1]$ gibt es eine ausgezeichnete (man sagt auch „physikalisch relevante“) selbstadjungierte Erweiterung von D_γ^H . Für $\gamma \in (\sqrt{3}/2, 1)$ wurde sie zuerst von Schmincke [149], Wüst [183], Nenciu [135] und Klaus und Wüst [106] begründet. Nach Schmincke und Wüst zeichnete sich die Realisierung dadurch aus, dass alle Zustände im Definitionsbereich des Coulomb–Dirac-Operators endliche potentielle Energie haben. Nencius Realisierung zeichnete sich hingegen dadurch aus, dass die Zustände endliche kinetische Energie haben. Klaus und Wüst zeigten schließlich, dass die beiden Realisierungen übereinstimmen und das wesentliche Spektrum immer noch $(-\infty, 1] \cup [1, \infty)$ ist, siehe [107] oder [171, S. 117]. Zusammengefasst erfüllt der

Definitionsbereich $\text{dom}(D_\gamma^H)$ dieser Realisierung $H^1(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4) \subset \text{dom}(D_\gamma^H) \subset H^{1/2}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$ und der quadratische Formbereich ist $H^{1/2}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$. Insbesondere sind die Erwartungswerte der kinetischen und potentiellen Energie in $\text{dom}(D_\gamma^H)$ endlich, was die Bezeichnung „physikalisch relevant“ erklärt. Die Verallgemeinerung für $\gamma = 1$ erfolgte durch Esteban und Loss [47]. In dieser Arbeit beschränken wir uns nur auf den Fall $\gamma < 1$.

Der Coulomb–Dirac-Operator D_γ^H hat keine eingebetteten Eigenwerte (Kalf [100]) und kein singular-stetiges Spektrum in $[0, \infty)$ (Vogelsang [178] und Richard und Tiedra de Aldecoa [146]). Der tiefste Eigenwert ist $\lambda_1 = \sqrt{1 - \gamma^2}$ und es gilt $\lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_k = 1$. Da der Operator sphärisch symmetrisch ist, kann, analog zur Drehimpulskanalzerlegung für skalare Operatoren, eine Partialwellenzerlegung durchgeführt werden, siehe auch [6, Abschnitt 2.1.1] und Anhang C. Für $\ell \in \mathbb{N}_0$ und $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$ sind die Eigenwerte und Eigenfunktionen im Kanal (j, ℓ) explizit bekannt (siehe Sommerfelds antizipierte Feinstrukturformel [164], als auch Darwin [30] und Gordon [75]). Für eine prägnante Abhandlung des Eigenwertproblems siehe auch Bethe [10] oder Thaller [171, Abschnitt 7.4]. Die Eigenwerte in der Spektrallücke $(-1, 1)$ im Kanal (j, ℓ) erfüllen die beidseitigen Schranken

$$-\frac{\gamma^2}{2(n + \ell + 1)^2} \geq \lambda_{\gamma, n, j, \ell} - 1 \geq -\text{konst} \cdot \frac{\gamma^2}{(n + \ell + 1)^2},$$

was aus der expliziten Darstellung der Eigenwerte oder, für $\ell \in \mathbb{N}$, beispielsweise aus [80, Lemma 1] extrahiert werden kann.

Anders als im Chandrasekhar-Modell bedeutet „Instabilität“ für den Coulomb–Dirac-Operator den Zusammenbruch der Selbstadjungiertheit des Operators. Die Stabilität für $\gamma \leq 1$ folgt aus der scharfen Hardy-artigen Ungleichung

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\varphi|^2}{|x|} dx \leq \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{|\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \varphi|^2}{1 + |x|^{-1}} + |\varphi|^2 \right) dx$$

für alle $\varphi \in H^1(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^2)$ von Dolbeault u. a. [38].

Brown–Ravenhall-Operator

Der Umstand, dass ein Teilchen sowohl Elektronen- als auch Positronen-Charakter haben kann ist zumindest fragwürdig. Darüberhinaus fanden Brown und Ravenhall in [16], dass die Energieniveaus in Helium sich wegen der erlaubten Zustände negativer Energie nicht durch den Dirac-Operator beschreiben ließen. Aus diesem Grund ließen sie nur Zustände zu, die bezüglich des freien Dirac-Operators positive Energie haben. Das heißt, dass der zugrundeliegende Hilbertraum der erlaubten Zustände durch

$$\mathfrak{H}_0 := \Lambda_0(L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)) := \mathbf{1}_{(0, \infty)}(-i c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + c^2 \beta)(L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4))$$

gegeben ist. Der auf diesen Raum eingeschränkte Coulomb–Dirac-Operator D_Z^H wird Brown–Ravenhall-Operator genannt. Er wurde zuerst von Evans u. a. [48] mathematisch behandelt. Unter anderem zeigten die Autoren, dass die zugehörige quadratische Form auf $H^{1/2}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$ für alle $\gamma \leq \gamma_B = 2/(\pi/2 + 2/\pi)$ nach unten durch $-\gamma(\pi/4 - 1/\pi)$ beschränkt ist. Für $\gamma < \gamma_B$ ist der Formbereich gerade $H^{1/2}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4) \cap \mathfrak{H}_0$. Für $\gamma > \gamma_B$ ist die quadratische Form nach unten unbeschränkt. Das heißt, der Operator kann Atome beschreiben, deren Kernladungszahl 124 nicht überschreitet. Tatsächlich zeigte Tix [174, 176], dass der Operator für $\gamma \leq \gamma_B$ von unten mindestens durch $1 - \gamma_B > 0$ beschränkt ist. Für $\gamma < \gamma_B$ ist das

wesentliche Spektrum des Operators $[c^2, \infty)$ und das singular-stetige Spektrum ist leer [48, Theorem 2]. Darüberhinaus gibt es keine eingebetteten Eigenwerte und das Spektrum in $[c^2, \infty)$ ist absolut stetig [6, Theorem 3.4.1]. Wie oben erwähnt, kann wegen der sphärischen Symmetrie eine Partialwellenzerlegung durchgeführt werden. Balinsky und Evans [5] zeigten, dass der auf den Kanal (j, ℓ) (mit $\ell \in \mathbb{N}_0$, und $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$) eingeschränkte Operator genau dann nach unten beschränkt ist, wenn

$$\gamma \leq 4 \left[\frac{\Gamma((\ell+1)/2)^2}{\Gamma((\ell+2)/2)^2} + \frac{\Gamma((2j-\ell+1)/2)^2}{\Gamma((2j-\ell+2)/2)^2} \right]^{-1}.$$

Die Eigenwerte $\lambda_{Z,n,j,\ell}$ im Kanal (j, ℓ) erfüllen, wie die des Chandrasekhar-Operators, die Schranken

$$-\frac{Z^2}{2(n+\ell+1)^2} \geq \lambda_{Z,n,j,\ell} - 1 \geq -\text{konst} \cdot \frac{Z^2}{(n+\ell+1)^2},$$

siehe insbesondere [70, Theorem 2.1] für die untere Schranke. Darüberhinaus sind sie kleiner als die Dirac-Eigenwerte, was für $\ell \geq 1$ beispielsweise sofort aus dem Min-Max-Prinzip für Operatoren mit Spektrallücken (Griesemer und Siedentop [77]) folgt.

Furry-Operator

Die Projektion auf den positiven Spektralbereich des freien Dirac-Operators ist natürlich nicht die einzige Möglichkeit. Furry und Oppenheimer [71] schlugen vor, auf den positiven Spektralraum des Coulomb-Dirac-Operators zu projizieren. Der zugrunde liegenden Einteilchen-Hilbertraum ist dann

$$\mathfrak{H}_Z := \Lambda_Z(L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)) := \mathbf{1}_{(0,\infty)}(D_Z^H)(L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)).$$

Wie bereits weiter oben bemerkt wurde, gibt es für $\gamma \in (0, 1)$ eine physikalisch relevante, selbstadjungierte Realisierung von D_γ^H , die dadurch charakterisiert ist, dass $H^1(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4) \subseteq \text{dom}(D_\gamma^H) \subseteq H^{1/2}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$ (Nenciu [135]). Daher ist

$$\Lambda_Z(\mathcal{S}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)) \subseteq H^{1/2}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$$

und dicht in \mathfrak{H}_Z . Die zugehörige, auf $\Lambda_Z(\mathcal{S}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4))$ eingeschränkte, quadratische Form ist daher wohldefiniert für $\gamma \in (0, 1)$. Der quadratische Formbereich ist $H^{1/2}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4) \cap \mathfrak{H}_Z$.

Mittleman-Prinzip und physikalische Relevanz der Operatoren

Bevor wir zu den Ergebnissen dieser Arbeit kommen, diskutieren wir kurz die Relevanz der hier untersuchten relativistischen Operatoren.

In der Praxis (z.B. in der Quantenchemie) ist es unabdingbar zu wissen, welches Modell am besten für numerische Untersuchungen großer Coulomb-Systeme geeignet ist. Dazu kann man beispielsweise die gemessenen Grundzustandsenergien (siehe beispielsweise [109]) mit denen der (nicht-)relativistischen Operatoren vergleichen. Es stellt sich zum Einen heraus, dass der nicht-relativistische Schrödinger-Operator zu hohe Energien liefert. Im Gegensatz dazu liegt die Grundzustandsenergie des Chandrasekhar-Operators zu tief. Zudem beschreibt der Operator lediglich Atome, deren Kernladungszahl kleiner als 88 sind. Die Grundzustandsenergien der projizierten Coulomb-Dirac-Operatoren liegen zwischen diesen beiden Extremen.

In [129, Abschnitt II] schlug Middleman ein Variationsprinzip zur Herleitung von Hamilton-Operatoren aus einem Standard QED-Hamilton-Operator im Fock-Raum vor, welches zur möglichst exakten Bestimmung von Grundzustandsenergien verwendet werden kann. Neben den oben besprochenen sogenannten no-pair-Operatoren, kann auch das sogenannte Fuzzy-Modell mit diesem Prinzip hergeleitet werden. Hierbei wird bezüglich des durch die Kern-Elektron- und Elektron-Elektron-Wechselwirkung erzeugten mittleren Feldes im Geiste der Hartree-Fock-Theorie projiziert, sprich der zugrundeliegende Hilbertraum ist $\mathbf{1}_{(0,\infty)}(D_Z^H + \chi)(L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4))$ für ein mittleres Feld χ . Beispiele für χ sind eventuell abgeschirmte Thomas-Fermi-Potentiale oder das mittlere Feld der Dirac-Fock-Gleichungen. Für numerische Rechnungen, die die Grundzustandsenergie für große $Z \gtrsim 90$ betreffen, stellt sich heraus, dass es praktisch keinen Unterschied macht, ob man den Berechnungen das Furry- oder das Fuzzy-Bild zu Grunde liegt, siehe auch [129, 145, 148, 80].

1.4 Zusammenfassung der Ergebnisse

Wir schließen die Einleitung mit einer Zusammenfassung der Ergebnisse dieser Arbeit und verweisen auf die jeweiligen Kapitel.

Auf der Thomas-Fermi-Längenskala zeigen wir, dass die reskalierte Einteilchendichte eines Grundzustands gegen die wasserstoffartige Thomas-Fermi-Dichte konvergiert. Einerseits konvergiert sie in der sogenannten Coulomb-Norm in den Chandrasekhar-, Brown-Ravenhall- und Furry-Modellen, siehe Kapitel 2. Daraus folgt insbesondere schwache Konvergenz, beispielsweise wegen der Hardy-Littlewood-Sobolew-Ungleichung in $L^{6/5}(\mathbb{R}^3)$. Das Argument beruht auf der Scott-Korrektur für die entsprechenden Operatoren und verwendet die Nicht-Negativität eines Terms, der sich bei der Herleitung der unteren Schranke der asymptotischen Formel für die Energie aus einer Korrelationsungleichung ergibt. Dies ist eine gemeinsame Arbeit mit Heinz Siedentop [125]. Andererseits zeigen wir schwache Konvergenz in den semiklassischen L^p -Räumen, also $p = 5/2, 4$ für den Chandrasekhar- (siehe Kapitel 3) und den Brown-Ravenhall-Operator (siehe Kapitel 4) für $\gamma \leq 2/\pi$, der kritischen Chandrasekhar-Kopplung. Für den Brown-Ravenhall-Operator mit $\gamma \in (2/\pi, 2/(\pi/2 + 2/\pi))$ müssen die Testfunktionen zudem durch ein Vielfaches des Coulomb-Potentials beschränkt und Lipschitz-stetig sein. Der Beweis beruht im Wesentlichen auf der Herleitung der führenden Ordnung der Grundzustandsenergie des geeignet gestörten Vielteilchen-Operators. Mit „geeignet“ meinen wir, dass die Störung auf der richtigen Längenskala, sprich $Z^{-1/3}$, und der richtigen Energieskala, sprich $Z^{7/3}$, „leben“ muss. Dies ist der Fall, wenn die Störung wie $U_Z(x) = Z^{4/3}U(Z^{1/3}x)$ skaliert, was anhand des Integrals $\int_{\mathbb{R}^d} \rho_Z^{\text{TF}}(x)U_Z(x) dx$ und der Skalierungsrelation von ρ_Z^{TF} gesehen werden kann. Diese Ergebnisse unterstreichen, dass sich der Hauptteil der Elektronen eines relativistisch beschriebenen Atoms immer noch nicht-relativistisch verhält. Sie stehen insbesondere im Einklang mit der Tatsache, dass der führende Term der asymptotischen Entwicklung der Grundzustandsenergie durch die nicht-relativistische Thomas-Fermi-Energie gegeben ist.

Auf der Scott-Skala zeigen wir, dass die reskalierte Einteilchendichte eines Grundzustands des Vielteilchen-Chandrasekhar-Operators schwach gegen die wasserstoffartige Dichte, sprich die Summe der Quadrate der Eigenfunktionen des entsprechenden relativistischen Wasserstoff-Atoms konvergiert, siehe Kapitel 5. Einerseits zeigen wir Konvergenz in jedem festen Drehimpulskanal und andererseits der gesamten Dichte. Die Klasse der Test-Funktionen, für die diese Konvergenzen gelten, beinhalten insbesondere kompakt getragene Funktionen, die integrierbar oder durch ein Vielfaches des Coulomb-Potentials beschränkt sind. Im Hinblick

auf die allgemeine Natur relativistischer Operatoren und die Kato-Ungleichung ist dieses Ergebnis optimal, da man nicht erwarten kann, dass die Test-Funktionen singulärer als das Coulomb-Potential am Ursprung sind. Dieses Resultat bestätigt Liebs sogenannte starke Scott-Vermutung [115] und zeigt insbesondere, dass kernnahe Elektronen relativistische Korrekturen erzeugen. Das Ergebnis ist außerdem im Einklang mit der relativistischen Korrektur der Scott-Korrektur der Grundzustandsenergie (Solovej u. a. [162] und Frank u. a. [69]). Als Nebenprodukt erhalten wir eine punktweise obere Schranke an die wasserstoffartige Dichte, welche für große Kernabstände im Einklang mit der Singularität der Thomas–Fermi-Dichte und insbesondere mit dem Abfall der nicht-relativistischen Dichte steht. Das bedeutet, dass sie wie $r^{-3/2}$ abfällt. Die Beweise beruhen auf der Scott-Korrektur, einer Verallgemeinerung des Feynman–Hellmann-Satzes sowie einer neuen Äquivalenz von Sobolew-Normen, die von Potenzen des Herbst-Operators erzeugt werden. Diese Ergebnisse basieren auf einer gemeinsamen Arbeit mit Rupert L. Frank, Heinz Siedentop und Barry Simon [67].

Im Anschluß zeigen wir, dass die starke Scott-Vermutung auch im Furry-Modell wahr ist. Der entscheidende Grund hierfür ist, dass das Vielteilchen-Problem auf ein effektives Problem reduziert wird, welches durch den Wasserstoff-Operator beschrieben wird und die Furry-Projektion mit diesem Operator gerade kommutiert.

Ein wichtiges Werkzeug für den Beweis der starken Scott-Vermutung ist ein weiteres Ergebnis dieser Arbeit, welches sich auf eine Zusammenarbeit mit Rupert L. Frank und Heinz Siedentop [66] stützt, siehe Kapitel 7. Wir betrachten den fraktionalen Laplace-Operator mit Hardy-Potential $\mathcal{L}_{a,\alpha} = (-\Delta)^{\alpha/2} + a|x|^{-\alpha}$ und kritischer oder subkritischer Kopplungskonstante. Es wird gezeigt, dass die L^2 -Normen, die durch Potenzen dieses sogenannten verallgemeinerten Hardy-Operators erzeugt werden, zu den L^2 -Normen, die durch Potenzen des fraktionalen Laplace-Operators erzeugt werden, äquivalent sind. Darüberhinaus erhalten wir verallgemeinerte und umgekehrte Hardy-Ungleichungen. Tatsächlich sind diese, neben kürzlich hergeleiteten Schranken für den Wärmeleitungskern $\exp(-\mathcal{L}_{a,\alpha})$ von Bogdan u. a. [15] für $a < 0$ und Cho u. a. [24] beziehungsweise Jakubowski und Wang [99] für $a > 0$, die wesentlichen Zutaten für den Beweis der Äquivalenz der Normen.

Die Verallgemeinerung dieses Ergebnisses auf L^p ist bisher nur für positive Kopplungskonstanten möglich, siehe Kapitel 8. Der Beweis des Ergebnisses beruht wesentlich auf der Gültigkeit eines Spektralmultiplikator-Theorems. Dieses kann bisher nur für den Wärmeleitungskern (sehr direkt allerdings) und alle erlaubten Kopplungskonstanten sowie für hinreichend glatte Funktionen und nicht-negative Kopplungen gezeigt werden.

Wir stellen in Anhang D zwei mögliche Beweise für ein Multiplikator-Theorem für $a \geq 0$ vor. Der erste Beweis, welcher tatsächlich für den Operator $(-\Delta)^{\alpha/2} + V$ und alle messbaren $V \geq 0$ geführt wird und wesentlich auf Ideen von Hebisch [84, 85] aufbaut, beruht auf klassischer Calderón–Zygmund-Theorie und scheitert an schlechten punktweisen Schranken kompakt getragener, glatter Funktionen des Operators. Allerdings liefert der Beweis ein Multiplikator-Theorem für den Spezialfall $d = 1$ und $\alpha \in (1, 2)$ sowie für alle $d \in \mathbb{N}$ und $\alpha \in (0, 2)$, wenn der Multiplikator zudem kompakt getragen und hinreichend regulär ist.

Der zweite Beweis beruht auf einem Multiplikator-Satz für Operatoren, deren Wärmeleitungskerne nur algebraisch abfallen, keine Singularitäten aufweisen, aber eine gewisse Hölder-Bedingung erfüllen (Hebisch [85]). Dieser Beweis ist auf den Operator $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ zugeschnitten. Die größte Schwierigkeit besteht darin, die Glattheitsbedingung des gestörten Wärmeleitungskerns nachzuweisen. Dazu verifiziert man sie zunächst für den Wärmeleitungskern von $(-\Delta)^{\alpha/2}$ und verwendet dann Störungstheorie in Form der Duhamel-Formel sowie die kürzlich gewonnenen Schranken von Cho u. a. [24] beziehungsweise Jakubowski und Wang [99] für den

Wärmeleitungskern von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ mit positiver Kopplungskonstante. Die Gültigkeit des Ergebnisses für negative Kopplungskonstanten ist noch völlig offen und kann wahrscheinlich weder mit der ersten oder der zweiten Methode bewiesen werden.

Notation

Folgende Notation wird häufig in dieser Arbeit verwendet. Abweichungen davon, oder weitere Notationen, werden innerhalb des jeweiligen Kapitels separat eingeführt.

1. Mit A, a oder konst werden generische positive Konstanten bezeichnet, falls nichts anderes ausdrücklich behauptet wird. Sollte A von Parameter(n) s abhängen, schreiben wir A_s , um diese Abhängigkeit zum Ausdruck zu bringen. „Triviale“ Abhängigkeiten, wie von der Dimension d des zugrunde liegenden Raums, werden, unter Missbrauch dieser Notation, manchmal unterdrückt. Positive Konstanten können von Zeile zu Zeile variieren. Wir werden sie trotzdem mit demselben Buchstaben kennzeichnen, es sei denn, wir sagen etwas anderes.
2. Für zwei Zahlen $X, Y \in [0, \infty)$ schreiben wir $X \lesssim Y$, wann immer es eine Konstante $A > 0$ gibt, sodass $X \leq A \cdot Y$. Um gegebenenfalls Abhängigkeiten von A von einem Parameter s zu kennzeichnen, schreiben wir $X \lesssim_s Y$. Darüberhinaus meint $X \sim Y$, dass $Y \lesssim X \lesssim Y$. In diesem Fall sagen wir, dass X zu Y *äquivalent* ist. Schließlich verwenden wir die Notation

$$X \wedge Y := \min\{X, Y\} \quad \text{und} \quad X \vee Y := \max\{X, Y\}.$$

3. Die Gauß-Klammer für ein $x \in \mathbb{R}$ ist durch $[x] := \max\{k \in \mathbb{Z} : k \leq x\}$ definiert.
4. Der Real- beziehungsweise Imaginärteil einer komplexen Zahl z wird mit $\Re(z)$, beziehungsweise $\Im(z)$ bezeichnet.
5. Wir arbeiten durchweg in euklidischen Räumen. Hierbei bezeichnet $d \in \mathbb{N}$ die Dimension des zugrundeliegenden Raums \mathbb{R}^d .

Das Komplement einer Menge $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ wird mit Ω^c bezeichnet.

Der Durchmesser von Ω wird mit $\text{diam } \Omega = \sup\{|x - y| : x, y \in \Omega\}$ bezeichnet.

Der Abstand eines Punktes $x \in \mathbb{R}^d$ zu Ω wird mit $d(x, \Omega) = \inf\{|x - y| : y \in \Omega\}$ bezeichnet.

Der p -te Lebesgue-Raum ($1 \leq p \leq \infty$) \mathbb{C}^q -wertiger Funktionen über einer Teilmenge $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ wird mit $L^p(\Omega : \mathbb{C}^q)$ bezeichnet. Für $q = 1$ schreiben wir auch $L^p(\Omega)$. Die L^p -Norm einer Funktion f wird mit $\|f\|_p$ oder $\|f\|_{L^p(\Omega)}$ bezeichnet. Der Raum der lokal integrierbaren Funktionen wird mit $L^1_{\text{loc}}(\Omega)$ bezeichnet und ist durch

$$L^1_{\text{loc}}(\Omega) := \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{C} \text{ messbar} : f|_K \in L^1(K) \text{ für alle } K \subseteq \Omega \text{ kompakt}\}$$

definiert, wobei mit $f|_K$ die Einschränkung der Funktion f auf die Menge K gemeint ist. Der Raum aller kompakt getragenen L^p -Funktionen wird mit L^p_{comp} bezeichnet.

Der s -te L^p -Potential-Raum ($s \in \mathbb{R}$) wird mit $W^{s,p}(\mathbb{R}^d)$ bezeichnet. Er beinhaltet alle Funktionen f für die die Norm $\|(1 - \Delta)^{s/2} f\|_{L^p}$ endlich ist. Dabei bezeichnet $(1 - \Delta)^{s/2}$

den Operator, der durch Multiplikation mit $(1 + 4\pi^2|\xi|^2)^{s/2}$ im Fourierraum gegeben ist. Für $p = 2$ schreiben wir $H^s(\mathbb{R}^d) = W^{s,2}(\mathbb{R}^d)$. Die Norm wird mit $\|f\|_{H^s}$ bezeichnet. Unter Missbrauch der Terminologie werden wir $W^{s,p}$ auch als Sobolew-Raum bezeichnen, selbst wenn s keine natürliche Zahl ist.

Der Raum der glatten, kompakt getragenen Funktionen wird mit $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ bezeichnet.

Der Raum der Schwartz-Funktionen wird mit $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ bezeichnet.

Die $d - 1$ -dimensionale Einheitsphäre in \mathbb{R}^d wird mit \mathbb{S}^{d-1} bezeichnet.

Die um $x \in \mathbb{R}^d$ zentrierte Kugel mit Radius R wird mit $B_x(R)$ bezeichnet.

Der Träger einer Funktion f auf \mathbb{R}^d wird mit $\text{supp } f$ bezeichnet.

6. Die charakteristische Funktion einer Menge $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ wird mit $\mathbf{1}_\Omega$ oder χ_Ω bezeichnet.

Die Heaviside-Funktion wird mit $\theta(x)$ bezeichnet. Wir verwenden, falls nichts anderes behauptet wird, die Konvention $\theta(x) = 1$, wenn $x > 0$ und $\theta(x) = 0$, wenn $x \leq 0$.

7. Wir schreiben X_- für den negativen Teil einer reellen Zahl oder eines selbstadjungierten Operators X und definieren X_- als positive Größe, das heißt $X_- = -X\chi_{(-\infty,0]}(X)$. Der positive Teil ist durch $X_+ = \max\{X, 0\}$ definiert.

8. Je nach Kontext meinen beispielsweise $|p|$ oder \mathbf{p} entweder einen (Fourier-)Multiplikator oder den (Pseudo-)Differentialoperator $\sqrt{-\Delta}$ beziehungsweise $-i\nabla$ in $L^2(\mathbb{R}^d)$.

9. Das innere Produkt in einem Vektorraum V wird entweder mit (\cdot, \cdot) , $(\cdot, \cdot)_V$, $\langle \cdot, \cdot \rangle$, oder $\langle \cdot, \cdot \rangle_V$ bezeichnet. Sollte V komplexwertig sein, ist das innere Produkt so definiert, dass es semilinear im ersten und linear im zweiten Argument ist.

10. Der Definitionsbereich eines linearen Operators A wird mit $\text{dom}(A)$ bezeichnet.

Die Operatornorm von A wird mit $\|A\|$ bezeichnet.

Der Kern beziehungsweise das Bild von A werden mit $\ker(A)$ beziehungsweise $\text{ran}(A)$ bezeichnet.

Das Spektrum wird mit $\sigma(A)$ oder $\text{spec}(A)$ bezeichnet. Insbesondere wird das Punktspektrum mit $\sigma_p(A)$ und das wesentliche Spektrum mit $\sigma_{\text{ess}}(A)$ bezeichnet.

11. Für lineare, selbstadjungierte Operatoren A und B meint die Schreibweise $A \leq B$, dass $B - A$ ein nicht-negativer Operator ist. Wir bezeichnen solche Ungleichungen auch als *Form-Ungleichungen*, da sie $(f, Af) \leq (f, Bf)$ für alle f im gemeinsamen Formbereich von A und B bedeuten. Die Relation \leq ist eine Partialordnung auf den selbstadjungierten Operatoren [11, Seite 112].

Angenommen, A und B sind zusätzlich nicht-negativ. Eine Funktion $f : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ heißt *operatormonoton*, wenn aus $A \leq B$ die Form-Ungleichung $f(A) \leq f(B)$ folgt. Beispielsweise sind die Abbildungen $x \mapsto x^s$ mit $s \in (0, 1]$ mit dem Löwner-Heinz-Theorem operatormonoton, siehe [18, Theorem 2.6].

Eine Funktion $f : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ heißt *operatorkonvex*, wenn für alle $\lambda \in [0, 1]$ die Ungleichung $f((1 - \lambda)A + \lambda B) \leq (1 - \lambda)f(A) + \lambda f(B)$ gilt. Beispielsweise sind die Abbildungen $x \mapsto x^s$ mit $s \in [1, 2]$ operatorkonvex, siehe wieder [18, Theorem 2.6].

12. In den Kapiteln 4 und 6 werden matrixwertige Operatoren in $L^2(\mathbb{R}^d : \mathbb{C}^n)$ behandelt. Für Operatoren S in $L^2(\mathbb{R}^d)$ werden wir, wenn es aus dem Kontext ersichtlich ist, den Zusatz $\otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^n}$ bei $S \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^n}$ vernachlässigen.

Kapitel 2

Konvergenz der semiklassischen Dichte mittels der Scott-Korrektur

Dieses Kapitel beruht auf der gemeinsamen Arbeit [125] mit Heinz Siedentop. Die Ergebnisse dieses Kapitels sowie deren Darstellung und Beweise stimmen mit denen, die in [125] erarbeitet wurden, überein.

Wir geben einen sehr einfachen Beweis für die Konvergenz der auf der Thomas–Fermi-Längenskala reskalierten Einteilchendichte eines Grundzustands der drei untersuchten Vielteilchen-Operatoren. Dieser beruht im Wesentlichen auf der Scott-Korrektur und der Beobachtung, dass es nützlich ist, einen positiven Term, der bei der Herleitung der unteren Schranke der asymptotischen Entwicklung der Grundzustandsenergie auftritt, nicht zu verwerfen. Im Rahmen der Ionisierungsvermutung für den nicht-relativistischen Vielteilchen-Schrödinger-Operator geht diese Beobachtung auf Fefferman und Seco [54] zurück. Der Einfachheit halber geben wir im Folgenden nur die Formeln für den Chandrasekhar-Operator wieder. Die Verallgemeinerung auf die anderen beiden relativistischen Operatoren erfolgt analog. Es müssen lediglich die Bereiche der erlaubten Kopplungskonstanten (im Brown–Ravenhall-Modell sind Kopplungen in $(0, 2/(\pi/2 + 2/\pi)]$ und im Furry-Modell in $(0, 1)$ erlaubt) sowie die Bedeutung der Einteilchendichte angepasst werden.

Wir beginnen mit einer kurzen Wiederholung der Definition des vorliegenden Systems. Wir untersuchen einen am Ursprung fixierten Kern der Ladung Z , welcher mit N Elektronen, die q Spin-Freiheitsgrade haben, über das Coulomb-Potential wechselwirkt. Darüberhinaus berücksichtigen wir die Wechselwirkungen zwischen den Elektronen, welche ebenfalls Coulombisch sind. Im Folgenden betrachten wir lediglich neutrale Atome, also $N = Z$. In atomaren Einheiten ist der Chandrasekhar-Operator durch die Friedrichs-Erweiterung im fermionischen Vielteilchen-Hilbertraum $\bigwedge_{\nu=1}^Z L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^q)$ der zu

$$\sum_{\nu=1}^Z \left(\sqrt{-c^2 \Delta_{\nu} + c^4} - c^2 - \frac{Z}{|x_{\nu}|} \right) + \sum_{1 \leq \nu < \mu \leq Z} \frac{1}{|x_{\nu} - x_{\mu}|}$$

gehörenden quadratischen Form auf $\bigwedge_{\nu=1}^Z C_c^{\infty}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^q)$ definiert. Hierbei bezeichnet c die Lichtgeschwindigkeit, welche durch das Inverse der Feinstrukturkonstanten gegeben ist. Die quadratische Form ist genau dann nach unten beschränkt, wenn $Z/c =: \gamma \leq 2/\pi$ (Kato [101, Kapitel 5, Gleichung (5.33)], Herbst [87, Theorem 2.5], Weder [179]). Für $\gamma < 2/\pi$ ist der quadratische Formbereich $H^{1/2}(\mathbb{R}^{3Z} : \mathbb{C}^{qZ}) \cap \bigwedge_{\nu=1}^Z (L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^q))$. Wir bezeichnen die so gewonnene

Friedrichs-Erweiterung mit C_Z . Eine allgemeine fermionische Grundzustandsdichtematrix ist durch

$$\sum_{\mu=1}^M w_{\mu} |\psi_{\mu}\rangle \langle \psi_{\mu}| \quad (2.1)$$

gegeben, wobei die ψ_{μ} eine Orthonormalbasis für den Grundzustandseigenraum formen und $w_{\mu} \geq 0$ Gewichte sind, die der Normierungsbedingung $\sum_{\mu=1}^M w_{\mu} = 1$ genügen. Mit der Darstellung (2.1) drücken wir die Tatsache aus, dass ein fermionischer Grundzustand im Allgemeinen entartet ist. Die zugehörige Einteilchendichte ρ_Z ist durch

$$\rho_Z(x) := N \sum_{\mu=1}^M w_{\mu} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N=1}^q \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} |\psi_{\mu}(x, \sigma_1; x_2, \sigma_2; \dots; x_N, \sigma_N)|^2 dx_2 \dots dx_N$$

definiert.

Wir bezeichnen die Grundzustandsenergie dieses Systems mit $E(Z) := \inf \text{spec}(C_Z)$. Frank u. a. [69] und Solovej u. a. [162], beziehungsweise Frank u. a. [70] für den Brown–Ravenhall-Operator und Handrek und Siedentop [80] für den Furry-Operator, bestimmten die ersten beiden Terme der asymptotischen Entwicklung der Grundzustandsenergie für $Z, c \rightarrow \infty$ mit festem Quotienten $\gamma := Z/c$. Die Autoren zeigten

$$E(Z) = E^{\text{TF}}(Z) + \left(\frac{q}{4} - s(\gamma)\right) Z^2 + \mathcal{O}(Z^{47/24}), \quad (2.2)$$

wobei $E^{\text{TF}}(Z)$ das Infimum des neutralen Thomas–Fermi-Funktional und

$$s(\gamma) := \gamma^{-2} \text{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^q)} \left[\left(\sqrt{-\Delta + 1} - 1 - \frac{\gamma}{|x|} \right)_- - \left(-\frac{1}{2}\Delta - \frac{\gamma}{|x|} \right)_- \right] > 0$$

die Spektralverschiebung zwischen dem relativistischen Chandrasekhar- und dem nicht-relativistischen Wasserstoff-Operator bezeichnet. Dies ist die Differenz der Summe der negativen Eigenwerte von

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta - \frac{\gamma}{|x|} \right) \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^q} \quad \text{und} \quad \left(\sqrt{-\Delta + 1} - 1 - \frac{\gamma}{|x|} \right) \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^q}.$$

Analoge Formeln gelten für den Brown–Ravenhall- und den Furry-Operator, siehe [70, Formel (1.8) und (1.11)] beziehungsweise [80, Formel (9) und (11)]. Diese Ergebnisse zeigen, dass der führende Beitrag zur Grundzustandsenergie durch die nicht-relativistische Thomas–Fermi-Theorie beschrieben wird. Unser Ergebnis betrifft die Grundzustandsdichte auf dieser Längenskala und besagt, dass sie für $Z, c \rightarrow \infty$ durch die wasserstoffartige Thomas–Fermi-Dichte ρ_1^{TF} approximiert wird.

Wir erinnern daran, dass die Thomas–Fermi-Dichte die Relation $\rho_Z^{\text{TF}}(x) = Z^2 \rho_1^{\text{TF}}(Z^{1/3}x)$ erfüllt. Diese Skalierungsrelation sowie der führende Term von $E(Z)$ zeigen, dass die Thomas–Fermi-Theorie Elektronen auf der Längenskala $Z^{-1/3}$ und Energieskala $Z^{7/3}$ beschreibt. Unser Resultat über die Konvergenz der Grundzustandsdichte auf dieser Längenskala unterstreicht diese Beobachtung und zeigt insbesondere, dass sich der Hauptteil der Elektronen in relativistisch beschriebenen Vielteilchen-Coulomb-Systemen dennoch nicht-relativistisch verhält.

Führt man die auf der Thomas–Fermi reskalierte Grundzustandsdichte

$$\hat{\rho}_Z(x) := Z^{-2}\rho_Z(Z^{-1/3}x) \quad (2.3)$$

ein und erinnert sich an die durch die elektrostatische Selbstwechselwirkungsenergie erzeugte *Coulomb-Norm*

$$\|\rho\|_C^2 := D(\rho, \rho) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(x)\rho(y)}{|x-y|} dx dy,$$

lautet unser Resultat wie folgt.

Satz 2.0.1. *Sei $\gamma \in (0, 2/\pi]$. Dann konvergiert für $Z, c \rightarrow \infty$ und fixiertem $Z/c = \gamma$ die auf der Thomas–Fermi-Längenskala reskalierte Dichte in Coulomb-Norm gegen die wasserstoffartige Thomas–Fermi-Dichte. Insbesondere gilt*

$$\|\hat{\rho}_Z - \rho_1^{\text{TF}}\|_C = \mathcal{O}(Z^{-3/16})$$

für $Z \rightarrow \infty$.

Bevor wir zum Beweis kommen, machen wir zwei *Bemerkungen 2.0.2*.

1. Solovej u. a. [162] beweisen die Scott-Korrektur auch im molekularen Fall, vernachlässigen allerdings ebenfalls den oben bemerkten positiven Term bei der Herleitung der unteren Schranke an die Grundzustandsenergie. Der Beweis lässt sich somit für Moleküle verallgemeinern, so lange der Abstand der Kerne zueinander auf der Thomas–Fermi-Längenskala $Z^{-1/3}$ gehalten wird.
2. Mit der Cauchy–Schwarz-Ungleichung folgt, dass die reskalierte Dichte auch schwach konvergiert. Sei dazu $\sigma : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion mit endlicher Coulomb-Norm, sprich $\|\sigma\|_C < \infty$. Dann gilt

$$D(\sigma, \hat{\rho}_Z - \rho_1^{\text{TF}}) = \mathcal{O}(Z^{-3/16}).$$

Beispiele für Funktionen mit endlicher Coulomb-Norm sind

- Funktionen in $L^{6/5}(\mathbb{R}^3)$ (was aus der Hardy–Littlewood–Sobolev-Ungleichung ersichtlich ist) oder
- homogene Ladungsdichten auf Kugelschalen.

Setzt man schließlich $\sigma := -(1/4\pi)\Delta U$, wobei U im Unendlichen verschwinden soll, erhält man außerdem

$$\lim_{Z \rightarrow \infty} \int U \hat{\rho}_Z = \int U \rho_1^{\text{TF}}$$

für alle solche U .

Beweis des Satzes 2.0.1. Wie eingangs erwähnt, ist die grundlegende Beobachtung, einen gewissen positiven Term in der unteren Schranke im Beweis der asymptotischen Entwicklung der Grundzustandsenergie nicht zu verwerfen. Folgt man dem Beweis der unteren Schranke, so stellt man fest, dass der Beweis der Scott-Korrektur von Frank u. a. nicht nur die Scott-Formel (2.2) liefert.

Mit einer Korrelationsungleichung von Lieb [114] (basierend auf Onsagers Lemma [138] und später weiter verbessert, siehe beispielsweise [117, 9, 111]), der Hölder- und der Lieb-Thirring-Ungleichung schätzt man zunächst die Selbstwechselwirkungsenergie durch

$$\begin{aligned}
\sum_{\mu} w_{\mu}(\psi_{\mu}, \sum_{i < j} \frac{1}{|x_i - x_j|} \psi_{\mu}) &\geq D[\rho_Z] - \text{konst} \int \rho_Z^{4/3} \\
&\geq D[\rho_Z - \rho_Z^{\text{TF}}] - D[\rho_Z^{\text{TF}}] + 2D(\rho_Z, \rho_Z^{\text{TF}}) - \text{konst} \sqrt{\int \rho_Z} \sqrt{\int \rho_Z^{5/3}} \\
&\geq \|\rho_Z - \rho_Z^{\text{TF}}\|_C^2 - D[\rho_Z^{\text{TF}}] + \int \rho_Z(x) \left(\rho_Z^{\text{TF}} * \frac{1}{|\cdot|} \right) (x) dx - \text{konst} Z^{\frac{1}{2} + \frac{7}{6}}
\end{aligned} \tag{2.4}$$

ab. Mit dieser Schranke sowie der trivialen Ungleichung

$$\left(\rho_Z^{\text{TF}} * \frac{1}{|\cdot|} \right) (x) \geq \int_{|x-y| \geq R_Z(x)} \frac{\rho_Z^{\text{TF}}(y)}{|x-y|} dy,$$

wobei $R_Z(x)$ der Radius des Austauschlochs ist, welches durch

$$\frac{1}{2} = \int_{|x-y| \leq R_Z(x)} \rho_Z^{\text{TF}}(y) dy$$

definiert ist, folgen aus dem Beweis der Scott-Korrektur [69, Theorem 1, Lemma 5 und Proposition 3] (wobei wir bemerken, dass die zweite Summe in [69, Proposition 3] bei $\ell = Z$ abgeschnitten sein muss) für festes $\gamma \in (0, 2/\pi]$ die Schranken

$$\begin{aligned}
E^{\text{TF}}(Z) + \left(\frac{q}{4} - s(\gamma) \right) Z^2 + \|\rho_Z^{\text{TF}} - \rho_Z\|_C^2 - \text{konst} Z^{47/24} \\
\leq E(Z) \leq E^{\text{TF}}(Z) + \left(\frac{q}{4} - s(\gamma) \right) Z^2 + \text{konst} Z^{47/24}.
\end{aligned} \tag{2.5}$$

Man bemerkt, dass die linke und die rechte Seite bis auf Terme der Ordnung $Z^{47/24}$ identisch sind. Subtrahiert man sie und stellt die Ungleichung um, erhält man

$$\|\rho_Z^{\text{TF}} - \rho_Z\|_C^2 \leq \text{konst} Z^{47/24}. \tag{2.6}$$

Aufgrund der Skalierungsrelation $\rho_Z^{\text{TF}}(x) = Z^2 \rho_1^{\text{TF}}(Z^{1/3}x)$ und der Definition von $\hat{\rho}_Z$ in (2.3), erhält man durch Skalieren

$$\begin{aligned}
\|\rho_Z^{\text{TF}} - \rho_Z\|_C^2 &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} dx \int_{\mathbb{R}^3} dy \frac{(\rho_Z^{\text{TF}}(x) - \rho_Z(x))(\rho_Z^{\text{TF}}(y) - \rho_Z(y))}{|x-y|} \\
&= \frac{Z^{7/3}}{2} \int_{\mathbb{R}^3} dx \int_{\mathbb{R}^3} dy \frac{(\rho_1^{\text{TF}}(x) - \hat{\rho}_1(x))(\rho_1^{\text{TF}}(y) - \hat{\rho}_1(y))}{|x-y|}.
\end{aligned}$$

Die behauptete Konvergenz folgt, indem man diese Gleichheit mit (2.6) kombiniert, durch $Z^{7/3}$ teilt und die Wurzel zieht. \square

Wir bemerken schließlich, dass auch in den Beweisen der Scott-Korrektur für den Brown-Ravenhall- und den Furry-Operator der fehlende Term in Ungleichung (2.4) hinzuaddiert werden kann. Aus diesem Grund können die obigen Argumente auch für diese beiden Operatoren übertragen werden, wobei – wie oben geschildert – lediglich der Bereich der erlaubten Kopplungskonstanten und die Definition der Einteilchendichte angepasst werden müssen.

Kapitel 3

Konvergenz der semiklassischen Dichte im Chandrasekhar-Modell

3.1 Einführung

In diesem Kapitel geben wir einen alternativen Beweis der Konvergenz der auf der Thomas-Fermi-Längenskala reskalierten Einteilchendichte eines Grundzustands des Chandrasekhar-Operators im Grenzwert großer Teilchenzahlen. Dieser verwendet das Argument der linearen Antwort sowie die Kenntnis des führenden Terms der asymptotischen Entwicklung der Grundzustandsenergie des adäquat gestörten Chandrasekhar-Operators. Die Herleitung dieses Terms beruht stark auf den Argumenten von Sørensen [139] zur Herleitung des führenden Terms für den ungestörten Operator, weshalb dieser Beweis keine Konvergenzrate liefert.

Die Organisation des Kapitels ist wie folgt. Im nächsten Abschnitt geben wir eine präzise Definition des vorliegenden Systems und den wichtigen Größen, formulieren unser Ergebnis und illustrieren den Beweis. In den nächsten vier Abschnitten bestimmen wir die führende Ordnung der Grundzustandsenergie des gestörten Chandrasekhar-Operators. Im letzten Abschnitt verwenden wir dieses Resultat zusammen mit dem Argument der linearen Antwort, um das Konvergenzresultat zu beweisen.

3.2 Definitionen und Resultate

Wir beginnen mit der konkreten Beschreibung des vorliegenden Systems. Wir betrachten einen am Ursprung fixierten Kern der Ladung Z , welcher mit $N = Z$ Elektronen, die q Spin-Freiheitsgrade haben, über das Coulomb-Potential wechselwirkt. Darüberhinaus berücksichtigen wir die Coulomb-Wechselwirkungen zwischen den Elektronen. Da keine Wechselwirkungen auftreten, die den Spin der Elektronen miteinbeziehen, setzen wir der Einfachheit halber $q = 1$. Wir beschreiben das System durch den Chandrasekhar-Operator und erinnern im Folgenden an Notation, die in diesem Kapitel verwendet wird. Der Operator ist durch die Friedrichs-Erweiterung im fermionischen Vielteilchen-Hilbertraum $\bigwedge_{\nu=1}^Z L^2(\mathbb{R}^3)$ der zu

$$\sum_{\nu=1}^Z \left(\sqrt{-c^2 \Delta_{\nu} + c^4} - c^2 - \frac{Z}{|x_{\nu}|} \right) + \sum_{1 \leq \nu < \mu \leq Z} \frac{1}{|x_{\nu} - x_{\mu}|}$$

gehörenden quadratischen Form auf $\bigwedge_{\nu=1}^Z C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ definiert. Diese Erweiterung wird für $Z/c =: \gamma \in (0, 2/\pi]$ mit C_Z bezeichnet. Die Grundzustandsenergie $E(Z) := \inf \text{spec}(C_Z)$ des Systems ist ein Eigenwert von C_Z (Lewis u. a. [112] und Vugalter und Zhislin [185]), welcher entartet sein kann. Wir bezeichnen mit ψ_1, \dots, ψ_M eine Basis des zugehörigen Eigenraums. Die zugehörige Grundzustandsdichtematrix wird mit

$$d^C = \sum_{\mu=1}^M w_\mu |\psi_\mu\rangle\langle\psi_\mu|$$

bezeichnet, wobei $w_\mu \geq 0$ Gewichte sind, die die Normierungsbedingung $\sum_{\mu=1}^M w_\mu = 1$ erfüllen. Die Einteilchendichte ist durch

$$\rho_Z(x) := N \sum_{\mu=1}^M w_\mu \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} |\psi_\mu(x, x_2, \dots, x_N)|^2 dx_2 \dots dx_N \quad \text{für } x \in \mathbb{R}^3$$

definiert.

Wir erinnern daran, dass die Thomas–Fermi-Dichte beziehungsweise das -Potential den Skalierungsrelationen $\rho_Z^{\text{TF}}(x) = Z^2 \rho_1^{\text{TF}}(Z^{1/3}x)$ und $\Phi_Z^{\text{TF}}(x) = Z^{4/3} \Phi_1^{\text{TF}}(Z^{1/3}x)$ genügen, wobei ρ_1^{TF} und Φ_1^{TF} jeweils die wasserstoffartigen ($Z = 1$) Minimierer beziehungsweise Potentiale sind. Wir zeigen im Folgenden, dass die Grundzustandsdichte auf der Thomas–Fermi-Skala

$$\hat{\rho}_Z(x) := Z^{-2} \rho_Z(Z^{-1/3}x)$$

schwach gegen die wasserstoffartige Thomas–Fermi-Dichte konvergiert.

Satz 3.2.1. *Seien $\gamma \in (0, 2/\pi]$ und $U \in L^{5/2}(\mathbb{R}^3) \cap L^4(\mathbb{R}^3)$. Dann gilt für $Z, c \rightarrow \infty$ mit festem $Z/c = \gamma$,*

$$\lim_{Z \rightarrow \infty} \int \hat{\rho}_Z(x) U(x) dx = \int \rho_1^{\text{TF}}(x) U(x) dx.$$

Der Beweis der Behauptung beruht auf dem Argument der linearen Antwort. Um dieses anwenden zu können, benötigen wir die folgende Aussage über den führenden Term der Grundzustandsenergie des geeignet gestörten Chandrasekhar-Operators.

Behauptung 3.2.2. *Seien $\lambda > 0$, $0 \leq U \in L^{5/2}(\mathbb{R}^3) \cap L^4(\mathbb{R}^3)$, $U_Z(x) := Z^{4/3} U(Z^{1/3}x)$, $C_{Z,\lambda} := C_Z - \lambda \sum_{\nu=1}^N U_Z(x_\nu)$ und $E_\lambda(Z) := \inf \text{spec}(C_{Z,\lambda})$. Dann ist*

$$E_\lambda(Z) \geq - \int \left(\frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) - \lambda U_Z(q) \right) \underline{\quad} dp dq - D[\rho_Z^{\text{TF}}] - o(Z^{7/3}).$$

Der Beweis verläuft analog zu dem von Sørensen [139]. Wir reduzieren zunächst das lineare Vielteilchen-Problem auf ein nicht-lineares Einteilchen-Problem mit Hilfe einer Korrelationsungleichung. Eine sofortige Lokalisierung im Phasenraum wie im nicht-relativistischen Fall (siehe z.B. Lieb [115]) führt zu Problemen, da das Coulomb-Potential nicht in den „relativistischen, semiklassischen L^p -Räumen“ $L^{5/2} \cap L^4$ liegt. Insbesondere kann man daher nicht ohne Weiteres das relativistische Analogon der Lieb–Thirring-Ungleichung, die Daubechies-Ungleichung [31], verwenden, um die potentielle Energie durch kinetische Energie zu kontrollieren. Wir lokalisieren daher zunächst \mathbb{R}^3 in drei Regionen. Die entstehenden Lokalisierungsfehler der kinetischen Energie wurden bereits in [139, Abschnitt 5] hergeleitet und behandelt.

Die kernnächsten Elektronen bewegen sich schneller als ein substantieller Bruchteil der Lichtgeschwindigkeit, weshalb ihre kinetische Energie mit gutem Gewissen durch die hyperrelativistische Dispersionsrelation $|p|$ beschrieben werden kann. Ihr Beitrag zur Grundzustandsenergie wird durch die Hardy–Lieb–Thirring-Ungleichung von Frank u. a. [64] abgeschätzt. Es stellt sich heraus, dass die Ruheenergie des Elektrons den größten Beitrag liefert.

Man erwartet, dass sich die meisten Elektronen in der äußersten Region befinden, wo eine semiklassische Beschreibung angebracht ist. Hier lokalisieren wir – wie Lieb [115] – das Problem im Phasenraum mittels kohärenter Zustände und zeigen, dass die Energie mit der nicht-relativistischen Thomas–Fermi-Energie vergleichbar ist.

Der Beitrag zur Energie in der mittleren Zone – in der sich keine Coulomb-Singularität mehr befindet – wird durch die Daubechies-Ungleichung abgeschätzt. Der Grund für die Einführung dieser Region ist, dass die innere und äußere Regionen nicht überlappen, da die Ruheenergie der Elektronen uns zwingt, den Lokalisierungsradius der inneren Zone echt kleiner zu wählen als den Radius, der die äußere Zone definiert. Dieser wird wiederum durch die Lokalisierungsfehler bestimmt, die bei der Phasenraumlokalisierung auftreten.

3.3 Reduzierung auf ein Einteilchen-Problem und Lokalisierung

Sei $g \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ sphärisch symmetrisch, sodass $g \geq 0$, $\|g\|_2 = 1$ und $\text{supp } g \subseteq B_0(1)$. Die Funktion g wird später in der Definition der kohärenten Zustände auftauchen. Für $R > 0$ definieren wir $g_R(x) := R^{-3/2}g(x/R)$. Für beliebiges $0 \leq \rho \in L^1(\mathbb{R}^3)$ schätzen wir zunächst die Selbstwechselwirkung der Elektronen durch ein mittleres Feld $\rho * |\cdot|^{-1} * g_R^2$ ab. Dies ist gerade das Potential, welches man nach der Phasenraumlokalisierung von $\rho * |\cdot|^{-1}$ erhält, siehe (3.8b) später. Mit der Korrelationsungleichung von Mancas u. a. [123] erhält man

$$\sum_{\nu < \mu} \frac{1}{|x_\nu - x_\mu|} \geq \sum_{\nu=1}^N \rho * g_R^2 * \frac{1}{|\cdot|}(x_\nu) - \sum_{\nu=1}^N L_{\rho * g_R^2}(x_\nu) - D[\rho * g_R^2] \quad (3.1)$$

mit dem Austauschpotential

$$L_{\rho * g_R^2}(x) = \int_{|x-y| \leq R(x)} \frac{(\rho * g_R^2)(y)}{|x-y|} dy$$

und dem Radius $R(x)$ des Austauschlochs, welcher durch

$$\frac{1}{2} = \int_{|x-y| \leq R(x)} (\rho * g_R^2)(y) dy \quad (3.2)$$

definiert ist. Wir setzen nun $\rho = \rho_Z^{\text{TF}}$. Cassanas und Siedentop [19, Lemma 5] haben bereits $\|L_{\rho_Z^{\text{TF}} * g_R^2}\|_\infty \leq A_g Z$ gezeigt. Wegen der sphärischen Symmetrie von g_R^2 kann man den Newtonschen Satz [136] verwenden, um $D[\rho_Z^{\text{TF}} * g_R^2] \leq D[\rho_Z^{\text{TF}}]$ abzuschätzen. Damit ist die rechte Seite von (3.1) nach unten durch

$$\sum_{\nu=1}^N \rho_Z^{\text{TF}} * g_R^2 * \frac{1}{|\cdot|}(x_\nu) - A_g Z^2 - D[\rho_Z^{\text{TF}}]$$

beschränkt. Somit kann der auf der Längenskala c^{-1} reskalierte Operator $C_{\gamma,\lambda}$ von unten durch eine Summe von Einteilchen-Operatoren abgeschätzt werden, nämlich

$$C_{\gamma,\lambda} \geq \sum_{\nu=1}^N \left[\sqrt{-\Delta_\nu + 1} - 1 - \frac{\gamma}{|x_\nu|} + c^{-2} \rho_Z^{\text{TF}} * \frac{1}{|\cdot|} * g_R^2 \left(\frac{x_\nu}{c} \right) - \frac{\lambda}{c^2} U_Z \left(\frac{x_\nu}{c} \right) \right] - c^{-2} D[\rho_Z^{\text{TF}}] - A_g c^{-2} Z^2.$$

Die quadratische Form wird durch Slater-Determinanten $\psi(x_1, \dots, x_N) = N^{-1/2} m_1 \wedge \dots \wedge m_N$ minimiert, wobei $(m_\nu, m_\mu) = \delta_{\nu,\mu}$ und $m_\nu \in H^{1/2}(\mathbb{R}^3)$. Da $C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ ein determinierender Bereich von $\sqrt{-\Delta + 1} - 1 - \gamma|x|^{-1} - U$ für $0 < \gamma \leq 2/\pi$ ist (Herbst [87]) und $L^4 \cap L^{5/2}$ -Funktionen relativ $\sqrt{-\Delta + 1}$ -Form-beschränkt sind, genügt, es lediglich $m_\nu \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ zu betrachten.

Für $\beta \in (0, 1/2)$ definieren wir wie in [139] monotone Funktionen $\theta_1, \theta_2 \in C_c^\infty(\mathbb{R}_+ : [0, 1])$, die $\theta_1(x)^2 + \theta_2(x)^2 = 1$ und

$$\theta_1(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x < 1 - \beta \\ 0 & \text{für } x > 1 + \beta \end{cases} \quad \theta_2(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 1 - \beta \\ 1 & \text{für } x > 1 + \beta \end{cases}$$

erfüllen. Wir lokalisieren \mathbb{R}^3 mit den Funktionen

$$\chi_1(x) := \theta_1 \left(\frac{|x|}{\tilde{R}_i} \right) \quad \chi_2(x) := \theta_1 \left(\frac{|x|}{\tilde{R}_a} \right) \theta_2 \left(\frac{|x|}{\tilde{R}_i} \right) \quad \chi_3(x) := \theta_2 \left(\frac{|x|}{\tilde{R}_a} \right).$$

Hierbei bezeichnen $\tilde{R}_i = cR_i$ beziehungsweise $\tilde{R}_a = cR_a$ die reskalierten Längenskalen, wobei $R_i = Z^{-r}$ und $R_a = Z^{-t}$, $r \in (8/9, 1)$ sowie $t \in (1/3, 2/3)$. Mit der Lokalisierungsformel von Lieb und Yau [122, Theorem 9],

$$(f, \sqrt{-\Delta + 1}f) = \sum_{j=1}^k (f, \chi_j \sqrt{-\Delta + 1} \chi_j f) - (f, Lf),$$

und

$$L(x, y) = \sum_{j=1}^k L_j = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{K_2(|x-y|)}{|x-y|^2} \sum_{j=1}^k (\chi_j(x) - \chi_j(y))^2,$$

erhält man mit $T(-\Delta) = \sqrt{-\Delta + 1} - 1$

$$\begin{aligned} & \left(\psi, \sum_{\nu=1}^N \left[T(-\Delta_\nu) - \frac{\gamma}{|x_\nu|} + c^{-2} \rho_Z^{\text{TF}} * \frac{1}{|\cdot|} * g_R^2 \left(\frac{x_\nu}{c} \right) - \frac{\lambda}{c^2} U_Z \left(\frac{x_\nu}{c} \right) \right] \psi \right) \\ &= \sum_{j=1}^3 \sum_{\nu=1}^N \left(m_\nu, \chi_j \left[T(-\Delta) - \frac{\gamma}{|x|} + c^{-2} \rho_Z^{\text{TF}} * \frac{1}{|\cdot|} * g_R^2 \left(\frac{x}{c} \right) - \frac{\lambda}{c^2} U_Z \left(\frac{x}{c} \right) \right] \chi_j m_\nu \right) \quad (3.3) \\ & \quad - \sum_{\nu=1}^N (m_\nu, L m_\nu). \end{aligned}$$

Mit der obigen Wahl von R_i und R_a zeigte Sørensen, dass viele der Lokalisierungsfehler nur zur Ordnung $o(Z^{7/3})$ in der Grundzustandsenergie beitragen. Genauer gesagt zeigte er, dass

die rechte Seite von (3.3) nach unten durch

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^3 \sum_{\nu=1}^N \left(m_\nu, \chi_j \left[T(-\Delta) - \frac{\gamma}{|x|} + c^{-2} \rho_Z^{\text{TF}} * \frac{1}{|\cdot|} * g_R^2 \left(\frac{x}{c} \right) - \frac{\lambda}{c^2} U_Z \left(\frac{x}{c} \right) \right] \chi_j m_\nu \right) \\ & - A \tilde{R}_i^{-2} \sum_{\nu} (\chi_1 m_\nu, \chi_1 m_\nu) - A \tilde{R}_i^{-2} \sum_{\nu} (\chi_2 m_\nu, \chi_- \chi_2 m_\nu) - o(Z^{7/3}) \end{aligned} \quad (3.4)$$

beschränkt ist, wobei R immer noch ein freier Parameter und χ_- die charakteristische Funktion der Kugel $B_0(2\tilde{R}_i)$ ist, siehe insbesondere [139, Formel (5.6)].

Wir untersuchen im Folgenden die drei Regionen einzeln genauer. In der inneren und der mittleren Region arbeiten wir mit dem auf der Längenskala c^{-1} reskalierten Operator und zeigen, dass die Beiträge zur Energie nur $o(Z^{1/3})$ betragen. Des Weiteren vernachlässigen wir in diesen Regionen das mittlere Feld $\rho_Z^{\text{TF}} * |\cdot|^{-1} * g_R^2(x/c)$.

3.4 Energie in der inneren Region

Die Energie in der innersten Region ist

$$\begin{aligned} & \sum_{\nu} (m_\nu, \chi_1 \left[T(-\Delta) - \frac{\gamma}{|x|} + c^{-2} \rho_Z^{\text{TF}} * \frac{1}{|\cdot|} * g_R^2 \left(\frac{x}{c} \right) - \frac{\lambda}{c^2} U_Z \left(\frac{x}{c} \right) - A \tilde{R}_i^{-2} \right] \chi_1 m_\nu) \\ & \geq \sum_{\nu} (m_\nu, \chi_1 \left[T(-\Delta) - \frac{\gamma}{|x|} - \frac{\lambda}{c^2} U_Z \left(\frac{x}{c} \right) - A \tilde{R}_i^{-2} \right] \chi_1 m_\nu). \end{aligned} \quad (3.5)$$

In dieser Region schätzen wir die kinetische Energie nach unten durch $|p| - 1$ ab. Um die Coulomb-Singularität zu kontrollieren, verwenden wir folgendes Resultat von Frank u. a. [64].

Behauptung 3.4.1 (Hardy–Lieb–Thirring-Ungleichung [64, Theorem 2.1]). *Es gibt ein $A > 0$, sodass für alle Funktionen V auf \mathbb{R}^3*

$$\text{Tr} \left(\sqrt{-\Delta} - \frac{2/\pi}{|x|} - V \right)_- \leq A \int_{\mathbb{R}^3} V(x)_+^4 dx$$

gilt.

Um dieses Resultat anwenden zu können, schätzen wir $\sqrt{p^2 + 1} - 1 \geq |p| - 1$ ab, verwenden $\chi_1(x)^2 \mathbf{1}_{\{|x| \leq 2\tilde{R}_i\}} = \chi_1(x)^2$, setzen

$$V(x) = \mathbf{1}_{\{|x| \leq 2\tilde{R}_i\}} \left[1 + \frac{\lambda}{c^2} U_Z \left(\frac{x}{c} \right) + A \tilde{R}_i^{-2} \right] \geq 0$$

und bemerken, dass wegen $V \in L^4(\mathbb{R}^3)$ und der Hardy–Lieb–Thirring-Ungleichung der Operator $(\sqrt{-\Delta} - \gamma/|x| - V)_-$ in der Spurklasse ist. Mit der Bessel-Ungleichung und $(m_\nu, m_\mu) = \delta_{\nu\mu}$ kann somit die rechte Seite von (3.5) nach unten durch

$$\begin{aligned} & \sum_{\nu=1}^N (m_\nu, \chi_1 \left[\sqrt{-\Delta} - \frac{\gamma}{|x|} - V(x) \right] \chi_1 m_\nu) \geq \sum_n \mu_n \sum_{\nu=1}^N |(\chi_1 m_\nu, f_n)|^2 \\ & \geq \sum_n \mu_n \|\chi_1 f_n\|_2^2 \geq -\text{Tr} \left(\sqrt{-\Delta} - \frac{2/\pi}{|x|} - V \right)_- \end{aligned}$$

abgeschätzt werden, wobei μ_n den n -ten negativen Eigenwert von $\sqrt{-\Delta} - \gamma/|x| - V(x)$ mit der zugehörigen, normierten Eigenfunktion f_n bezeichnet.

Wendet man die Hardy–Lieb–Thirring-Ungleichung an und skaliert $x \mapsto \gamma^{-1}Z^{2/3}x$, findet man, dass

$$\begin{aligned} \operatorname{Tr} \left(\sqrt{-\Delta} - \frac{2/\pi}{|x|} - V \right)_- &\leq A \int_{\mathbb{R}^3} V(x)^4 dx \\ &= \int_{|x| \leq 2\tilde{R}_i} \left(1 + \frac{\lambda Z^{4/3}}{c^2} U \left(\frac{Z^{1/3}}{c} x \right) + A\tilde{R}_i^{-2} \right)^4 dx \\ &= \frac{Z^2}{\gamma^3} \int_{|x| \leq \frac{2\gamma}{Z^{2/3}} \tilde{R}_i} \left(1 + \lambda\gamma^2 Z^{-2/3} U(x) + A\tilde{R}_i^{-2} \right)^4 dx. \end{aligned}$$

Da $U \in L^4(\mathbb{R}^3)$ und $\tilde{R}_i^2 \geq Z^{2\alpha}$ für ein $\alpha > 0$, kommt der größte Beitrag zum Fehler von der Ruheenergie des Elektrons, welcher durch

$$Z^2 \int_{|x| \leq \frac{2\gamma}{Z^{2/3}} \tilde{R}_i} 1^4 dx = A\tilde{R}_i^3$$

beschränkt ist. Da $\tilde{R}_i = o(Z^{1/9})$, ist dieser Beitrag von der Größenordnung $o(Z^{1/3})$ und daher akzeptabel.

3.5 Energie in der mittleren Region

In dieser Region zeigen wir, dass

$$\begin{aligned} \sum_{\nu} (m_{\nu}, \chi_2 \left[T(-\Delta) - \frac{\gamma}{|x|} + c^{-2} \rho_Z^{\text{TF}} * \frac{1}{|\cdot|} * g_R^2 \left(\frac{x}{c} \right) - \frac{\lambda}{c^2} U_Z \left(\frac{x}{c} \right) - A\tilde{R}_i^{-2} \chi_- \right] \chi_2 m_{\nu}) \\ \geq \sum_{\nu} (m_{\nu}, \chi_2 \left[T(-\Delta) - \frac{\gamma}{|x|} - \frac{\lambda}{c^2} U_Z \left(\frac{x}{c} \right) - A\tilde{R}_i^{-2} \chi_-(x) \right] \chi_2 m_{\nu}) \end{aligned}$$

mit $o(Z^{1/3})$ beiträgt. Um die potentielle Energie durch kinetische Energie zu kontrollieren, verwenden wir

Behauptung 3.5.1 (Daubechies [31]). *Sei $T(p) = T(|p|) = \sqrt{p^2 + 1} - 1$ mit Umkehrfunktion $T^{-1}(t) = \sqrt{t^2 + 2t}$, $F(s) := \int_0^s [T^{-1}(t)]^3 dt$ sowie $V \geq 0$. Dann gibt es eine Konstante $A > 0$, sodass*

$$\operatorname{Tr} \left(\sqrt{-\Delta + 1} - 1 - V(x) \right)_- \leq A \int F(V) dx.$$

Da $(1 + t/2)^{3/2} \leq A(1 + t^{3/2})$, kann man

$$F(s) = \int_0^s (t^2 + 2t)^{3/2} dt = \int_0^s (2t)^{3/2} \left(1 + \frac{t}{2} \right)^{3/2} dt \leq A(s^{5/2} + s^4) =: P(s)$$

abschätzen. Auf dem Gebiet

$$\text{supp } (\chi_- \chi_2) = \text{supp } \left(\chi_{B_0(2\tilde{R}_i)} \theta_1 \left(\frac{|x|}{\tilde{R}_a} \right) \theta_2 \left(\frac{|x|}{\tilde{R}_i} \right) \right)$$

verwenden wir $\tilde{R}_i^2 > \tilde{R}_i$ für hinreichend großes $Z > 1$ und erhalten

$$V(x) = \frac{\gamma}{|x|} + \frac{\lambda}{c^2} U_Z \left(\frac{x}{c} \right) \geq \frac{\gamma}{2\tilde{R}_i} \geq A\tilde{R}_i^{-2}.$$

Somit ist $-A\tilde{R}_i^{-2} \geq -V(x)$. Mit dem Variationsprinzip, der Daubechies- und der Bessel-Ungleichung sowie der Substitution $x \mapsto \gamma^{-1} Z^{2/3} x$, erhält man

$$\begin{aligned} & \sum_{\nu} \left(m_{\nu}, \chi_2 \left[T(-\Delta) - V(x) - A\tilde{R}_i^{-2} \chi_- \right] \chi_2 m_{\nu} \right) \\ & \geq \sum_{\nu} \left(m_{\nu}, \chi_2 [T(-\Delta) - 2V(x)] \chi_2 m_{\nu} \right) \\ & \geq -A \int_{\mathbb{R}^3} F \left(2\chi_2 \left(\frac{\gamma}{|x|} + \frac{\lambda Z^{4/3}}{c^2} U \left(\frac{Z^{1/3}}{c} x \right) \right) \right) dx \\ & \geq -A \frac{Z^2}{\gamma^3} \int_{\gamma Z^{-2/3} \tilde{R}_i \leq |x| \leq \gamma Z^{-2/3} \tilde{R}_a} P \left[\gamma^2 Z^{-2/3} \left(\frac{1}{|x|} + \lambda U(x) \right) \right] dx \\ & \geq -A(\tilde{R}_a^{1/2} + Z^{-5/12} \tilde{R}_a^{9/8} + \tilde{R}_i^{-1} + Z^{-2/3}) = o(Z^{1/3}). \end{aligned}$$

Da $|x|^{-5/2}$ am Ursprung integrierbar ist, wird dieser Beitrag zur Energie nur größer, wenn man von Null bis $\gamma Z^{-2/3} \tilde{R}_a$ integriert. Entsprechend haben wir den $|x|^{-4}$ -Term von $\gamma Z^{-2/3} \tilde{R}_i$ bis Unendlich integriert. Mit der Hölder-Ungleichung und $U \in L^{5/2} \cap L^4$ haben wir schließlich

$$Z^{2-\frac{5}{3}} \int_{\gamma Z^{-2/3} \tilde{R}_i \leq |x| \leq \gamma Z^{-2/3} \tilde{R}_a} U^{\frac{5}{2}} \leq Z^{\frac{1}{3}} \|U\|_4^{\frac{5}{2}} \left(\int_{|x| \leq \gamma Z^{-2/3} \tilde{R}_a} dx \right)^{\frac{3}{8}} = Z^{-\frac{5}{12}} \tilde{R}_a^{\frac{9}{8}} \|U\|_4^{\frac{5}{2}} \quad (3.6a)$$

und

$$Z^{2-8/3} \int_{\gamma Z^{-2/3} \tilde{R}_i \leq |x| \leq \gamma Z^{-2/3} \tilde{R}_a} U^4 \leq Z^{-2/3} \|U\|_4^4 \quad (3.6b)$$

abgeschätzt. Der größte Beitrag zur Energie in dieser Region kam also vom nicht-relativistischen $s^{5/2}$ -Term.

3.6 Die Thomas–Fermi-Region

In der äußersten Region betrachten wir den verbleibenden Ausdruck der Energie in der unskalierten Form, das heißt

$$\sum_{\nu} \left(m_{\nu}, \chi_3(c \cdot) \left[T_c(-\Delta) - \frac{Z}{|x|} + \rho_Z^{\text{TF}} * \frac{1}{|\cdot|} * g_R^2 - \lambda U_Z(x) \right] \chi_3(c \cdot) m_{\nu} \right) - D[\rho_Z^{\text{TF}}] - AZ^2, \quad (3.7)$$

wobei $T_c(-\Delta) = \sqrt{-c^2\Delta + c^4} - c^2$. Dieser Ausdruck wird, bis auf Fehler $o(Z^{7/3})$, die nicht-relativistische Thomas–Fermi-Energie ergeben. Die Strategie ist sehr ähnlich zu der von Lieb [115].

Wir erinnern daran, dass $g \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ sphärisch symmetrisch ist und $\text{supp } g \in B_0(1)$ sowie $\|g\|_2 = 1$ erfüllt. Weiterhin definierten wir die reskalierte Funktion $g_R(x) = R^{-3/2}g(x/R)$. Wir wählen nun $R = Z^{-s}$, wobei $1/3 < t < s < 2/3$ sein soll und erinnern daran, dass t durch $R_a = Z^{-t}$ definiert war.

Wir setzen $\tilde{d}p := (2\pi)^{-3}dp$ und $T_c(p) := \sqrt{c^2p^2 + c^4} - c^2$. Des Weiteren definieren wir

$$\tilde{\Phi}(x) := Z|x|^{-1} + \lambda U_Z(x) - \rho_Z^{\text{TF}} * |\cdot|^{-1}(x).$$

Definiert man die kohärenten Zustände $g_R^{pq}(x) = g_R(x - q)e^{ipx}$ und die Projektion $\Pi_{pq} = |g_R^{pq}\rangle\langle g_R^{pq}|$ auf diese Zustände, erhält man

$$(f, f) = \int (f, \Pi_{pq}f) \tilde{d}p dq, \quad (3.8a)$$

$$(f, \tilde{\Phi} * g_R^2 f) = \int \tilde{\Phi}(q)(f, \Pi_{pq}f) \tilde{d}p dq \quad \text{und} \quad (3.8b)$$

$$(f, [\sqrt{-c^2\Delta + c^4} - c^2]f) \geq \int T_c(p)(f, \Pi_{pq}f) \tilde{d}p dq - AR^{-2}. \quad (3.8c)$$

Die letzte Formel für die Lokalisierung der kinetischen Energie im Phasenraum wurde von Sørensen in [139, Lemma B.1] gezeigt. Für unsere Wahl von R ist der Lokalisierungsfehler nach Summation über alle Teilchen von der Größenordnung $o(Z^{7/3})$. Wir müssen nun den Fehler bestimmen, der entsteht, wenn man $Z/|x| + \lambda U_Z$ durch $(Z|\cdot|^{-1} + \lambda U_Z) * g_R^2$ in (3.7) ersetzt. Wir beginnen mit dem Beitrag des Coulomb-Potentials. Zum einen folgt aus dem Newtonschen Satz

$$\frac{1}{|x|} - \frac{1}{|\cdot|} * g_R^2 = \begin{cases} 0 & \text{für } x \notin \text{supp } g_R \\ \neq 0 & \text{für } x \in \text{supp } g_R \end{cases}. \quad (3.9)$$

Andererseits ist $R < R_a/4$ für hinreichend großes Z . Aus der Definition von $\chi_3(cx) = \theta_2(|x|/R_a)$ folgt, dass die Träger von $\chi_3(\cdot)$ und g_R für hinreichend großes Z disjunkt sein werden, das heißt $\chi_3(\cdot)\mathbf{1}_{\text{supp } g_R} = 0$ für hinreichend großes Z . Daraus folgt, dass bei der Ersetzung von $Z/|x|$ durch $Z|\cdot|^{-1} * g_R^2$ kein Fehler entsteht.

Der Fehlerterm $\sum_i (\chi_3(\cdot)m_i, [U_Z * g_R^2 - U_Z]\chi_3(\cdot)m_i)$ wird mit Hilfe etwas ($\varepsilon \in (0, 1)$) kinetischer Energie kontrolliert. Wir zeigen

Lemma 3.6.1. *Seien $g_{Z^{-s}}(x) := Z^{3s/2}g(Z^s x)$ mit $s > 1/3$ und $U_g := g_{Z^{-s}}^2 * U_Z$. Dann gilt für alle $\varepsilon > 0$*

$$\begin{aligned} & \sum_{\nu} (\chi_3(\cdot)m_{\nu}, [\varepsilon(\sqrt{-c^2\Delta + c^4} - c^2) - \lambda(U_Z - U_g)]\chi_3(\cdot)m_{\nu}) \\ & \geq -A_{\gamma}\varepsilon \left[\left(\frac{\lambda}{\varepsilon}\right)^{5/2} Z^{7/3} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_{5/2}^{5/2} + \left(\frac{\lambda}{\varepsilon}\right)^4 Z^{4/3} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_4^4 \right]. \end{aligned}$$

Beweis. Wegen der Skalierungsrelation von $g_{Z^{-s}}$ gilt

$$g_{Z^{-s}}(x) = Z^{\frac{3s}{2}}g_1(Z^s x) = Z^{\frac{1}{2}} \cdot Z^{\frac{3}{2}(s-\frac{1}{3})}g_1(Z^{s-\frac{1}{3}} \cdot Z^{\frac{1}{3}}x) = Z^{\frac{1}{2}}g_{Z^{-s+\frac{1}{3}}}(Z^{\frac{1}{3}}x).$$

Wir verwenden, wie in der mittleren Region, die Daubechies-Ungleichung. Wegen des Variationsprinzips können wir die Lokalisierung χ_3 auf die äußere Region wieder vernachlässigen. Wir fahren nun mit dem durch $x \mapsto x/c$ skalierten Operator fort und betrachten die mit c^2 multiplizierte Summe der negativen Eigenwerte von

$$\varepsilon \left[\sqrt{-\Delta + 1} - 1 - \frac{\lambda}{\varepsilon c^2} U_Z \left(\frac{x}{c} \right) + \frac{\lambda}{\varepsilon c^2} \int U_Z \left(\frac{x}{c} - y \right) g_{Z^{-s}}^2(y) dy \right]. \quad (3.10)$$

Um die Daubechies-Ungleichung anwenden zu können, brauchen wir nur die $\|\cdot\|_p$ -Normen von $\lambda(\varepsilon c^2)^{-1} \cdot (U_Z(x/c) - U_g(x/c))$ mit $p = 5/2, 4$ kontrollieren. Skaliert man $x \mapsto cx$, verwendet $\|g_{Z^{-s}}\|_2 = 1$ und die obige Skalierungsrelation von $g_{Z^{-s}}$ und skaliert abschließend $(x, y) \mapsto Z^{-1/3}(x, y)$, erhält man

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\lambda}{\varepsilon c^2} \right)^p c^3 \int dx \left| \int dy g_{Z^{-s}}^2(y) (U_Z(x) - U_Z(x - y)) \right|^p \\ &= \left(\frac{\lambda}{\varepsilon c^2} \right)^p c^3 Z^{(1+4/3)p} \int dx \left| \int dy g_{Z^{-s+1/3}}^2(Z^{1/3}y) (U(Z^{1/3}x) - U(Z^{1/3}(x - y))) \right|^p \\ &= \gamma^{-(3-2p)} (\lambda/\varepsilon)^p Z^{-\frac{2}{3}p+2} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_p^p, \end{aligned}$$

was die Behauptung zeigt. \square

Mit diesen Abschätzungen können wir die Phasenraumlokalisierung durchführen und erhalten somit für alle $\varepsilon \in (0, 1)$

$$\begin{aligned} & \sum_{\nu} (m_{\nu}, \chi_3(c \cdot)) \left[T_c(-\Delta) - \frac{Z}{|x|} - \lambda U_Z(x) + \rho * \frac{1}{|\cdot|} * g_R^2 \right] \chi_3(c \cdot) m_{\nu} \\ &= \sum_{\nu} (m_{\nu}, \chi_3(c \cdot)) \left[T_c(-\Delta) - \tilde{\Phi} * g_R^2 - \frac{Z}{|x|} + \frac{Z}{|\cdot|} * g_R^2 - \lambda U_Z + \lambda U_Z * g_R^2 \right] \chi_3(c \cdot) m_{\nu} \\ &= \sum_{\nu} (m_{\nu}, \chi_3(c \cdot)) \left[T_c(-\Delta) - \tilde{\Phi} * g_R^2 - \lambda U_Z + \lambda U_Z * g_R^2 \right] \chi_3(c \cdot) m_{\nu} \\ &\geq - \int [(1 - \varepsilon) T_c(p) - \tilde{\Phi}(q)] - \sum_i |(\chi_3(c \cdot) m_i, g_R^{pq})|^2 dp dq - o(Z^{7/3}) \\ &\quad - A_{\gamma} \varepsilon \left[\left(\frac{\lambda}{\varepsilon} \right)^{5/2} Z^{7/3} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_{5/2}^{5/2} + \left(\frac{\lambda}{\varepsilon} \right)^4 Z^{4/3} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_4^4 \right]. \end{aligned}$$

Zum Schluß werden wir ε so wählen, dass der durch $U_Z - U_g$ erzeugte Fehler ebenfalls $o(Z^{7/3})$ ist.

Wir befassen uns nun genauer mit dem ersten Summanden der rechten Seite letzten Kette von Ungleichungen. Für hinreichend großes Z ist $R/R_a < 1/4$. Für $|q| < R_a/4$ folgt daraus

$$|x| \leq |q| + |x - q| \leq \frac{R_a}{4} + R < \frac{R_a}{2} \quad \text{für } x \in \text{supp } g_R^{pq}.$$

Per Definition von $\chi_3(cx)$ ist daher $(m_i \chi_3(c \cdot), g_R^{pq}) = 0$ für $|q| < R_a/4$ und somit

$$\text{supp}_q |(\chi_3(c \cdot) m_i, g_R^{pq})| \subset \mathbb{R}^3 \setminus B_0(R_a/4)$$

für hinreichend großes Z . Verwendet man diese Beobachtung und die Bessel-Ungleichung, erhält man

$$\begin{aligned}
& (\psi, C_{Z,\lambda}\psi) \\
& \geq - \int_{|q| > \frac{R_a}{4}} [(1-\varepsilon)T_c(p) - \tilde{\Phi}(q)]_- \tilde{d}p dq - D[\rho_Z^{\text{TF}}] - o(Z^{7/3}) \\
& \quad - A_\gamma \varepsilon \left[\left(\frac{\lambda}{\varepsilon} \right)^{5/2} Z^{7/3} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_{5/2}^{5/2} + \left(\frac{\lambda}{\varepsilon} \right)^4 Z^{4/3} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_4^4 \right].
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Als Nächstes schätzen wir die Differenz zwischen der Thomas–Fermi-Energie und obigem Integral ab, sprich

$$\int_{|q| > \frac{R_a}{4}} \left((1-\varepsilon) \frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) - \lambda U_Z(q) \right)_- \tilde{d}p dq - \int_{|q| > \frac{R_a}{4}} [(1-\varepsilon)T_c(p) - \tilde{\Phi}(q)]_- \tilde{d}p dq.$$

Dies geschieht in zwei Schritten. Zunächst passen wir den Integrationsbereich von

$$- \int_{|q| > \frac{R_a}{4}} [(1-\varepsilon)T_c(p) - \tilde{\Phi}(q)]_- \tilde{d}p dq$$

an, das heißt wir schreiben

$$\begin{aligned}
& - \int_{|q| > \frac{R_a}{4}} [(1-\varepsilon)T_c(p) - \tilde{\Phi}(q)]_- \tilde{d}p dq \\
& = \int_{|q| > \frac{R_a}{4}; (1-\varepsilon)\frac{p^2}{2} \leq \tilde{\Phi}(q)} [(1-\varepsilon)T_c(p) - \tilde{\Phi}(q)] \tilde{d}p dq \\
& \quad + \int_{|q| > \frac{R_a}{4}; (1-\varepsilon)T_c(p) \leq \tilde{\Phi}(q) \leq (1-\varepsilon)\frac{p^2}{2}} [(1-\varepsilon)T_c(p) - \tilde{\Phi}(q)] \tilde{d}p dq.
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Der erste Term auf der rechten Seite hat bereits den richtigen Integrationsbereich. Für diesen muss nur noch der Fehler bestimmt werden, der entsteht, wenn man $T_c(p)$ durch $p^2/2$ im Integranden ersetzt. Der zweite Term ist ein Fehlerterm, von dem gezeigt werden muss, dass er von der Ordnung $o(Z^{7/3})$ ist. Analog zu den Rechnungen in [139, Seiten 14-16] schätzen wir diesen mit Hilfe des Skalierungsverhaltens $\tilde{\Phi}(x) = Z^{4/3}\tilde{\Phi}_1(Z^{1/3}x)$ durch

$$\begin{aligned}
& \int_{|q| > \frac{R_a}{4}; (1-\varepsilon)T_c(p) \leq \tilde{\Phi}(q) \leq (1-\varepsilon)\frac{p^2}{2}} [-(1-\varepsilon)T_c(p) + \tilde{\Phi}(q)] \tilde{d}p dq \\
& \leq \int_{|q| > \frac{R_a}{4}; (1-\varepsilon)T_c(p) \leq \tilde{\Phi}(q) \leq (1-\varepsilon)\frac{p^2}{2}} \tilde{\Phi}(q) \tilde{d}p dq \\
& = Z^{1/3} \int_{|q| > \frac{R_a}{4} Z^{1/3}; (1-\varepsilon)T_c(p) \leq Z^{4/3}\tilde{\Phi}_1(q) \leq (1-\varepsilon)\frac{p^2}{2}} \tilde{\Phi}_1(q) \tilde{d}p dq
\end{aligned}$$

ab. Auf dem Gebiet $\{(p, q) \in \mathbb{R}^6 : (1 - \varepsilon)T_c(p) = (1 - \varepsilon)(\sqrt{c^2 p^2 + c^4} - c^2) \leq Z^{4/3} \tilde{\Phi}_1(q)\}$ ist für $\varepsilon < 1/2$

$$(1 - \varepsilon)p^2 \leq 2Z^{4/3} \tilde{\Phi}_1(q) + 2\gamma^2 Z^{2/3} \tilde{\Phi}_1(q)^2$$

und die Integrationsgrenzen implizieren daher insbesondere mit $\varepsilon < 1/2$ die Ungleichungen

$$2Z^{4/3} \tilde{\Phi}_1(q) \leq (1 - \varepsilon)p^2 \leq 2Z^{4/3} \tilde{\Phi}_1(q) \left[1 + \gamma^2 Z^{-2/3} \tilde{\Phi}_1(q)\right].$$

Mit $X := 2Z^{4/3} \tilde{\Phi}_1(q)$, $Y := \gamma^2 Z^{-2/3} \tilde{\Phi}_1(q)$, $V := (1 - \varepsilon)p^2$ und $W := R_a Z^{1/3}/4$ schätzt man den zweiten Term auf der rechten Seite von (3.12) nach unten durch

$$\begin{aligned} & - \frac{(4\pi)^2}{(2\pi)^3} Z^{1/3} \int_{|q| \geq W} dq \tilde{\Phi}_1(q) \int_X^{X(1+Y)} \frac{V^{1/2}}{2(1 - \varepsilon)^{3/2}} dV \\ & = - \frac{(4\pi)^2}{(2\pi)^3} \frac{Z^{1/3}}{(1 - \varepsilon)^{3/2}} \int_{|q| \geq W} dq \tilde{\Phi}_1(q) \frac{X^{3/2}}{3} [(1 + Y)^{3/2} - 1] \\ & \geq -AZ^{1/3} \int_{|q| \geq W} dq \tilde{\Phi}_1(q) X^{3/2} [Y + Y^{3/2}] \\ & \geq -AZ^{7/3} \int_{|q| \geq W} dq \tilde{\Phi}_1(q)^{5/2} [Z^{-2/3} \tilde{\Phi}_1(q) + Z^{-1} \tilde{\Phi}_1(q)^{3/2}] \end{aligned}$$

ab. Es verbleibt, die Terme

$$Z^{5/3} \int_{|q| \geq R_a Z^{1/3}} \tilde{\Phi}_1(q)^{7/2} dq \leq Z^{5/3} \int_{|q| \geq R_a Z^{1/3}} \left(\frac{1}{|q|} + \lambda U(q)\right)^{7/2} dq \quad (3.13a)$$

und

$$Z^{4/3} \int_{|q| \geq R_a Z^{1/3}} \tilde{\Phi}_1(q)^4 dq \leq Z^{4/3} \int_{|q| \geq R_a Z^{1/3}} \left(\frac{1}{|q|} + \lambda U(q)\right)^4 dq \quad (3.13b)$$

zu kontrollieren. Da $U \in L^{5/2} \cap L^4$ ist, ist auch $U \in L^{7/2}$. Daraus folgt, dass der durch U erzeugte Fehler von der Ordnung $Z^{5/3}$ beziehungsweise $Z^{4/3}$ ist. Der Fehler, der durch das Coulomb-Potential erzeugt wird, beläuft sich auf

$$Z^{5/3} \int_{R_a Z^{1/3}}^{\infty} q^{2-7/2} dq = AZ^{5/3-1/6} R_a^{-1/2} = o(Z^{11/6}) \quad (3.14a)$$

beziehungsweise

$$Z^{4/3} \int_{R_a Z^{1/3}}^{\infty} q^{2-4} dq = AZ^{4/3-1/3} R_a^{-1} = o(Z^{5/3}). \quad (3.14b)$$

Somit ist

$$\begin{aligned} & - \int_{|q| > \frac{R_a}{4}} [(1 - \varepsilon)T_c(p) - \tilde{\Phi}(q)]_- \tilde{d}p \, dq \\ & \geq \int_{|q| > \frac{R_a}{4}; (1-\varepsilon)\frac{p^2}{2} \leq \tilde{\Phi}(q)} [(1 - \varepsilon)T_c(p) - \tilde{\Phi}(q)] \tilde{d}p \, dq - o(Z^{7/3}) \end{aligned}$$

und es verbleibt lediglich, den Integranden in der zweiten Zeile von (3.12) zu modifizieren. Mit $T_c(p) \geq p^2/2 - p^4/(8c^2)$ erhalt man

$$\begin{aligned} & \int_{|q| > \frac{R_a}{4}; (1-\varepsilon)\frac{p^2}{2} \leq \tilde{\Phi}(q)} [(1 - \varepsilon)T_c(p) - \tilde{\Phi}(q)] \tilde{d}p \, dq \\ & \geq \int_{|q| > \frac{R_a}{4}; (1-\varepsilon)\frac{p^2}{2} \leq \tilde{\Phi}(q)} \left[(1 - \varepsilon)\frac{p^2}{2} - \tilde{\Phi}(q) \right] \tilde{d}p \, dq - \frac{1 - \varepsilon}{8c^2} \int_{|q| > \frac{R_a}{4}; (1-\varepsilon)\frac{p^2}{2} \leq \tilde{\Phi}(q)} p^4 \tilde{d}p \, dq. \end{aligned}$$

Als Nachstes bemerkt man, dass auf dem Integrationsbereich des p -Integrals

$$|p| \leq \sqrt{\frac{\frac{2Z}{|q|} + 2\lambda U_Z(q)}{1 - \varepsilon}}$$

ist. Damit ist der p^4 -Fehler mit $0 < \varepsilon < 1/2$ unter Vergrößerung des Integrationsbereichs von $(1 - \varepsilon)p^2/2 \leq \tilde{\Phi}(q)$ zu $p^2/4 \leq Z/|q| + \lambda U_Z(q)$ durch

$$\begin{aligned} Z^{-2} \int_{|q| > R_a; \frac{p^2}{4} \leq Z/|q| + \lambda U_Z(q)} p^4 \tilde{d}p \, dq & \leq AZ^{-2} \int_{|q| > R_a} \left(\frac{Z}{|q|} + \lambda Z^{4/3} U(Z^{1/3}q) \right)^{7/2} dq \\ & = AZ^{5/3} \int_{|q| > R_a Z^{1/3}} \left(\frac{1}{|q|} + \lambda U(q) \right)^{7/2} dq \end{aligned}$$

kontrollierbar. Die rechte Seite ist aber von der gleichen Form wie (3.13a), das heißt auch dieser Fehler ist von der Ordnung $o(Z^{11/6})$.

Schließlich erhalten wir also

$$\begin{aligned} & \int_{|q| > \frac{R_a}{4}; (1-\varepsilon)\frac{p^2}{2} \leq \tilde{\Phi}(q)} \left[(1 - \varepsilon)\frac{p^2}{2} - \tilde{\Phi}(q) \right] \tilde{d}p \, dq \geq - \int \left[(1 - \varepsilon)\frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) - \lambda U_Z(q) \right]_- \tilde{d}p \, dq \\ & = - \int \left[\frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) - \lambda U_Z(q) \right]_- \tilde{d}p \, dq \\ & \quad - \left((1 - \varepsilon)^{-3/2} - 1 \right) \int \left[\frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) - \lambda U_Z(q) \right]_- \tilde{d}p \, dq \end{aligned}$$

und der verbleibende, von ε abhängige, Fehler beläuft sich auf

$$A_\gamma \varepsilon \left[\left(\frac{\lambda}{\varepsilon} \right)^{5/2} Z^{7/3} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_{5/2}^{5/2} + \left(\frac{\lambda}{\varepsilon} \right)^4 Z^{4/3} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_4^4 \right] \\ + \left((1 - \varepsilon)^{-3/2} - 1 \right) \int \left[\frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) - \lambda U_Z(q) \right]_- \hat{d}p \, dq. \quad (3.15)$$

Da $g_{Z^{-s+1/3}}^2$ wegen $s > 1/3$ ein glättender Kern ist, ist (3.15) mit der Wahl

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \max \left\{ \frac{\|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_{5/2}}{1 + \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_{5/2}}, Z^{-1/3+\delta} \right\} = o(Z^0), \quad \delta \in (0, 1/3) \quad (3.16)$$

nach oben durch eine Konstante mal

$$\lambda^{5/2} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_{5/2} Z^{7/3} + \lambda^4 Z^{7/3-3\delta} + \left(\frac{\|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_{5/2}}{2(1 + \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_{5/2})} + \frac{Z^{-1/3+\delta}}{2} \right) Z^{7/3}$$

beschränkt. Hierbei haben wir die Skalierungseigenschaft von $\Phi_Z^{\text{TF}}(q) + \lambda U_Z(q)$ sowie $(1 - \varepsilon)^{-3/2} - 1 \leq A\varepsilon$ für hinreichend großes Z verwendet. Daraus folgt, dass der letzte Ausdruck ebenfalls von der Ordnung $o(Z^{7/3})$ ist.

Somit ist schließlich

$$(\psi, C_{Z,\lambda} \psi) \geq - \int \left[\frac{p^2}{2} - \left(\frac{Z}{|q|} - \rho_Z^{\text{TF}} * \frac{1}{|\cdot|} + \lambda U_Z(q) \right) \right]_- \hat{d}p \, dq - D[\rho_Z^{\text{TF}}] - o(Z^{7/3}),$$

was Behauptung 3.2.2 zeigt.

3.7 Zusammenführung und Beweis von Satz 3.2.1

Der Beweis beruht auf den Ideen von Conta und Sidentop [25].

Lemma 3.7.1. *Sei $0 \leq U \in L^{5/2}(\mathbb{R}^3)$. Dann gilt*

$$\lim_{\lambda \searrow 0} \frac{-1}{\lambda Z^{7/3}} \int_{\substack{\frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) - \lambda U_Z(q) \leq 0 \\ \frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) \geq 0}} \left(\frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) - \lambda U_Z(q) \right) \hat{d}p \, dq = 0.$$

Beweis. Aus dem Skalierungsverhalten von $\Phi_Z^{\text{TF}} + \lambda U_Z$ folgt

$$\frac{-1}{\lambda Z^{7/3}} \int_{\substack{\frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) - \lambda U_Z(q) \leq 0 \\ \frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) \geq 0}} \left(\frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) - \lambda U_Z(q) \right) \hat{d}p \, dq \\ \leq \frac{1}{Z^{7/3}} \int_{\substack{\frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) - \lambda U_Z(q) \leq 0 \\ \frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) \geq 0}} U_Z(q) \hat{d}p \, dq = \int_{\substack{\frac{p^2}{2} - \Phi_1^{\text{TF}}(q) - \lambda U(q) \leq 0 \\ \frac{p^2}{2} - \Phi_1^{\text{TF}}(q) \geq 0}} U(q) \hat{d}p \, dq \\ = A \int dq U(q) [(\Phi_1^{\text{TF}}(q) + \lambda U(q))^{3/2} - \Phi_1^{\text{TF}}(q)^{3/2}].$$

Das letzte Integral konvergiert majorisiert für $\lambda \rightarrow 0$ gegen Null. Eine gleichmäßig in λ integrierbare Majorante (ohne Beschränkung können wir $|\lambda| < 1$ annehmen) ist $U(q)(\Phi_1^{\text{TF}}(q) + \lambda U(q))^{3/2}$, da sowohl U , als auch Φ_1^{TF} in $L^{5/2}(\mathbb{R}^3)$ sind. Die Integrierbarkeit ist aus der Hölder-Ungleichung ersichtlich. \square

Beweis von Satz 3.2.1. Sei ohne Beschränkung der Allgemeinheit $U \geq 0$. Ansonsten zerlegt man U in seinen positiven und negativen Anteil und zeigt den Satz für U_+ und U_- separat. Wegen

$$\sqrt{c^2 p^2 + c^4} - c^2 = c^2 \left(\sqrt{1 + (p/c)^2} - 1 \right) \leq \frac{p^2}{2}$$

und dem Ergebnis von Lieb und Simon zur führenden Ordnung der Grundzustandsenergie des nicht-relativistischen Problems [118, Theorem I.1] folgt, dass die Thomas–Fermi-Energie zu führender Ordnung in Z automatisch eine obere Schranke an die Grundzustandsenergie von C_Z ist. Wir erinnern, dass d^C die Grundzustandsdichtematrix mit dazugehöriger Einteilchendichte ρ_Z von C_Z war. Mit dieser Beobachtung und Behauptung 3.2.2 erhält man

$$\begin{aligned} \lambda \int \hat{\rho}_Z(x) U(x) dx &= \frac{\lambda}{Z^{7/3}} \int \rho_Z(x) U_Z(x) dx = \frac{1}{Z^{7/3}} \text{Tr} (d^C [C_Z - C_{Z,\lambda}]) \\ &\leq \frac{1}{Z^{7/3}} \left[\int_{\frac{p^2}{2} \leq \Phi_Z^{\text{TF}}(q)} \left(\frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) \right) \tilde{d}p dq - D[\rho_Z^{\text{TF}}] + o(Z^{7/3}) \right. \\ &\quad \left. - \int_{\frac{p^2}{2} \leq \Phi_Z^{\text{TF}}(q) + \lambda U_Z(q)} \left(\frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) - \lambda U_Z(q) \right) \tilde{d}p dq + D[\rho_Z^{\text{TF}}] + o(Z^{7/3}) \right] \\ &= \frac{1}{Z^{7/3}} \left[\int_{\frac{p^2}{2} \leq \Phi_Z^{\text{TF}}(q)} \lambda U_Z(q) \tilde{d}p dq \right. \\ &\quad \left. - \int_{\substack{\frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) - \lambda U_Z(q) \leq 0 \\ \frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) \geq 0}} \left(\frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) - \lambda U_Z(q) \right) \tilde{d}p dq + o(Z^{7/3}) \right] \\ &= \lambda \int \rho_1^{\text{TF}}(x) U(x) dx + o(\lambda) + o(Z^0). \end{aligned}$$

Teilt man beide Seiten durch λ (für $\lambda < 0$ dreht sich die Ungleichung um) und lässt zuerst $Z \rightarrow \infty$ gehen, erhält man

$$\begin{aligned} \limsup_{Z \rightarrow \infty} \int \hat{\rho}_Z(x) U(x) dx &\leq \int \rho_1^{\text{TF}}(x) U(x) dx + \frac{1}{\lambda} o(\lambda) \text{ für } \lambda \geq 0, \text{ bzw.} \\ \liminf_{Z \rightarrow \infty} \int \hat{\rho}_Z(x) U(x) dx &\geq \int \rho_1^{\text{TF}}(x) U(x) dx - \frac{1}{\lambda} o(\lambda) \text{ für } \lambda \leq 0. \end{aligned}$$

Die Behauptung folgt mit Lemma 3.7.1, wenn man den Grenzwert $\lambda \rightarrow 0$ ausführt. \square

Kapitel 4

Konvergenz der semiklassischen Dichte im Brown–Ravenhall-Modell

4.1 Einführung

In diesem Kapitel geben wir einen alternativen Beweis der schwachen Konvergenz der auf der Thomas–Fermi–Längenskala reskalierten Einteilchendichte eines Grundzustands des Brown–Ravenhall-Operators. Wie im letzten Kapitel verwenden wir das Argument der linearen Antwort sowie die Kenntnis über den führenden Term der asymptotischen Entwicklung der Grundzustandsenergie des adäquat gestörten Brown–Ravenhall-Operators. Die Herleitung dieses Terms gestaltet sich in diesem Fall jedoch deutlich schwieriger, wenn die Kopplungskonstante zwischen der kritischen Chandrasekhar- und der kritischen Brown–Ravenhall-Konstanten liegt, da man Kommutatoren der Lokalisierungsfunktionen mit gewissen unitären Transformationen des Brown–Ravenhall-Operators, den sogenannten \mathcal{T} -Transformationen, kontrollieren muss. Aus diesem Grund erhalten wir zwar dasselbe Konvergenzresultat für $\gamma \leq 2/\pi$ wie für den Chandrasekhar-Operator, aber ein schwächeres, wenn $2/\pi < \gamma < 2/(\pi/2 + 2/\pi)$ ist. Darüberhinaus gilt dieses nur für subkritische Kopplungskonstanten.

Das Kapitel ist wie folgt gegliedert. Im nächsten Abschnitt stellen wir das Modell vor und geben eine unitär äquivalente Darstellung des Brown–Ravenhall-Operators. Im Anschluß formulieren wir unser Hauptresultat und illustrieren den Beweis. Im anschließenden Abschnitt zeigen wir, wie das Ergebnis für $\gamma \leq 2/\pi$ sofort aus dem für den Chandrasekhar-Operator folgt und diskutieren zwei Möglichkeiten, wie man für $\gamma > 2/\pi$ verfahren könnte.

Als Nächstes untersuchen wir die \mathcal{T} -Transformationen und geben punktweise Abschätzungen an ihre Integral-Kerne an. Wir zeigen dann, wie die Kommutatoren dieser Transformationen mit den Lokalisierungsfunktionen des letzten Kapitels abgeschätzt werden können.

Mit diesen Abschätzungen werden wir in der Lage sein, dem Beweis Sørensens zu folgen, um die Energie in den drei Regionen zu untersuchen. Wir zeigen wieder, dass die innere und mittlere Region nur mit $o(Z^{7/3})$ beitragen und die äußere Region bis auf Fehler $o(Z^{7/3})$ die Thomas–Fermi-Energie liefert. Der Beweis des Hauptresultats folgt dann wie im letzten Kapitel mit dem Argument der linearen Antwort.

4.2 Überblick über das Modell, Definitionen und Resultat

Der Einteilchen-Dirac-Operator eines Elektrons im Feld einer Punktladung Z ist im Brown–Ravenhall-Modell durch die Friedrichs-Erweiterung der auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$ definierten quadratischen Form

$$(\psi, D_Z \psi) := \left(\psi, \left[-ic\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + c^2\beta - \frac{Z}{|x|} \right] \psi \right)$$

im Hilbert-Raum

$$\mathfrak{H} = (\mathbf{1}_{(0,\infty)}(-ic\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + c^2\beta)) (L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4))$$

gegeben. Die Form ist genau dann nach unten beschränkt, wenn $\gamma := Z/c \leq \gamma_B = 2/(2/\pi + \pi/2)$, siehe [48].

Durch eine unitäre Transformation kann der Operator in \mathfrak{H} als selbstadjungierter Operator in $L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^2)$ dargestellt werden. Dazu parametrisiert man die erlaubten Zustände wie folgt. Ist $\psi \in \mathfrak{H}$ ein Dirac-Spinor, so kann ψ mittels

$$\psi = \begin{pmatrix} \Phi_0(\mathbf{p}/c)u \\ \Phi_1(\mathbf{p}/c)u \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

durch einen Pauli-Spinor $u \in L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^2)$ dargestellt werden, wobei

$$\Phi_0(\mathbf{p}) := \phi_0(|\mathbf{p}|), \quad \Phi_1(\mathbf{p}) := \phi_1(|\mathbf{p}|) \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} =: \phi_1(|\mathbf{p}|)h(\mathbf{p}), \quad \mathbf{p} \in \mathbb{R}^3 \quad (4.2)$$

mit

$$\phi_j(\mathbf{p}) := \sqrt{\frac{E_1(\mathbf{p}) + (-1)^j}{2E_1(\mathbf{p})}}, \quad j \in \{0, 1\}$$

und $E_c(\mathbf{p}) := \sqrt{c^2\mathbf{p}^2 + c^4}$ sind. Des Weiteren sind $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ die drei Pauli-Matrizen sowie $h(\mathbf{p}) := \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$ der Helizitätsoperator. Schließlich ist \mathbf{p} , abhängig vom Kontext, entweder der Differentialoperator $-i\nabla$, oder der Fourier-Multiplikator $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3$. Nach Evans u. a. [48] ist

$$\begin{aligned} \Phi_c : L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^2) &\rightarrow \mathfrak{H} \\ u &\mapsto \begin{pmatrix} \Phi_0(\mathbf{p}/c)u \\ \Phi_1(\mathbf{p}/c)u \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.3)$$

eine unitäre Abbildung. Insbesondere ist auch die Einschränkung von Φ_c auf $H^1(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^2)$ eine unitäre Abbildung in $H^1(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4) \cap \mathfrak{H}$.

Der Brown–Ravenhall-Operator für ein Elektron im externen Potential $-Z/|x|$, der auf Pauli-Spinoren wirkt, ist mit dem *verdrehten Potential*

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_c \left(\frac{Z}{|\cdot|} \right) &:= \begin{pmatrix} \Phi_0(\mathbf{p}/c) \\ \Phi_1(\mathbf{p}/c) \end{pmatrix} \left(\frac{Z}{|\cdot|} \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4} \right) \begin{pmatrix} \Phi_0(\mathbf{p}/c) \\ \Phi_1(\mathbf{p}/c) \end{pmatrix} \\ &= \Phi_0 \left(\frac{\mathbf{p}}{c} \right) \left(\frac{Z}{|\cdot|} \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2} \right) \Phi_0 \left(\frac{\mathbf{p}}{c} \right) + \Phi_1 \left(\frac{\mathbf{p}}{c} \right) \left(\frac{Z}{|\cdot|} \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2} \right) \Phi_1 \left(\frac{\mathbf{p}}{c} \right) \end{aligned}$$

durch

$$E_c(p) - c^2 - \mathcal{T}_c \left(\frac{Z}{|x|} \right) \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^2)$$

gegeben. Sofern es aus dem Kontext ersichtlich ist, schreiben wir von nun an p statt \mathbf{p} .

Der Erwartungswert der Energie in einem Vielteilchen-Zustand ψ des Brown–Ravenhall-Operators mit Coulomb-Potential eines Kerns der Ladung Z , der mit $N = Z$ Elektronen wechselwirkt ist unter Berücksichtigung der Coulomb-Selbstwechselwirkung zwischen den Elektronen durch

$$\mathcal{E}[\psi] := \left(\psi, \left[\sum_{\nu=1}^N (D_Z - c^2)_\nu + \sum_{1 \leq \nu < \mu \leq N} \frac{1}{|x_\nu - x_\mu|} \right] \psi \right) \quad (4.4)$$

auf dem Formbereich $\mathcal{Q}_N := \mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N} : \mathbb{C}^{4^N}) \cap \bigwedge_{\nu=1}^N \mathfrak{H}$ gegeben. Mit (4.3) kann (4.4) auch durch Pauli-Spinoren ausgedrückt werden, nämlich

$$\left(\bigotimes_{\nu=1}^N \Phi_c^* \right) \circ \mathcal{E} \circ \left(\bigotimes_{\nu=1}^N \Phi_c \right) : \bigwedge_{\nu=1}^N L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^2) \rightarrow \mathbb{R}. \quad (4.5)$$

Da die quadratische Form des Vielteilchen-Problems für $\gamma \leq \gamma_B$ ebenfalls nach unten beschränkt ist, kann man nach Friedrichs einen Vielteilchen-Operator definieren, dessen Grundzustandsenergie

$$E(Z) := \inf \{ \mathcal{E}[\psi] : \psi \in \mathcal{Q}_N, \|\psi\| = 1 \}$$

und Grundzustandsdichte Gegenstände dieses Kapitels sein sollen. Es ist bekannt, dass $E(Z)$ ein Eigenwert ist (Morozov und Vugalter [133]). Dieser kann entartet sein und wir bezeichnen mit ψ_1, \dots, ψ_M eine Basis des entsprechenden Eigenraums. Die zugehörige Grundzustandsdichtematrix ist durch

$$d^B = \sum_{\mu=1}^M w_\mu |\psi_\mu\rangle \langle \psi_\mu|$$

gegeben, wobei $w_\mu \geq 0$ Gewichte sind, die die Normierungsbedingung $\sum_{\mu=1}^M w_\mu = 1$ erfüllen. Im Folgenden untersuchen wir die zugehörige Einteilchen-Grundzustandsdichte

$$\rho^B(x) := N \sum_{\mu=1}^M w_\mu \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N=1}^4 \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} |\psi_\mu(x, \sigma_1; x_2, \sigma_2; \dots; x_N, \sigma_N)|^2 dx_2 \dots dx_N \quad \text{für } x \in \mathbb{R}^3$$

sowie die auf der Thomas–Fermi-Längenskala reskalierte Dichte $\hat{\rho}^B(x) := Z^{-2} \rho^B(Z^{-1/3}x)$.

Wir formulieren nun unser Hauptresultat.

Satz 4.2.1. *Seien $\gamma \in (0, 2/\pi]$ und $U \in L^{5/2} \cap L^4(\mathbb{R}^3)$. Dann konvergiert für $Z, c \rightarrow \infty$ mit fixiertem $Z/c = \gamma$,*

$$\lim_{Z \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^3} \hat{\rho}^B(x) U(x) dx = \int_{\mathbb{R}^3} \rho_1^{\text{TF}}(x) U(x) dx.$$

Ist $\gamma \in (2/\pi, \gamma_B)$, so gilt das gleiche Resultat unter der zusätzlichen Voraussetzung, dass $U \in |\cdot|^{-1} L^\infty(\mathbb{R}^3)$ und U Lipschitz-stetig ist.

Wir betonen, dass hier ρ_Z^{TF} die Thomas–Fermi-Dichte mit der Thomas–Fermi-Konstanten $\gamma_{\text{TF}} := (6\pi^2/q)^{2/3}$ ist, wobei $q = 2$ gesetzt wird. Für den Beweis von Satz 4.2.1 werden wir

wie im letzten Kapitel das Argument der linearen Antwort verwenden. Dazu definieren wir $U_Z(x) = Z^{4/3}U(Z^{1/3}x)$ mit U aus Satz 4.2.1 sowie für $\lambda \in \mathbb{R}$,

$$\mathcal{E}_\lambda[\psi] := \left(\psi, \left[\sum_{\nu=1}^N (-ic\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + c^2\beta - c^2 - \frac{Z}{|x|} - \lambda U_Z)_\nu + \sum_{1 \leq \nu < \mu \leq N} \frac{1}{|x_\nu - x_\mu|} \right] \psi \right)$$

auf \mathcal{Q}_N . Unser Ziel ist es, zu zeigen, dass das Infimum von \mathcal{E}_λ zu führender Ordnung in Z durch die entsprechende Thomas–Fermi-Energie gegeben ist. Dazu beweisen wir die folgende

Behauptung 4.2.2. *Seien $\gamma \in (0, 2/\pi]$, $\lambda > 0$, $0 \leq U \in L^{5/2} \cap L^4(\mathbb{R}^3)$, $U_Z(x) = Z^{4/3}U(Z^{1/3}x)$ und*

$$E_\lambda(Z) := \inf_{\psi \in \mathcal{Q}_N} \mathcal{E}_\lambda[\psi].$$

Dann ist

$$E_\lambda(Z) \geq - \int \left(\frac{p^2}{2} - \Phi_Z^{\text{TF}}(q) - \lambda U_Z(q) \right) \bar{d}p \, dq - D[\rho_Z^{\text{TF}}] - o(Z^{7/3}).$$

Ist $\gamma \in (2/\pi, \gamma_B)$, so gilt das gleiche Resultat unter der zusätzlichen Voraussetzung, dass $U \in |\cdot|^{-1}L^\infty(\mathbb{R}^3)$ und U Lipschitz-stetig ist.

Mit dieser Ungleichung erfolgt der Beweis von Satz 4.2.1 dann wie in Abschnitt 3.7.

4.3 Beweis von Behauptung 4.2.2 für $\gamma \leq 2/\pi$

Für $\gamma \leq 2/\pi$ folgen wir dem Beweis von Cassanas und Siedentop [19] und beginnen damit die Selbstwechselwirkung der Elektronen durch eine Korrelationsungleichung zu kontrollieren. Ist $0 \leq \sigma \in L^1(\mathbb{R}^3)$, dann definiert man $R_\sigma(x)$ durch die Gleichheit

$$\int_{|x-y| \leq R_\sigma(x)} \sigma(y) \, dy = \frac{1}{2}.$$

Das zu σ gehörende Lochpotential ist durch

$$L_\sigma(x) := \int_{|x-y| < R_\sigma(x)} \frac{\sigma(y)}{|x-y|} \, dy$$

definiert. Für $\mathcal{R} = Z^{-s}$ mit $s \in (1/3, 2/3)$ definieren wir $g_\mathcal{R}(x) = \mathcal{R}^{-3/2}g(x/\mathcal{R})$, wobei $0 \leq g \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ sphärisch symmetrisch, $\|g\|_2 = 1$ und $\text{supp } g \subseteq B_0(1)$ erfüllt. Weiter sei $\rho_\mathcal{R} := \rho_Z^{\text{TF}} * g_\mathcal{R}^2$. Mit der Korrelationsungleichung von Mancas u. a. [123] schätzen wir zunächst die Selbstwechselwirkung durch

$$\sum_{1 \leq \nu < \mu \leq N} \frac{1}{|x_\nu - x_\mu|} \geq \sum_{\nu=1}^N \left[\rho_\mathcal{R} * \frac{1}{|\cdot|}(x_\nu) - L_{\rho_\mathcal{R}}(x_\nu) \right] - D[\rho_\mathcal{R}]$$

ab. Wegen der sphärischen Symmetrie von g^2 können wir den Newtonschen Satz verwenden und $\rho_\mathcal{R}$ durch ρ_Z^{TF} in $D[\rho_\mathcal{R}]$ ersetzen, um die rechte Seite weiter nach unten abzuschätzen.

Mit der Schranke $\|L_{\rho_{\mathcal{R}}}\|_{\infty} \leq A_g Z$ aus [19, Lemma 5] haben wir für alle normierten $\psi \in H^{1/2}(\mathbb{R}^{3N} : \mathbb{C}^{4N}) \cap \bigwedge_{\nu=1}^N \mathfrak{H}$ das N -Teilchen-Problem auf das Einteilchen-Problem

$$\mathcal{E}_{\lambda}[\psi] \geq -\text{Tr} [\Lambda_+(|D_0| - c^2 - V_{\mathcal{R},\lambda})\Lambda_+]_{-} - A_g Z^2 - D[\rho_Z^{\text{TF}}] \quad (4.6)$$

reduziert, wobei $\Lambda_+ := \mathbf{1}_{(0,\infty)}(D_0)$ und $V_{\mathcal{R},\lambda} := Z|\cdot|^{-1} - \rho_{\mathcal{R}} * \frac{1}{|\cdot|} + \lambda U_Z$. Zwar haben die Pauli-Spinoren vier Komponenten – jeweils Spin ± 1 für Elektronen und Positronen – doch haben wir es hier wegen der Projektion auf den positiven Spektralbereich des freien Operators nur mit zwei Spinzuständen zu tun. Schreibt man die Spektralprojektionen mit Hilfe der Gradierung $D_0/|D_0|$

$$\Lambda_{\pm} := \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{D_0}{|D_0|} \right),$$

so kann man diese durch eine unitäre Transformation

$$U := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

ineinander überführen, da

$$U^{-1}D_0U = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c^2 & c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -c^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -c^2 & -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & c^2 \end{pmatrix} = -D_0.$$

Entsprechend erhält man auch $UD_0U^{-1} = -D_0$, weshalb $\Lambda_- = U^{-1}\Lambda_+U$. Definiert man $X := (|D_0| - c^2 - V_{\mathcal{R},\lambda}) \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2}$, erhält man mit dem Variationsprinzip und der Zyklizität der Spur

$$-\text{Tr} \left[\Lambda_+ \begin{pmatrix} X & 0 \\ 0 & X \end{pmatrix} \Lambda_+ \right]_{-} \geq -\text{Tr} \left[\Lambda_+ \begin{pmatrix} X_- & 0 \\ 0 & X_- \end{pmatrix} \Lambda_+ \right] = -\text{Tr} \left[\Lambda_+ \begin{pmatrix} X_- & 0 \\ 0 & X_- \end{pmatrix} \right].$$

Weiter gilt mit der Darstellung von Λ_- durch U und Λ_+ , der Unitarität von U und der Zyklizität der Spur

$$\text{Tr} \left[\Lambda_- \begin{pmatrix} X_- & 0 \\ 0 & X_- \end{pmatrix} \right] = \text{Tr} \left[\Lambda_+ U \begin{pmatrix} X_- & 0 \\ 0 & X_- \end{pmatrix} U^{-1} \right] = \text{Tr} \left[\Lambda_+ \begin{pmatrix} X_- & 0 \\ 0 & X_- \end{pmatrix} \right].$$

Wegen $\Lambda_+ + \Lambda_- = \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}$ haben wir schließlich

$$\begin{aligned} 2\text{Tr} \left[\Lambda_+ \begin{pmatrix} X_- & 0 \\ 0 & X_- \end{pmatrix} \right] &= \text{Tr} \left[\Lambda_+ \begin{pmatrix} X_- & 0 \\ 0 & X_- \end{pmatrix} \right] + \text{Tr} \left[\Lambda_- \begin{pmatrix} X_- & 0 \\ 0 & X_- \end{pmatrix} \right] \\ &= \text{Tr} \left(\begin{pmatrix} X_- & 0 \\ 0 & X_- \end{pmatrix} \right). \end{aligned}$$

Da $|D_0(p)| = E_c(p)$ ist, erhält man

$$E_{\lambda}(Z) \geq -\text{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3;\mathbb{C}^2)} [E_c(p) - c^2 - V_{\mathcal{R},\lambda}]_{-} - D[\rho_Z^{\text{TF}}] - A_g Z^2.$$

Die Behauptung folgt durch Anwenden von Behauptung 3.2.2 des letzten Kapitels für Kopplungen $\gamma \leq 2/\pi$. Streng genommen müsste Behauptung 3.2.2 in $\bigwedge_{\nu=1}^N L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^2)$, also für $q = 2$, bewiesen werden. Der Beweis erfolgt jedoch mit exakt derselben Strategie, außer, dass die kohärenten Zustände in der Thomas–Fermi-Region einen zusätzlichen (trivialen)

Spin-Freiheitsgrad tragen und durch $g_R^{pg}(x, \sigma) = g_R(x - q)e^{ipx} \otimes e_\sigma$ gegeben sind. Hierbei ist $\sigma \in \{1, 2\}$ und $\{e_\sigma\}_{\sigma=1}^2$ bezeichnet die Standard-Basis in \mathbb{C}^2 .

Durch diese Abschätzung erhalten wir die Behauptung zwar für $\gamma \leq 2/\pi$, nicht jedoch für die größere Brown–Ravenhall-Kopplung $\gamma_B > 2/\pi$.

Es gibt nun zwei Möglichkeiten, wie man diesen Umstand beheben kann.

1. In [70] zeigten Frank u. a., dass der Brown–Ravenhall-Operator im nullten Drehimpulskanal mit kritischer Kopplung γ_B durch den Chandrasekhar-Operator im nullten Drehimpulskanal mit Kopplung $2/\pi$ kontrolliert werden kann. Der Grund hierfür ist, dass die Coulomb-Singularität im Brown–Ravenhall-Modell durch die Transformation \mathcal{T}_c „ausgeschmiert“ wird, weshalb in diesem Modell eine höhere Kopplungskonstante erlaubt ist. Die Idee wäre, diese Strategie für den Operator mit dem modifizierten Potential $\gamma|x|^{-1} + \lambda c^{-2}U_Z(x/c)$ anzuwenden.
2. Wie im ersten Punkt beschrieben, rührt das Problem von der Coulomb-Singularität her. Man könnte also stattdessen dem Beweis von Sørensen [139] (beziehungsweise des letzten Kapitels) folgen und das Problem wieder in die drei Regionen des letzten Kapitels zerlegen. In der ersten Region wird die kritische Coulomb-Singularität durch die Hardy–Lieb–Thirring-Ungleichung für den Brown–Ravenhall-Operator (Frank [62]) kontrolliert. Dies ist die einzige Region, in der man wirklich die unitäre Transformation \mathcal{T}_c benötigt, um auch die kritische Kopplungskonstante zu behandeln. In den anderen beiden Regionen sollte man die Transformation verwerfen können, da das modifizierte Potential keine Singularitäten mehr aufweist, die nicht mit kinetischer Energie durch die Daubechies-Ungleichung kontrolliert werden könnten. Bei dieser Lokalisierung treten jedoch vom Kommutieren der Lokalisierungsfunktionen χ mit den Operatoren Φ_m der \mathcal{T} -Transformation zusätzliche „Lokalisierungsfehler“ auf. Die Aufgabe besteht darin zu zeigen, dass das durch diese Kommutatoren erzeugte „Lokalisierungspotential“ ebenfalls durch kinetische Energie kontrollierbar ist. Dies ist die Strategie, der wir in den kommenden Abschnitten folgen werden.

4.4 Kommutatoren mit der \mathcal{T} -Transformation

Arbeitet man mit der Strategie von Sørensen [139], um den führenden Term in der asymptotischen Entwicklung der Grundzustandsenergie zu erhalten, führt man wieder die glatten und sphärisch symmetrischen Lokalisierungsfunktionen χ_j ($j = 1, 2, 3$) ein. Die innere Region reicht dabei bis zu einem Radius $R_i = Z^{-r}$ mit $r \in (8/9, 1)$, die mittlere Region von Z^{-r} bis $R_a = Z^{-t}$ mit $t \in (11/30, 2/3)$ und die äußere Region beginnt schließlich bei Z^{-t} . Wir definieren daher

$$\chi_1(x) = \theta_1\left(\frac{|x|}{R_i}\right), \quad \chi_2(x) = \theta_1\left(\frac{|x|}{R_a}\right)\theta_2\left(\frac{|x|}{R_i}\right), \quad \chi_3(x) = \theta_2\left(\frac{|x|}{R_a}\right), \quad (4.7a)$$

wobei die $\theta_j \in C_c^\infty(\mathbb{R}_+ : [0, 1])$ die Gleichheit $\theta_1(x)^2 + \theta_2(x)^2 = 1$ erfüllen, monoton sind und so definiert sind, dass

$$\theta_1(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x < 1 - \beta \\ 0 & \text{für } x > 1 + \beta \end{cases} \quad \text{und} \quad \theta_2(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 1 - \beta \\ 1 & \text{für } x > 1 + \beta \end{cases} \quad (4.7b)$$

mit $0 < \beta < 1/2$ gelten. Da wir auch wieder mit dem durch $x \mapsto x/c$ skalierten Operator arbeiten werden, führen wir außerdem

$$\tilde{\chi}_1(x) = \theta_1 \left(\frac{|x|}{\tilde{R}_i} \right), \quad \tilde{\chi}_2(x) = \theta_1 \left(\frac{|x|}{\tilde{R}_a} \right) \theta_2 \left(\frac{|x|}{\tilde{R}_i} \right), \quad \tilde{\chi}_3(x) = \theta_2 \left(\frac{|x|}{\tilde{R}_a} \right) \quad (4.7c)$$

ein, wobei $\tilde{R}_i = cR_i$ und $\tilde{R}_a = cR_a$ sind.

Im letzten Abschnitt haben wir gezeigt, dass der auf ein Teilchen reduzierte Brown–Ravenhall-Operator nach der Blockdiagonalisierung durch

$$E_c(p) - c^2 - \mathcal{T}_c(V_{\mathcal{R},\lambda}) \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^2)$$

gegeben ist, wobei $V_{\mathcal{R},\lambda} := Z|\cdot|^{-1} - \rho_{\mathcal{R}} * \frac{1}{|\cdot|} + \lambda U_Z$. Hierbei ist \mathcal{T}_c der unitäre Operator, der für skalare Potentiale V wie $\mathcal{T}_c(V) = \Phi_0(\mathbf{p}/c)V\Phi_0(\mathbf{p}/c) + \Phi_1(\mathbf{p}/c)V\Phi_1(\mathbf{p}/c)$ wirkt. Neben den bekannten Lokalisierungsfehlern, die durch das Lokalisieren von $E_c(p)$ entstehen (siehe [139, Formel (5.6)]), treten durch das Kommutieren der χ_j mit den Φ_m weitere „Lokalisierungsfehler“ auf. Im Folgenden betrachten wir die Kommutatoren von Φ_m mit der monotonen und sphärisch symmetrischen Lokalisierungsfunktion $\chi_{R(x)} := \chi(x/R) \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3 : [0, 1])$, die

$$\chi(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } |x| \in [0, 1] \\ 0 & \text{für } |x| \geq 2 \end{cases} \quad (4.8)$$

erfüllt. Dies ist ausreichend, denn $\chi_1(x)$ kann durch $\chi_{R_i}(x)$, $\chi_3(x)$ kann durch $1 - \chi_{R_a}(x)$ und $\chi_2(x)$ kann durch $1 - \chi_{R_i}(x) - (1 - \chi_{R_a}(x))$ ausgedrückt werden. Allgemein gilt für eine reellwertige Funktion V , $f \in L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^2)$ aus dem quadratischen Formbereich von $V \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2}$ und $\Phi \in \{\Phi_0, \Phi_1\}$

$$\begin{aligned} (f, \Phi \chi V \chi \Phi f) &= (f, \{\chi \Phi + [\Phi, \chi]\} V \{\chi, \Phi\} + \Phi \chi f) \\ &= (f, \chi \Phi V \chi \Phi f) + (f, [\Phi, \chi] V \chi \Phi f) + (f, \chi \Phi V [\chi, \Phi] f) + (f, [\Phi, \chi] V [\chi, \Phi] f) \\ &= (f, \chi \Phi V \chi \Phi f) + 2\text{Re}(f, \chi \Phi V [\chi, \Phi] f) + (f, [\Phi, \chi] V [\chi, \Phi] f). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Mit der Cauchy–Schwarz-Ungleichung kann man den mittleren Term der letzten Zeile durch den ersten und den letzten Term abschätzen, denn für $V^{1/2} := V/|V|^{1/2}$ und alle $\varepsilon > 0$ ist

$$\begin{aligned} 2 \left| (V^{1/2} \Phi \chi f, |V|^{1/2} [\chi, \Phi] f) \right| &\leq 2\varepsilon^{1/2} \left\| V^{1/2} \Phi \chi f \right\| \cdot \varepsilon^{-1/2} \left\| |V|^{1/2} [\chi, \Phi] f \right\| \\ &\leq \varepsilon \left\| V^{1/2} \Phi \chi f \right\|^2 + \varepsilon^{-1} \left\| |V|^{1/2} [\chi, \Phi] f \right\|^2 \\ &= \varepsilon (f, \chi \Phi V \chi \Phi f) + \varepsilon^{-1} (f, [\Phi, \chi] |V| [\chi, \Phi] f). \end{aligned} \quad (4.10)$$

Der Doppelkommutator von χ_2 kann mit der Cauchy–Schwarz-Ungleichung durch die Doppelkommutatoren, die nur χ_{R_i} und χ_{R_a} beinhalten, abgeschätzt werden. Der erste Term auf der rechten Seite von (4.9) ist das gewünschte, lokalisierte, verdrehte Potential. Im nächsten Abschnitt werden wir argumentieren, dass wir die \mathcal{T} -Transformation in der mittleren und äußeren Region vernachlässigen können, siehe auch Anhang A.2.

Der Term mit dem Doppelkommutator muss entweder sofort beschränkt oder durch Ausborgen etwas kinetischer Energie kontrolliert werden. Es stellt sich heraus, dass wir letztere Strategie verwenden müssen. Folgendes Lemma erlaubt uns den Doppelkommutator durch ein „Lokalisierungspotential“ L zu kontrollieren. Dazu müssen die Schwartz-Kerne der Φ_j bestimmt werden. Eine kurze Zusammenfassung über Schwartz-Kerne, Pseudodifferentialoperatoren und Symbole wird in Anhang A.3 gegeben.

Lemma 4.4.1. *Seien $V \geq 0$ und χ reellwertige Funktionen auf \mathbb{R}^3 und $\Phi = \Phi(p)$ ein Symbol nullter Ordnung mit Werten in den 2×2 -Matrizen. Sei $\Phi_{ij}(x, y) = K(x - y)M_{ij}$ der Kern des durch $\Phi_{ij}(p)$ definierten Faltungsoperators, wobei $i, j \in \{1, 2\}$ und $|M_{ij}| \leq 1$. Sei*

$$L(x) := \int_{\mathbb{R}^3} dy \int_{\mathbb{R}^3} dz |K(x - z)| |\chi(x) - \chi(z)| V(z) |K(y - z)| |\chi(y) - \chi(z)|. \quad (4.11)$$

Dann gilt

$$|(f, [\Phi, \chi]V[\chi, \Phi]f)| \leq 4 \int_{\mathbb{R}^3} L(x) |f(x)|^2 dx \quad (4.12)$$

für alle $f \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2)$ aus dem quadratischen Formbereich von $V \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2}$.

Sofern keine Verwechslungsgefahr mit den durch $E_c(p)$ erzeugten Lokalisierungsfehlern besteht, werden wir im Folgenden solche L , die durch das Kommutieren der Lokalisierungsfunktionen χ_j mit der \mathcal{T} -Transformation entstehen, ebenfalls als „Lokalisierungsfehler“ oder „Lokalisierungspotentiale“ bezeichnen.

Beweis. Seien $i, j, l \in \{1, 2\}$. Wir schreiben $f = (f_1, f_2)^T$, wobei $f_j \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Weiter definieren wir

$$S_{ij}(x, y) := [\chi, \Phi_{ij}](x, y) = K(x - y)(\chi(x) - \chi(y))M_{ij}.$$

Da $|M_{ij}| \leq 1$, gilt insbesondere

$$|S_{ij}(x, y)| \leq |K(x - y)| |\chi(x) - \chi(y)| =: S(x, y) = S(y, x).$$

Schließlich definieren wir

$$g_{i,z}(x, y) := \sqrt{S(x, z)S(z, y)} |f_i(x)|.$$

Dann erhält man mit der Cauchy–Schwarz-Ungleichung

$$\begin{aligned} |(f, [\Phi, \chi]V[\chi, \Phi]f)| &= \left| \int_{\mathbb{R}^3} dx \int_{\mathbb{R}^3} dy \int_{\mathbb{R}^3} dz \sum_{i,j,l} \overline{f_i(x)} S_{ij}(x, z) V(z) S_{jl}(z, y) f_l(y) \right| \\ &\leq \int dz V(z) \sum_j \sum_{i,l} \int dx \int dy |f_i(x)| |S_{ij}(x, z)| |S_{jl}(z, y)| |f_l(y)| \\ &\leq 2 \int dz V(z) \sum_{i,l} \int dx \int dy g_{i,z}(x, y) g_{l,z}(y, x) \\ &\leq \int dz V(z) \sum_{i,l} \int dx \int dy (g_{i,z}(x, y)^2 + g_{l,z}(y, x)^2) \\ &\leq 4 \int dz V(z) \sum_i \int dx \int dy S(x, z) S(z, y) |f_i(x)|^2. \end{aligned}$$

□

Wir bestimmen nun die Lokalisierungspotentiale von $[\Phi_j, \chi]V[\chi, \Phi_j] = [\Phi_j - 1, \chi]V[\chi, \Phi_j - 1]$. Hierzu leiten wir zunächst Schranken an die Integralkerne von $\Phi_0 - 1$ und Φ_1 her. Wir erinnern an die Definition

$$\phi_j(p) = \sqrt{\frac{e(p) + (-1)^j}{2e(p)}}, \quad p \in \mathbb{R}^3$$

mit dem Symbol der relativistischen kinetischen Energie $e(p) = \sqrt{p^2 + 1}$. Beide $\phi_j - 1$ hängen nur von $|p| \in \mathbb{R}_+$ ab, sind reell analytisch und haben eine analytische Fortsetzung auf den Streifen $\{z \in \mathbb{C} : |\Im(z)| < 1\}$. Des Weiteren verhalten sie sich asymptotisch wie

$$\begin{aligned} \sqrt{2}(\phi_0(p) - 1) &= \begin{cases} \sqrt{2} - 1 - \frac{|p|^2}{4\sqrt{2}} + \mathcal{O}(|p|^4) & \text{für } |p| \rightarrow 0 \\ \frac{1}{2|p|} + \mathcal{O}(|p|^{-2}) & \text{für } |p| \rightarrow \infty \end{cases} \\ \sqrt{2}(1 - \phi_1(p)) &= \begin{cases} 1 - \frac{|p|}{\sqrt{2}} + \mathcal{O}(|p|^3) & \text{für } |p| \rightarrow 0 \\ \frac{1}{2|p|} + \mathcal{O}(|p|^{-2}) & \text{für } |p| \rightarrow \infty \end{cases}. \end{aligned}$$

Beide fallen somit wie $|p|^{-1}$ im Unendlichen ab, was wiederum bedeutet, dass die Kerne am Ursprung eine $|x|^{-2}$ -Singularität haben. Wegen der komplexen Analytizität fallen sie für große Abstände wegen des Paley–Wiener-Satzes exponentiell ab. Diese Heuristik würde auf die Abschätzung

$$|[\chi, \phi_j](x, y)| = |[\chi, \phi_j - 1](x, y)| \leq A \frac{e^{-M|x-y|}}{|x-y|^2} |\chi(x) - \chi(y)|$$

führen, wobei $M > 0$ durch die komplexe Analytizität von ϕ_j bestimmt ist. Wir beginnen mit der Untersuchung der ersten Komponente $\Phi_0 = \phi_0 \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2}$ der \mathcal{T} -Transformation.

Lemma 4.4.2. *Es gibt Konstanten $A > 0$ und $0 < a < 1$, sodass*

$$|(\phi_0 - 1)(x)| \leq A \frac{e^{-a|x|}}{|x|^2} \quad \text{für } x \in \mathbb{R}^3.$$

Darüberhinaus ist $\phi_0 - 1 \in C^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$.

Beweis. Der exponentielle Abfall rührt von der komplexen Analytizität von $\phi_0(|p|) - 1$ für alle $|p| \in \{z \in \mathbb{C} : |\Im(z)| < 1\}$, wie wir gleich sehen werden. Da wir diesen Abfall nur für große $|x|$ beweisen wollen, betrachten wir nur $|x| \geq 1$. Wir fassen die Fouriertransformation von $\phi_0(|p|) - 1$ als oszillierendes Integral auf (siehe beispielsweise [168, Kapitel VI, §1.4] und Anhang A.3). Sei dazu $\chi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ eine radiale und positive Funktion im Fourierraum mit $\chi(0) = 1$ und $\varepsilon > 0$. Dann erhält man mit $\tilde{\phi}(p) := \phi_0(p) - 1$ und der Tatsache, dass

$\chi(\varepsilon p)p\tilde{\phi}(p)\sin(p|x|)$ eine gerade Funktion in $p \in \mathbb{R}$ ist, zunächst

$$\begin{aligned}
\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^3} e^{ipx} \tilde{\phi}(p) \chi(\varepsilon|p|) dp &= \frac{A}{|x|} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty \chi(\varepsilon p) p \tilde{\phi}(p) \sin(p|x|) dp \\
&= \frac{A}{|x|^2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^\infty \chi(\varepsilon p) p \tilde{\phi}(p) |x| \sin(p|x|) dp \\
&= \frac{A}{|x|^2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[-p \tilde{\phi}(p) \chi(\varepsilon p) \cos(p|x|) \Big|_{-\infty}^\infty + \int_{\mathbb{R}} (p \tilde{\phi}(p) \chi(\varepsilon p))' \cos(p|x|) dp \right] \\
&= \frac{A}{|x|^2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}} \left[\varepsilon \chi'(\varepsilon p) \cdot p \tilde{\phi}(p) + \chi(\varepsilon p) (p \tilde{\phi}(p))' \right] \cos(p|x|) dp \\
&= \frac{A}{|x|^2} \int_{\mathbb{R}} (p \tilde{\phi}(p))' \cos(p|x|) dp.
\end{aligned} \tag{4.13}$$

Hierbei haben wir ausgenutzt, dass wir den Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ in das Integral ziehen durften, da beide Integrale separat majorisiert konvergieren. Um dies für den ersten Summanden der dritten Zeile von (4.13) zu sehen, integrieren wir nochmals partiell und erhalten

$$|x|^{-3} \left\{ \varepsilon \chi'(\varepsilon p) p \tilde{\phi}(p) \sin(p|x|) \Big|_{-\infty}^\infty - \int_{\mathbb{R}} \left[\varepsilon^2 \chi''(\varepsilon p) p \tilde{\phi}(p) + \varepsilon \chi'(\varepsilon p) (p \tilde{\phi}(p))' \right] \sin(p|x|) dp \right\}. \tag{4.14}$$

Der Randterm verschwindet, da $\chi \in \mathcal{S}$. Der zweite Summand kann durch die Abschätzung $|\tilde{\phi}(p)| \leq A|p|^{-1}$ und die Substitution $p \mapsto \varepsilon^{-1}p$ durch

$$\varepsilon^2 \int_{\mathbb{R}} \chi''(\varepsilon p) p \tilde{\phi}(p) \sin(p|x|) dp \leq \varepsilon \int_{\mathbb{R}} |\chi''(p)| dp \leq A\varepsilon$$

abgeschätzt werden, was für $\varepsilon \rightarrow 0$ verschwindet. Der letzte Summand in (4.14) ist bis auf die Tatsache, dass $\chi(\varepsilon p) \cos(p|x|)$ durch $\varepsilon|x|^{-1} \chi'(\varepsilon p) \sin(p|x|)$ ersetzt wird, von der gleichen Form wie der zweite Summand in der dritten Zeile in (4.13). Diesen werden wir nun behandeln. Wir bemerken, dass

$$(p \tilde{\phi}(p))' = -\frac{p^2}{(2p^2 + 2) \sqrt{p^2 + \sqrt{p^2 + 1}} + 1} + \sqrt{\frac{1}{\sqrt{p^2 + 1}} + 1} - 1$$

sich wie $\sqrt{2} - 1 + \mathcal{O}(p^2)$ bei $p = 0$ und wie $1/(8|p|^2) + \mathcal{O}(|p|^{-3})$ für $|p| \rightarrow \infty$ verhält. Daher ist $(p \tilde{\phi}(p))'$ eine integrierbare Majorante des Integranden

$$(p \tilde{\phi}(p))' \left[\chi(\varepsilon p) \cos(p|x|) + \frac{\varepsilon \chi'(\varepsilon p)}{|x|} \sin(p|x|) \right].$$

Damit verschwindet für $\varepsilon \rightarrow 0$ auch der dritte Summand in (4.14) und man erhält die behauptete rechte Seite in (4.13).

Da $(p \tilde{\phi})'(p)$ eine analytische Fortsetzung auf den Streifen $\{z \in \mathbb{C} : |\Im(z)| < 1\}$ hat und die Schranke $|(p \tilde{\phi})'(p)| \leq A(1 + \Re(p))^{-2}$ gleichmäßig in $|\Im(p)| < 1$ erfüllt, folgt mit dem Paley–Wiener-Satz (siehe beispielsweise [143, Theorem IX.14]) die Abschätzung

$$\int_{\mathbb{R}} (p \tilde{\phi})'(p) \cos(p|x|) \leq A e^{-a|x|}$$

für alle $0 < a < 1$. Dies folgt im Wesentlichen aus einer Kontur-Integration über ein Rechteck der Breite $2R$ und Höhe $a < 1$ in den komplexen Zahlen, dem Cauchyschen Integralsatz und dem abschließenden Grenzübergang $R \rightarrow \infty$, siehe auch [169, Kapitel 4, Theorem 2.1] und Abbildung 4.1.

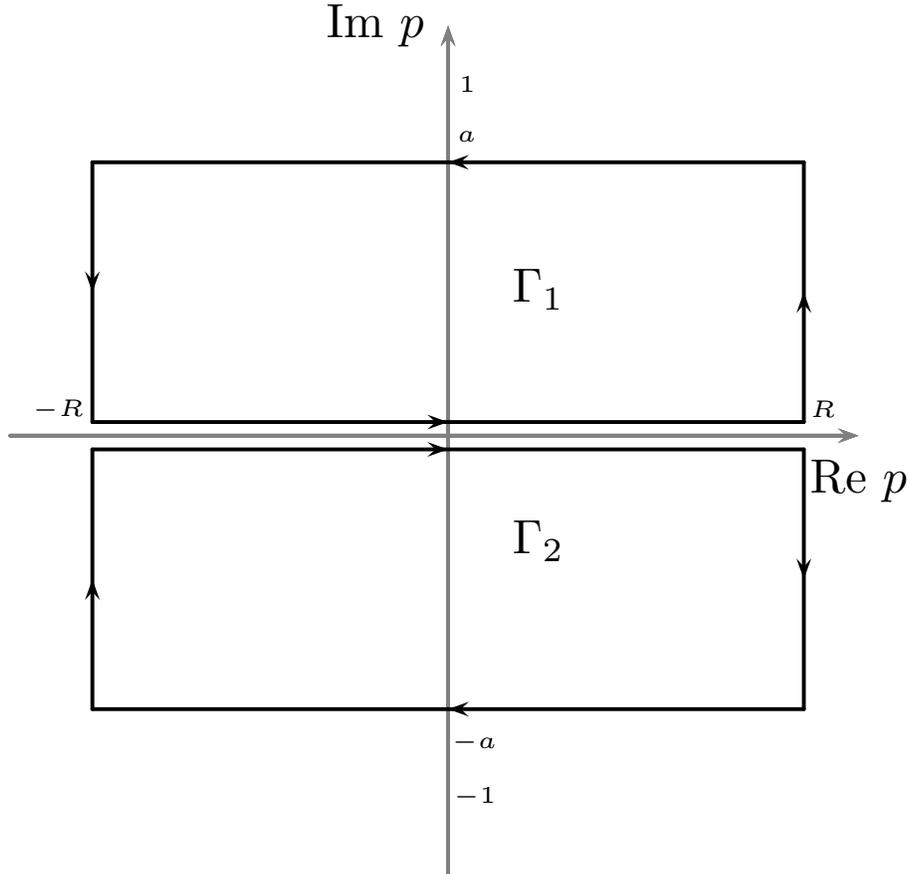


Abbildung 4.1: Konturintegral über $(p\tilde{\phi})'(p)$

Die Glattheit und die $|x|^{-2}$ -Singularität sind Konsequenzen aus [168, Kapitel VI, §4, Proposition 1], welche wir verwenden dürfen, $\phi_0(p) - 1$ ein Symbol der Ordnung -1 ist. \square

Mit diesen Schranken und Lemma 4.4.1 ist das Lokalisierungspotential der ersten Komponente der \mathcal{T} -Transformation somit durch

$$L_R^{(0)}(x) := \int_{\mathbb{R}^3} dy \int_{\mathbb{R}^3} dz \frac{e^{-a|x-z|}e^{-a|y-z|}}{|x-z|^2|y-z|^2} V(z) \left| \chi\left(\frac{x}{R}\right) - \chi\left(\frac{z}{R}\right) \right| \left| \chi\left(\frac{y}{R}\right) - \chi\left(\frac{z}{R}\right) \right| \quad (4.15)$$

gegeben. Dieses schätzen wir in Abschnitt A.1.3 für $V \in r^{-1}L^\infty$ durch

$$L_R^{(0)}(x) \leq AR^{-2}\theta(3R - |x|) + A_aR^{-3}e^{-a|x|/3}\theta(|x| - 3R)$$

ab, siehe auch (A.39).

Als Nächstes bestimmen wir das Lokalisierungspotential der zweiten Komponente $\Phi_1(\mathbf{p}) = \phi_1(|\mathbf{p}|)h(\mathbf{p})$ der \mathcal{T} -Transformation. Mit der Gleichheit

$$|p| = \sqrt{p^2 + 1 - 1} = \sqrt{(e(p) + 1)(e(p) - 1)}$$

erhält man

$$\sqrt{2}\phi_1(|\mathbf{p}|)h(\mathbf{p}) = \frac{\sqrt{e(p)-1}}{\sqrt{e(p)}} \cdot \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} = \frac{\sqrt{e(p)-1}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\sqrt{e(p)}\sqrt{(e(p)+1)(e(p)-1)}} = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\sqrt{e(p)(e(p)+1)}}. \quad (4.16)$$

Mit $\hat{g}(p) := [e(p)(e(p)+1)]^{-1/2}$ und Missbrauch der Notation von $\hat{g}(p)$ als Faltungsoperator mit Kern $g(x)$, ist die Wirkung des Kommutators auf $f \in L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^2)$

$$\begin{aligned} \sqrt{2}[\Phi_1, \chi]f(x) &= \frac{\boldsymbol{\sigma}}{i} [\hat{g}(p)((\nabla\chi)f)(x) + \hat{g}(p)(\chi(\nabla f))(x) - \chi(x)\hat{g}(p)(\nabla f)(x)] \\ &= \frac{\boldsymbol{\sigma}}{i} \int_{\mathbb{R}^3} dy g(x-y) [(\nabla\chi)(y)f(y) + (\chi(y) - \chi(x))(\nabla f)(y)] \\ &= \frac{\boldsymbol{\sigma}}{i} \int_{\mathbb{R}^3} dy \{g(x-y)(\nabla\chi)(y)f(y) \\ &\quad - [(\nabla_y g(x-y))(\chi(y) - \chi(x)) + g(x-y)(\nabla\chi)(y)] f(y)\} \\ &= \frac{\boldsymbol{\sigma}}{i} \int_{\mathbb{R}^3} dy (\nabla_y g(x-y))(\chi(x) - \chi(y))f(y). \end{aligned} \quad (4.17)$$

Bei der partiellen Integration im dritten Schritt haben wir verwendet, dass f im Unendlichen verschwindet. Daher ist

$$\left[\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\sqrt{e(p)(e(p)+1)}}, \chi \right] (x, y) = -i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla_y g(x-y))(\chi(x) - \chi(y)).$$

Mit Lemma 4.4.1 ist das Lokalisierungspotential der zweiten Komponente der \mathcal{T} -Transformation

$$L_R^{(1)}(x) := \int_{\mathbb{R}^3} dy \int_{\mathbb{R}^3} dz V(z) |\nabla_z g(x-z)| |\nabla_y g(z-y)| \left| \chi\left(\frac{x}{R}\right) - \chi\left(\frac{z}{R}\right) \right| \left| \chi\left(\frac{z}{R}\right) - \chi\left(\frac{y}{R}\right) \right|. \quad (4.18)$$

Wir bestimmen nun wie in Lemma 4.4.2 den Abfall sowie die Singularitäten von $g(x)$ und $\nabla g(x)$.

Lemma 4.4.3. *Sei $\hat{g}(p) = [e(p)(e(p)+1)]^{-1/2}$. Dann gelten die folgenden Schranken.*

1. *Es gibt Konstanten $A > 0$ und $0 < a < 1$, sodass*

$$|g(x)| \leq A \frac{e^{-a|x|}}{|x|^2} \quad \text{für } x \in \mathbb{R}^3.$$

2. *Es gibt Konstanten $A > 0$ und $0 < a < 1$, sodass*

$$|\nabla g(x)| \leq A \frac{e^{-a|x|}}{|x|^3} \quad \text{für } x \in \mathbb{R}^3.$$

Darüberhinaus sind $g, \nabla g \in C^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$.

Beweis. (1) $\hat{g}(p)$ hat dieselben Analytizitätseigenschaften wie $\tilde{\phi}(p) = \phi_0(p) - 1$ und fällt im Unendlichen ebenfalls wie $|p|^{-1}$ ab. Die Behauptung folgt daher wie in Lemma 4.4.2 aus dem Paley–Wiener-Satz und der Tatsache, dass $\hat{g}(p)$ ein Symbol der Ordnung -1 ist.

(2) Für den Beweis des exponentiellen Abfalls sei wieder $|x| \geq 1$. Mit der gleichen Strategie wie in Lemma 4.4.2 ist die als oszillierendes Integral aufgefasste Fouriertransformation für $\varepsilon > 0$, $r := |x|$ und $\mathbf{e}_r := x/|x|$ gleich

$$\begin{aligned} \nabla \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^3} dp e^{ipx} \hat{g}(p) \chi(\varepsilon|p|) &= \partial_r r^{-1} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty dp \chi(\varepsilon p) p \hat{g}(p) \sin(pr) \mathbf{e}_r \\ &= \partial_r r^{-1} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}} dp \chi(\varepsilon p) p \hat{g}(p) \sin(pr) \mathbf{e}_r. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Nach zwei partiellen Integrationen ist die rechte Seite von (4.19)

$$\begin{aligned} & - \partial_r r^{-3} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\int_{\mathbb{R}} \chi(\varepsilon p) p \hat{g}(p) \partial_p^2 \sin(pr) dp \right] \mathbf{e}_r \\ &= \partial_r r^{-3} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[-r \chi(\varepsilon p) p \hat{g}(p) \cos(pr) \Big|_{-\infty}^\infty + \int_{\mathbb{R}} (\chi(\varepsilon p) p \hat{g}(p))' \partial_p \sin(pr) dp \right] \mathbf{e}_r \\ &= \partial_r r^{-3} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[(\chi(\varepsilon p) p \hat{g}(p))' \sin(pr) \Big|_{-\infty}^\infty - \int_{\mathbb{R}} (\chi(\varepsilon p) p \hat{g}(p))'' \sin(pr) dp \right] \mathbf{e}_r, \end{aligned}$$

wobei die Randterme wegen $\chi \in \mathcal{S}$ verschwinden. Da $|p \hat{g}(p)| \lesssim 1$ für alle $p \in \mathbb{R}$ und $\chi \in \mathcal{S}$, erhält man

$$\int_{\mathbb{R}} |\varepsilon^2 \chi''(\varepsilon p) p \hat{g}(p) \sin(pr)| dp = \varepsilon \int_{\mathbb{R}} |\chi''(p) \cdot (p/\varepsilon) \hat{g}(p/\varepsilon) \sin(\varepsilon^{-1} pr)| dp \leq \varepsilon \int_{\mathbb{R}} |\chi''(p)| dp \leq A\varepsilon$$

nach der Substitution $p \mapsto p/\varepsilon$. Insbesondere zeigt dies, dass $|\chi''(p)|$ eine integrierbare Majorante von $\chi''(p)(p/\varepsilon)\hat{g}(p/\varepsilon)\sin(\varepsilon^{-1}pr)$ ist. Andererseits konvergiert wegen $|(p\hat{g}(p))'| \leq A(1+|p|)^{-2}$ und $\chi \in \mathcal{S}$,

$$\int_{\mathbb{R}} \varepsilon \chi'(\varepsilon p) (p\hat{g}(p))' \sin(pr) dp$$

majorisiert (mit der integrierbaren Majoranten $A(1+|p|)^{-2}$) gegen Null für $\varepsilon \rightarrow 0$.

Da schließlich $|(p\hat{g}(p))''| \leq A(1+|p|)^{-3}$ gilt, folgt aus dem Satz der majorisierten Konvergenz, dass die rechte Seite von (4.19) für $\varepsilon \rightarrow 0$ gegen

$$\begin{aligned} & - \partial_r r^{-3} \int_{\mathbb{R}} (p\hat{g}(p))'' \sin(pr) dp \mathbf{e}_r \\ &= \left(3r^{-4} \int_{\mathbb{R}} (p\hat{g}(p))'' \sin(pr) dp - r^{-3} \int_{\mathbb{R}} p(p\hat{g}(p))'' \cos(pr) dp \right) \mathbf{e}_r \end{aligned} \quad (4.20)$$

konvergiert. Da sowohl $(p\hat{g}(p))''$ als auch $p(p\hat{g}(p))''$ analytische Fortsetzungen auf die Menge $\{z \in \mathbb{C} : |\Im(z)| < 1\}$ haben und gleichmäßig in $|\Im(p)| < 1$ durch eine Konstante mal $(1 + \Re(p))^{-2}$ beschränkt sind, folgt aus dem Paley–Wiener-Satz wieder, dass die rechte Seite von (4.20) durch $e^{-a|x|}$ für ein $0 < a < 1$ und $|x| \geq 1$ beschränkt ist.

Die Glattheit und die $|x|^{-3}$ -Singularität folgen ebenfalls aus [168, Kapitel VI, §4, Behauptung 1], welche wir verwenden dürfen, da $p\hat{g}(p)$ ein Symbol nullter Ordnung ist. Alternativ kann man auch Behauptung 2 aus ebenjenem Abschnitt verwenden. \square

Wir machen an dieser Stelle eine Bemerkung zum exponentiellen Abfall der Kerne der Φ_j . Tatsächlich erwartet man wegen des Paley–Wiener-Satzes, dass die Kerne wie $e^{-|x|}$ abfallen. Der Grund hierfür ist, dass die ϕ_j auf ganz $\mathbb{C} \setminus \{\pm i\}$ holomorph sind. Dies würde man vermutlich mit einer geschickteren Anwendung des Cauchyschen Integralsatzes entlang der Kurven Γ_1 beziehungsweise Γ_2 in Abbildung 4.4 sehen.

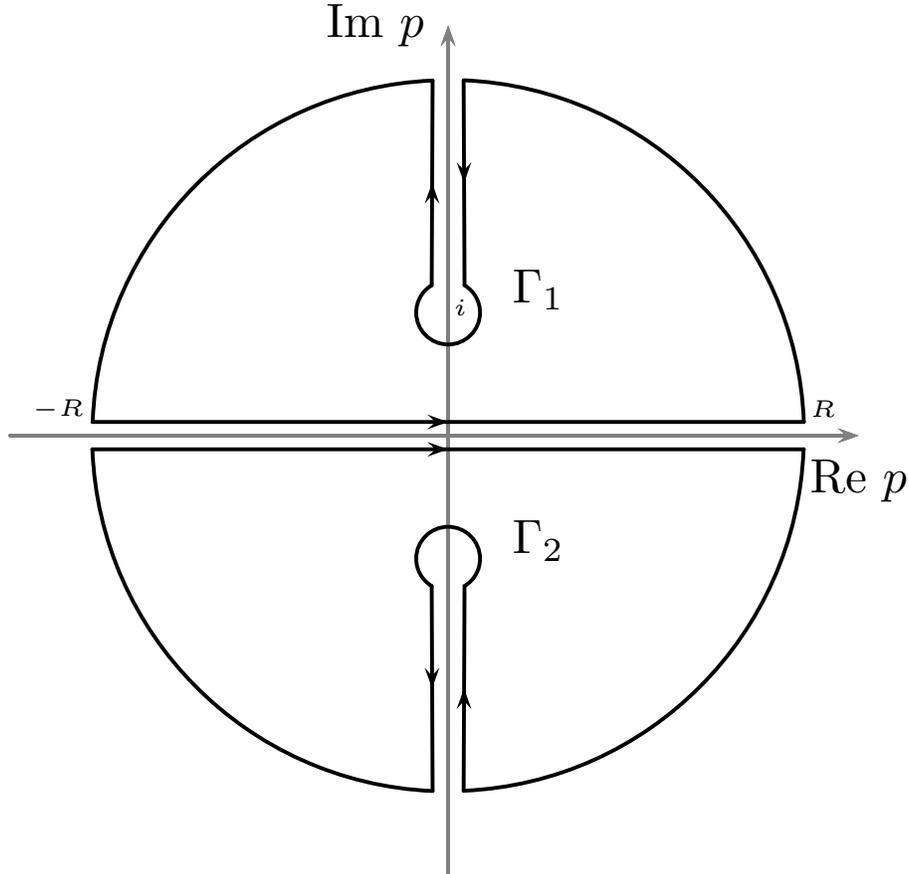


Abbildung 4.2: Konturintegral über $F(p)$

Des Weiteren heben wir an dieser Stelle die Tatsache hervor, dass die Integralkerne der Φ_j im masselosen Fall keinen exponentiellen Abfall haben. In diesem Fall sind $\Phi_0^{(0)} = \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2}$ und $\Phi_1^{(0)}(\mathbf{p}) = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}/|\mathbf{p}| = h(\mathbf{p})$ der Helizitätsoperator, das heißt es gibt nur ein Lokalisierungspotential der zweiten Komponente der masselosen \mathcal{T} -Transformation. In [88, Proposition 6] zeigten Hoever und Sidentop

$$([h, \chi]f)(x) = -\frac{1}{i\pi^2} \int \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot (x - y)}{|x - y|^4} (\chi(x) - \chi(y)) f(y) dy \quad \text{für } f \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2) \quad (4.21)$$

für Lipschitz-stetige und kompakt getragene Funktionen χ . In [130, Lemma 3.2.1] wurde für $m > 0$ der Integralkern des regularisierten Helizitätsoperators

$$h_m(\mathbf{p}) := \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}}$$

von Morozov bestimmt. Es gilt die folgende Aussage.

Lemma 4.4.4. *Seien $m > 0$ und $f \in L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^2)$. Dann gilt*

$$\left(\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}} f \right) (x) = \frac{m^2}{2\pi^2 i} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^3 \setminus B_0(\varepsilon)} \frac{K_2(m|x-y|) \boldsymbol{\sigma} \cdot (x-y)}{|x-y|^2} f(y) dy \quad (4.22)$$

mit der um den Ursprung zentrierten Kugel $B_0(\varepsilon)$ mit Radius $\varepsilon > 0$. Darüberhinaus gilt für eine Lipschitz-stetige und kompakt getragene Funktion χ

$$\left(\left[\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}}, \chi \right] f \right) (x) = -\frac{m^2}{2\pi^2 i} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{K_2(m|x-y|) \boldsymbol{\sigma} \cdot (x-y)}{|x-y|^2} (\chi(x) - \chi(y)) f(y) dy.$$

Wie in [88, Proposition 6] ist die ε -Regularisierung im zweiten Teil der Aussage dieses Lemmas wegen der Lipschitz-Stetigkeit von χ nicht mehr nötig. Damit ist der regularisierte Doppelkommutator für $f = (f_1, f_2)^T$ und $f^* = (\overline{f_1}, \overline{f_2})$

$$\begin{aligned} & (f, [h_m, \chi] V[\chi, h_m] f) \\ &= \frac{m^4}{4\pi^4} \int dz V(z) \int dx dy f^*(x) \frac{K_2(m|x-z|) \boldsymbol{\sigma} \cdot (x-z)}{|x-z|^2} (\chi(x) - \chi(z)) \\ & \quad \times \frac{K_2(m|z-y|) \boldsymbol{\sigma} \cdot (z-y)}{|z-y|^2} (\chi(z) - \chi(y)) f(y). \end{aligned} \quad (4.23)$$

Insbesondere stellt man für $m \rightarrow 0$ den Integralkern von $[h, \chi] V[\chi, h]$ wieder her und für $f \in L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^2)$ und Lipschitz-stetiges χ gilt die Konvergenz $[h_m, \chi] f \rightarrow [h, \chi] f$ in L^2 , siehe auch den Beweis von [88, Proposition 6].

Aus den Schranken für die modifizierte Bessel-Funktion $K_2(mr)$ (für festes $m > 0$) [137, Formel 9.6.9 und 9.7.2], nämlich

$$\begin{aligned} K_2(mr) &\sim 2 (mr)^{-2} \quad \text{für } r \rightarrow 0 \\ K_2(mr) &\sim \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{e^{-mr}}{\sqrt{mr}} \quad \text{für } r \rightarrow \infty \end{aligned}$$

und Lemma 4.4.3 ist andererseits ersichtlich, dass das asymptotische Verhalten des Kerns von $|\Phi_1(x)|$ am Ursprung und im Unendlichen (bis auf das Gewicht des exponentiellen Abfalls) äquivalent zu dem von $|K_2(m|x|)|/|x|$ ist, wenn $m \leq a$, wobei a das Gewicht des exponentiellen Abfalls von $|\Phi_1(x)|$ bezeichnet. Insbesondere gibt es ein $A_a > 0$, sodass

$$|\Phi_1(r)| \leq A_a r^{-1} K_2(ar) \quad \text{für alle } r > 0. \quad (4.24)$$

Das Vorgehen zur Beschränkung des Lokalisierungspotentials von $[\Phi_1, \chi_R] V[\chi_R, \Phi_1]$ (mit $0 \leq V \in r^{-1} L^\infty$ und $\chi_R(x) = \chi(x/R)$) ist daher wie folgt. In Anhang A.1 schätzen wir das Lokalisierungspotential von $[h_m, \chi_R] V[\chi_R, h_m]$ mit dem regularisierten Helizitätsoperator h_m für die Lokalisierungsfunktion χ_R und $V(z) = |z|^{-1}$ ab. Für $m \rightarrow 0$ ist der Fehler durch $R^{-1} F(|x|/R) \theta(3 - |x|/R)$ beschränkt (siehe auch (A.25)), wobei F höchstens logarithmische Singularitäten der Form (A.26) hat und sonst stetig und beschränkt ist. Das Lokalisierungspotential von $[\Phi_1, \chi_R] V[\chi_R, \Phi_1]$ kann wegen (4.24) und $|V(x)| \leq \|rV\|_\infty |x|^{-1}$ durch das von $[h_m, \chi_R] V[\chi_R, h_m]$ abgeschätzt werden, siehe (A.37). Zusammen mit dem Lokalisierungspotential $[\Phi_0, \chi_R] V[\chi_R, \Phi_0]$ der ersten Komponente (A.39) zeigen wir, dass der gesamte

Lokalisierungsfehler mit einem $0 < a < 1$ durch

$$\begin{aligned} L_R(x) := & A_1 \left[R^{-1} F \left(\frac{|x|}{R} \right) + R^{-2} \right] \theta(3R - |x|) \\ & + A_2 (R^{-2} + R^{-1} + R^{-1/2} + 1 + R^{1/2}) e^{-aR} \theta(3R - |x|) \\ & + A_3 (R^{-3} + R^{-3/2} + R^{-1/2} + R^{1/2}) e^{-a|x|/2} \theta(|x| - R) \end{aligned} \quad (4.25)$$

beschränkt ist, wobei die A_j (mit $j = 1, 2, 3$) von a abhängen. Dabei hat $F(|x|/R)$ logarithmische Singularitäten bei $|x| = R$ und $|x| = 2R$ und ist sonst beschränkt. Die Singularitäten sind von der Form (A.26) und mit der Daubechies-Ungleichung behandelbar.

4.5 Beweis von Behauptung 4.2.2 für $\gamma < \gamma_B$

In (4.6) haben wir bereits gesehen, dass für alle normierten $\psi \in H^{1/2}(\mathbb{R}^{3N} : \mathbb{C}^{4^N}) \cap \bigwedge_{\nu=1}^N \mathfrak{H}$ die untere Schranke

$$\mathcal{E}_\lambda[\psi] \geq -\text{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)} [\Lambda_+ (|D_0| - c^2 - V_{\mathcal{R}, \lambda}) \Lambda_+]_- - A_g Z^2 - D[\rho_Z^{\text{TF}}]$$

gilt, wobei $V_{\mathcal{R}, \lambda} = Z|x|^{-1} - \rho_{\mathcal{R}} * |\cdot|^{-1} + \lambda U_Z$ war. Wir wenden nun die unitäre Φ_c -Transformation (siehe (4.3)) an und folgen der Strategie Sørensens, indem wir den transformierten Einteilchen-Operator $E_c(p) - c^2 - \mathcal{T}_c(V_{\mathcal{R}, \lambda})$ mittels der χ_j aus (4.7a) in drei radiale Regionen lokalisieren. Wir erhalten

$$\begin{aligned} & -\text{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2)} (E_c(p) - c^2 - \mathcal{T}_c(V_{\mathcal{R}, \lambda}))_- + o(Z^{7/3}) \\ & \geq -\sum_{j=1}^3 \text{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2)} (\chi_j (E_c(p) - c^2 - AR_i^{-2} \chi_1 - AR_i^{-2} \chi_2 \chi_{-(c \cdot)}) \chi_j - \mathcal{T}_c(\chi_j V_{\mathcal{R}, \lambda} \chi_j))_- , \end{aligned} \quad (4.26)$$

wobei $R_i^{-2} \chi_1$ und $R_i^{-2} \chi_2 \chi_{-(c \cdot)}$ Lokalisierungsfehler der kinetischen Energie $E_c(p)$ sind, siehe auch (3.4). Insbesondere war χ_{-} die charakteristische Funktion der am Ursprung zentrierten Kugel $B_0(2\tilde{R}_i)$ mit Radius $2\tilde{R}_i$. Für $j = 1, 2$ vernachlässigen wir das nicht-negative mittlere Feld $\rho_{\mathcal{R}} * |\cdot|^{-1}$ und erhalten so eine untere Schranke von (4.26). Um den Operator vollständig lokalisieren zu können, müssen wir noch die \mathcal{T} -Transformation mit den χ_j vertauschen. Wie wir zu Beginn von Abschnitt 4.4 gesehen haben, ist

$$\begin{aligned} & \sum_{m=0,1} (f, \Phi_m \chi_j V \chi_j \Phi_m f) \\ & \leq \sum_{m=0,1} [(1 + \varepsilon)(f, \chi_j \Phi_m V \Phi_m \chi_j f) + (1 + \varepsilon^{-1})(f, [\Phi_m, \chi_j] V [\chi_j, \Phi_m] f)] \end{aligned} \quad (4.27)$$

für $V \geq 0$, $j \in \{1, 2, 3\}$ und alle $\varepsilon \in (0, 1)$. In unserer konkreten Situation ist $V = Z/|x| + \lambda U_Z - (\rho_{\mathcal{R}} * |\cdot|^{-1})(x) \chi_3(x)$. Wir erinnern daran, dass $\mathcal{R} = Z^{-s}$ und $R_a = Z^{-t}$ mit $11/30 < t < s < 2/3$ sind. Somit gilt in der äußeren Region

$$\frac{1}{|x|} \chi_3(x) = \frac{1}{|\cdot|} * g_{\mathcal{R}}^2(x) \chi_3(x)$$

einerseits wegen des Newtonschen Satzes für $x \notin \text{supp } g_{\mathcal{R}}^2$ und andererseits wegen der Größe des Trägers von $g_{\mathcal{R}}^2$ für $x \in \text{supp } g_{\mathcal{R}}^2$, siehe auch (3.9) und die anschließende Diskussion. Daher ist

$$\left(\frac{Z}{|x|} - \rho_{\mathcal{R}} * \frac{1}{|\cdot|} \right) \chi_3(x) = g_{\mathcal{R}}^2 * \Phi_Z^{\text{TF}}(x) \chi_3(x) \geq 0,$$

das heißt $(\rho_{\mathcal{R}} * |\cdot|^{-1})(x) \chi_3(x) \leq Z/|x|$. Wegen der Annahmen $\lambda > 0$ und $0 \leq U \in r^{-1}L^\infty$ ist daher

$$0 \leq \frac{Z}{|x|} + \lambda U_Z - (\rho_{\mathcal{R}} * |\cdot|^{-1})(x) \chi_3(x) \leq A \frac{Z}{|x|}.$$

Die Lokalisierungspotentiale $L_R(x)$ (4.25) von $[\Phi_m, \chi_j]V[\chi_j, \Phi_m]$ wurden für $V \in r^{-1}L^\infty$ in Abschnitt 4.4 und Anhang A.1 berechnet, siehe (4.25) für das endgültige Lokalisierungspotential. Damit und mit $R_i^{-2}\chi_1 \leq c^2\chi_1$ kann die rechte Seite von (4.26) nach unten durch

$$\begin{aligned} & - \text{Tr} \left[\chi_1 \left(E_c(p) - Ac^2 - \left((1 + \varepsilon) \mathcal{T}_c \left(\frac{Z}{|x|} + \lambda U_Z \right) + 2\varepsilon^{-1}c^2(L_{R_i} + L_{R_a})(x) \right) \right) \chi_1 \right]_- \\ & - \text{Tr} \left[\chi_2 \left(E_c(p) - c^2 - \left((1 + \varepsilon) \mathcal{T}_c \left(\frac{Z}{|x|} + \lambda U_Z \right) + \frac{2c^2}{\varepsilon}(L_{R_i} + L_{R_a}) + \frac{A}{R_i^2}\chi_-(c) \right) \right) \chi_2 \right]_- \\ & - \text{Tr} \left[\chi_3 \left(E_c(p) - c^2 - \left((1 + \varepsilon) \mathcal{T}_c(V_{\mathcal{R}, \lambda}) + 2\varepsilon^{-1}c^2(L_{R_i} + L_{R_a}) \right) \right) \chi_3 \right]_- - o(Z^{7/3}) \end{aligned}$$

abgeschätzt werden. Die Idee ist es nun, die \mathcal{T} -Transformation nur in der inneren Region zu behalten. Sie ist notwendig, um die Singularität des Coulomb-Potentials „aufzuweichen“ und Kopplungskonstanten $\gamma > 2/\pi$ behandeln zu können. In den anderen beiden Regionen spielt die Singularität keine Rolle mehr, weshalb die \mathcal{T} -Transformation hier vernachlässigbar sein sollte und wir dem Beweis des letzten Kapitels folgen können sollten.

Im Folgenden quantifizieren wir diese Intuition. Der Einfachheit halber geben wir die Formeln für die auf der Längenskala c^{-1} reskalierten \mathcal{T} -Transformationen wieder. Mit der Definition der $\tilde{\chi}_j$ aus (4.7c) zeigen wir in Anhang A.2

- $-(\tilde{\chi}_2 f, \mathcal{T}_1(U)\tilde{\chi}_2 f) \geq -A(\tilde{\chi}_2 f, |x|^{-1}\tilde{\chi}_2 f)$ für alle $0 \leq U(x) \leq |x|^{-1}$, siehe Lemma A.2.1,
- $|(\tilde{\chi}_j f, (|x|^{-1} - \mathcal{T}_1(|x|^{-1})\tilde{\chi}_j f)| \leq A(\tilde{R}_i^{-2}\delta_{j,2} + \tilde{R}_a^{-2}\delta_{j,3})\|f\|_2^2$, siehe Lemma A.2.2 und
- $|(f, (U - \mathcal{T}_1(U))f)| \leq AM\|f\|_2^2$ für Lipschitz-stetige Potentiale U mit Lipschitz-Konstante M , siehe Lemma A.2.3.

In der mittleren Region ($j = 2$) verwenden wir Lemma A.2.1, um $\mathcal{T}_1(c^{-2}U_Z(x/c) + \gamma|x|^{-1})$ durch eine Konstante mal $|x|^{-1}$ in der quadratischen Form zu ersetzen. In der äußeren Region ($j = 3$) folgt aus Lemma A.2.2, dass der Fehler, der bei der Ersetzung von $\mathcal{T}_1(\gamma/|x|)$ durch $\gamma/|x|$ entsteht, von der Größenordnung $\tilde{R}_a^{-2} = o(Z^{-2/3})$ ist. Nach Summation über alle Teilchen trägt dieser Fehler also nur mit $o(Z^{1/3})$ bei.

Schließlich verwenden wir in der äußeren Region noch Lemma A.2.3, um den Fehler zu kontrollieren, der bei der Ersetzung von $\mathcal{T}_1(c^{-2}U_Z(x/c) + c^{-2}\rho_{\mathcal{R}}(x/c))$ durch $c^{-2}U_Z(x/c) + c^{-2}\rho_{\mathcal{R}}(x/c)$ entsteht. Die Lipschitz-Konstante von $c^{-2}U_Z(x/c) = c^{-2}Z^{4/3}U(Z^{1/3}x/c)$ ist von der Größenordnung $\mathcal{O}(Z^{-2+4/3-2/3}) = \mathcal{O}(Z^{-4/3})$. Multipliziert man diesen Fehler noch mit der Teilchenzahl, ist der Fehler von der Ordnung $\mathcal{O}(Z^{-1/3})$, also insbesondere $o(Z^{1/3})$.

Die Lipschitz-Konstante des mittleren Feldes $c^{-2}g_{\mathcal{R}}^2 * \rho_Z^{\text{TF}} * |\cdot|^{-1}(x/c)$ ist von der Ordnung $c^{-2}Z^{1/3}\mathcal{R}^{-1}$, also für $\mathcal{R} = Z^{-s}$ mit $s < 2/3$ von der Ordnung $o(Z^{-1})$, da $\|\rho_Z^{\text{TF}} * |\cdot|^{-1}\|_\infty \leq$

$AZ^{4/3}$. Multipliziert man dies noch mit der Teilchenzahl, folgt, dass dieser Fehler von der Ordnung $o(Z^0)$ und damit immer noch akzeptabel ist. Definiert man $\tilde{\mathcal{R}} = c\mathcal{R}$, $\chi_Z^{\text{TF}} = \rho_Z^{\text{TF}} * |\cdot|^{-1}$ und erinnert sich an die Skalierungsrelation $\chi_Z^{\text{TF}}(y) = Z^{4/3}\chi_1^{\text{TF}}(Z^{1/3}y)$, so sieht man in der Tat

$$\begin{aligned} c^{-2} \left| \nabla (g_{\tilde{\mathcal{R}}}^2 * \chi_Z^{\text{TF}})(x/c) \right| &= A\mathcal{R}^{-3}Z^{-2+4/3} \left| \nabla \int g^2 \left(\frac{x/c-y}{\mathcal{R}} \right) \chi_1^{\text{TF}}(Z^{1/3}y) dy \right| \\ &= A\mathcal{R}^{-3}Z^{-2+4/3-3} \left| \nabla \int g^2 \left(\frac{x-y}{\tilde{\mathcal{R}}} \right) \chi_1^{\text{TF}}(\gamma Z^{-2/3}y) dy \right| \\ &\leq A_g Z^{-2+4/3-3} \mathcal{R}^{-3} \tilde{\mathcal{R}}^{3-1} = A_g Z^{-5/3} \mathcal{R}^{-1} = o(Z^{-1}). \end{aligned}$$

In der zweiten Gleichheit haben wir $y \mapsto y/c$ skaliert und in der letzten Abschätzung

$$\left| \nabla \int g^2 \left(\frac{x-y}{\tilde{\mathcal{R}}} \right) \chi_1^{\text{TF}}(\gamma Z^{-2/3}y) dy \right| \leq \tilde{\mathcal{R}}^{-1} \|\chi_1^{\text{TF}}\|_\infty \int \left| (\nabla g^2) \left(\frac{x-y}{\tilde{\mathcal{R}}} \right) \right| dy \leq A_g \tilde{\mathcal{R}}^{-1+3}$$

verwendet. Somit erhalten wir die untere Schranke

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_\lambda[\psi] &\geq -\text{Tr} \left[\chi_1 (E_c(p) - Ac^2 - (1+\varepsilon)\mathcal{T}_c(Z|x|^{-1} + \lambda U_Z) - 2\varepsilon^{-1}c^2(L_{R_i} + L_{R_a})) \chi_1 \right]_- \\ &\quad - \text{Tr} \left[\chi_2 (E_c(p) - c^2 - (AZ|x|^{-1} + AR_i^{-2}\chi_-(c\cdot) + 2\varepsilon^{-1}c^2(L_{R_i} + L_{R_a}))) \chi_2 \right]_- \\ &\quad - \text{Tr} \left[\chi_3 (E_c(p) - c^2 - ((1+\varepsilon)V_{\mathcal{R},\lambda} + 2\varepsilon^{-1}c^2(L_{R_i} + L_{R_a}))) \chi_3 \right]_- - D[\rho_Z^{\text{TF}}] - o(Z^{7/3}). \end{aligned}$$

Wie im letzten Kapitel untersuchen wir im Folgenden die drei Regionen einzeln genauer. In der inneren und der mittleren Region arbeiten wir mit dem auf der Längenskala c^{-1} reskalierten Operator.

4.5.1 Energie in der inneren Region

Wir zeigen, dass der Beitrag von

$$-\text{Tr} \left[\tilde{\chi}_1 \left(\sqrt{-\Delta + 1} - A - \mathcal{T}_1 \left(\frac{\gamma(1+\varepsilon)}{|x|} + \frac{\lambda}{c^2}(1+\varepsilon)U_Z \left(\frac{x}{c} \right) \right) - 2\varepsilon^{-1}(L_{\tilde{R}_i} + L_{\tilde{R}_a})(x) \right) \tilde{\chi}_1 \right]_-$$

von der Größenordnung $o(Z^{1/3})$ ist. Hierbei ist $\tilde{\chi}_1(x) = \theta_1(|x|/\tilde{R}_i)$, siehe (4.7c).

Tix [175, Theorem 1] (siehe auch Balinsky und Evans [4, Lemma 2.4]) zeigte, dass die Differenz des massiven und des masselosen Brown–Ravenhall-Operators zu einem beschränkten Operator fortgesetzt werden kann, das heißt es gilt

$$\|(\sqrt{-\Delta + 1} - 1 - \mathcal{T}_1(\gamma|x|^{-1})) - (\sqrt{-\Delta} - \mathcal{T}_1^{(0)}(\gamma|x|^{-1}))\| \leq A$$

gleichmäßig in $\gamma \in (0, \gamma_B]$. Hierbei bezeichnet $\mathcal{T}_1^{(0)}$ die unitäre Transformation des masselosen Brown–Ravenhall-Operators. Für skalare Potentiale V ist sie als

$$\mathcal{T}_1^{(0)}(V) := \frac{1}{2} \left(V \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2} + \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} V \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \right)$$

definiert. Mit $V_1(x) = c^{-2}\lambda(1+\varepsilon)U_Z(x/c)$ und $V_2(x) = 2\varepsilon^{-1}(L_{\tilde{R}_i}(x) + L_{\tilde{R}_a}(x)) + A$ genügt es daher (mit dem gleichen Argument wie in Abschnitt 3.4) die Summe der negativen Eigenwerte von

$$\sqrt{-\Delta} - \mathcal{T}_1^{(0)} \left(\frac{\gamma(1+\varepsilon)}{|x|} \right) - \mathcal{T}_1(V_1) - \tilde{\chi}_1^2 V_2$$

abzuschätzen.

Dazu verwenden wir eine Modifikation der Hardy–Lieb–Thirring-Ungleichung für den Brown–Ravenhall-Operator (Frank [62, Theorem 5.1]). Diese besagt, dass es für Potentiale V auf \mathbb{R}^3 mit Werten in den hermiteschen 4×4 -Matrizen eine Konstante $A > 0$ gibt, sodass

$$\mathrm{Tr} \left[\sqrt{-\Delta} - \mathcal{T}_1^{(0)} \left(\frac{\gamma_B}{|x|} + V \right) \right]_- \leq A \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{Tr}_{\mathbb{C}^4} V(x)_+^4 dx.$$

Wir zeigen

Lemma 4.5.1. *Seien V_1 und V_2 skalar- und reellwertige Funktionen. Dann gibt es eine Konstante $A > 0$, sodass*

$$\mathrm{Tr} \left[\sqrt{-\Delta} - \mathcal{T}_1^{(0)} \left(\frac{\gamma_B}{|x|} \right) - \mathcal{T}_1(V_1) - V_2 \right]_- \leq A \int_{\mathbb{R}^3} (V_1(x)_+^4 + V_2(x)_+^4) dx.$$

Beweis. Wie im Beweis von [62, Theorem 5.1] gibt es für alle $t \in (0, 1/2)$ eine Konstante $K_t > 0$, sodass

$$\sqrt{-\Delta} - \mathcal{T}_1^{(0)}(\gamma_B |x|^{-1}) \geq K_t \ell^{-1+2t} (-\Delta)^t - \ell^{-1} =: H_0 \quad \text{für alle } \ell > 0,$$

siehe [62, Formel (5.3)]. Damit kann die Zahl der negativen Eigenwerte unterhalb $-\tau < 0$ nach oben durch

$$\begin{aligned} & N \left(-\tau, \sqrt{-\Delta} - \mathcal{T}_1^{(0)} \left(\frac{\gamma_B}{|x|} \right) - \mathcal{T}_1(V_1) - V_2 \right) \\ & \leq N \left(-\tau, \frac{1}{2} (H_0 \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2} - 2\mathcal{T}_1(V_1)) + \frac{1}{2} (H_0 - 2V_2) \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2} \right) \\ & \leq N(-\tau, H_0 \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2} - 2\mathcal{T}_1(V_1)) + N(-\tau, (H_0 - 2V_2) \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2}) \\ & = N(-\tau, \Phi_0((H_0 - 2V_1) \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2})\Phi_0 + \Phi_1((H_0 - 2V_1) \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2})\Phi_1) + 2N(-\tau, H_0 - 2V_2) \\ & \leq 4N(-\tau, H_0 - 2V_1) + 2N(-\tau, H_0 - 2V_2) \end{aligned}$$

abgeschätzt werden. Hierbei haben wir verwendet, dass für selbstadjungierte, nach unten halbbeschränkte Operatoren A und B wegen des Variationsprinzips $N(-\tau, (A+B)/2) \leq N(-\tau, A) + N(-\tau, B)$ gilt sowie $\Phi_0^2 + \Phi_1^2 = 1$ und die Tatsache, dass $H_0 \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2}$ mit Φ_0 und Φ_1 kommutiert. Die Behauptung folgt dann wie in [62], indem man $\ell = (\sigma\tau)^{-1}$ für ein zum Schluß zu optimierendes $\sigma \in (0, 1)$ (in Abhängigkeit von t) wählt, und die Cwikel–Lieb–Rosenbljum-Schranke [147, 113, 28] für $N(-\tau, H_0 - 2V_1)$ und $N(-\tau, H_0 - 2V_2)$ mit

$$N(-\tau, H_0 - 2V_j) = N(0, (-\Delta)^t - K_t^{-1}(\sigma\tau)^{-(1-2t)}(2V_j - (1-\sigma)\tau))$$

verwendet. Man erhält

$$\begin{aligned} & N \left(-\tau, \sqrt{-\Delta} - \mathcal{T}_1^{(0)} \left(\frac{\gamma_B}{|x|} \right) - \mathcal{T}_1(V_1) - V_2 \right) \\ & \leq A_t (\sigma\tau)^{-3(1-2t)/(2t)} \left[\int_{\mathbb{R}^3} (V_1(x) - (1-\sigma)\tau)_+^{\frac{3}{2t}} dx + \int_{\mathbb{R}^3} (V_2(x) - (1-\sigma)\tau)_+^{\frac{3}{2t}} dx \right]. \end{aligned}$$

Wendet man nun „Liebs Formel“ [113] an, sprich, multipliziert beide Seiten mit $\tau^{1-1} = 1$, integriert über τ und optimiert in σ und $t \in (3/8, 1/2)$, erhält man das gewünschte Ergebnis, nämlich

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left[\sqrt{-\Delta} - \mathcal{T}_1^{(0)} \left(\frac{\gamma B}{|x|} \right) - \mathcal{T}_1(V_1) - V_2 \right]_- \\ & \leq A_{\sigma,t} \int_0^\infty d\tau \tau^{-3(1-2t)/(2t)} \left[\int_{\mathbb{R}^3} (V_1(x) - (1-\sigma)\tau)_+^{\frac{3}{2t}} dx + \int_{\mathbb{R}^3} (V_2(x) - (1-\sigma)\tau)_+^{\frac{3}{2t}} dx \right] \\ & \leq A \int_{\mathbb{R}^3} (V_1(x)_+^4 + V_2(x)_+^4) dx. \end{aligned}$$

□

Anwenden des Lemmas zeigt, dass die Ruheenergie des Elektrons

$$\int_{|x| \leq \tilde{R}_i} 1^4 dx = A\tilde{R}_i^3 = o(Z^{1/3})$$

beiträgt. Das Test-Potential trägt mit

$$Z^{4(-2+4/3)} \int_{\mathbb{R}^3} U(c^{-1}Z^{1/3}x)^4 dx \leq A\|U\|_4^4 Z^{-2/3}$$

und das Lokalisierungspotential mit

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-4} \int_{|x| \leq \tilde{R}_i} L_{\tilde{R}_i}(x)^4 dx & \leq \varepsilon^{-4} \int L_{\tilde{R}_i}(x)^4 dx \\ & \leq A_1 \varepsilon^{-4} \tilde{R}_i^{-4} \int_{|x| \leq 3\tilde{R}_i} F(|x|/\tilde{R}_i)^4 dx \\ & \quad + A_2 \varepsilon^{-4} \left(\tilde{R}_i^{-2} + \tilde{R}_i^{-1} + \tilde{R}_i^{-1/2} + 1 + \tilde{R}_i^{1/2} \right)^4 e^{-4a\tilde{R}_i} \int_{|x| \leq 3\tilde{R}_i} dx \\ & \quad + A_3 \varepsilon^{-4} \left(\tilde{R}_i^{-3} + \tilde{R}_i^{-3/2} + \tilde{R}_i^{-1/2} + \tilde{R}_i^{1/2} \right)^4 \int_{|x| \geq 2\tilde{R}_i} e^{-2a|x|} dx \\ & \leq A\varepsilon^{-4} \tilde{R}_i^{-1} \end{aligned}$$

zum Fehler bei. Dieser Fehler ist kleiner als der der Ruheenergie des Elektrons, wenn ε als hinreichend kleine negative Potenz von Z gewählt wird. Mit derselben Rechnung folgt, dass der größte Beitrag von $L_{\tilde{R}_a}$ von der Größenordnung $\varepsilon^{-4} \tilde{R}_a^{-1} \leq \varepsilon^{-4} \tilde{R}_i^{-1}$ ist. Mit der Wahl $\varepsilon = [Z^{-1/240}]$ und der Definition von R_i ist der Fehler dieser Region wieder von der Größenordnung $o(Z^{1/3})$.

4.5.2 Energie in der mittleren Region

In dieser Region kann das volle Coulomb-Potential mit beliebiger Kopplungskonstante γ mit der Daubechies-Ungleichung kontrolliert werden. Für $A > 0$ betrachten wir

$$-\text{Tr} \left[\tilde{\chi}_2 \left(E_1(p) - 1 - A \left(|x|^{-1} + \varepsilon^{-1} (L_{\tilde{R}_i}(x) + L_{\tilde{R}_a}) \right) - A\chi_{-\tilde{R}_i^{-2}} \right) \tilde{\chi}_2 \right]_-.$$

In Abschnitt 3.5 hatten wir gesehen, dass die Beiträge des Coulomb-Potentials und $\tilde{R}_i^{-2}\chi_-$ mit der Daubechies-Ungleichung durch

$$\int_{\tilde{R}_i \leq |x| \leq \tilde{R}_a} (|x|^{-5/2} + |x|^{-4}) dx \lesssim \tilde{R}_a^{1/2} = o(Z^{1/3})$$

abgeschätzt werden konnten. Schließlich müssen noch die Beiträge der Lokalisierungsfehler $L_{\tilde{R}_i}$ und $L_{\tilde{R}_a}$ bestimmt werden, sprich

$$\int_{\tilde{R}_i \leq |x| \leq \tilde{R}_a} \left[\varepsilon^{-5/2} (L_{\tilde{R}_i}(x)^{5/2} + L_{\tilde{R}_a}(x)^{5/2}) + \varepsilon^{-4} (L_{\tilde{R}_i}(x)^4 + L_{\tilde{R}_a}(x)^4) \right] dx.$$

Der größte Beitrag kommt hierbei vom ersten Summanden des A_1 -Terms in (4.25) zur Potenz $5/2$. Dieser ist wegen der Definition von $\tilde{R}_a = cR_a = cZ^{-t}$ mit $t > 11/30$ und mit der Wahl $\varepsilon = [Z^{-1/240}]$ durch

$$(\varepsilon \tilde{R}_a)^{-5/2} \int_{\tilde{R}_i \leq |x| \leq \tilde{R}_a} F\left(\frac{|x|}{\tilde{R}_a}\right)^{5/2} dx \lesssim \varepsilon^{-5/2} \tilde{R}_a^{1/2} = \mathcal{O}(Z^{157/480}) = o(Z^{1/3})$$

beschränkt. Die anderen Fehler sind entweder exponentiell klein oder durch $\varepsilon^{-5/2} \tilde{R}_a^{-2}$ beschränkt.

4.5.3 Die Thomas–Fermi-Region

Wir erinnern nochmals daran, dass $\mathcal{R} = Z^{-s}$ und $R_a = Z^{-t}$ mit $11/30 < t < s < 2/3$ definiert wurden. Um das verbleibende Lokalisierungspotential der Kommutatoren mit der \mathcal{T} -Transformation und den Fehler $U_Z - U_g$ mit $U_g := U_Z * g_{\mathcal{R}}^2$, der von der Phasenraumlokalisierung kommt, zu kontrollieren, borgen wir uns etwas ($\varepsilon = [Z^{-1/240}]$ und $0 < \varepsilon_2 < 1/2$) kinetische Energie. Dann betrachten wir den Ausdruck

$$\begin{aligned} & - \operatorname{Tr} \left(\chi_3 \left[(1 - \varepsilon - \varepsilon_2)(E_c(p) - c^2) - (1 + \varepsilon) \left(\frac{Z}{|x|} - \rho_Z^{\text{TF}} * \frac{1}{|\cdot|} + \lambda U_Z \right) * g_{\mathcal{R}}^2 \right] \chi_3 \right)_- - D[\rho_Z^{\text{TF}}] \\ & - c^2 \varepsilon \operatorname{Tr} \left(\tilde{\chi}_3 \left[E_1(p) - 1 - \varepsilon^{-2} (L_{\tilde{R}_i}(x) + L_{\tilde{R}_a}) \right] \tilde{\chi}_3 \right)_- \\ & - \varepsilon_2 \operatorname{Tr} \left(\chi_3 \left[E_c(p) - c^2 - \varepsilon_2^{-1} \lambda (U_Z - U_g) \right] \chi_3 \right)_-, \end{aligned} \tag{4.28}$$

wobei wir, wie in Abschnitt 3.6, $|x|^{-1}\chi_3 = |\cdot|^{-1} * g_{\mathcal{R}}^2(x)\chi_3(x)$ verwendet haben, siehe auch (3.9) und die anschließende Diskussion. Wie in den beiden letzten Regionen wird das Lokalisierungspotential in der zweiten Zeile mit Hilfe der Daubechies-Ungleichung abgeschätzt. Da $\tilde{R}_a > \tilde{R}_i$, trägt für hinreichend großes Z lediglich der A_3 -Term aus (4.25) von $L_{\tilde{R}_i}$ bei, das heißt der Lokalisierungsfehler fällt exponentiell in Z ab. Der größte Fehler von $L_{\tilde{R}_a}$ verhält sich wie in der mittleren Region wie

$$\varepsilon \int_{\tilde{R}_a \leq |x| \leq 3\tilde{R}_a} \left[\varepsilon^{-5} \tilde{R}_a^{-5/2} F(|x|/\tilde{R}_a)^{5/2} + \varepsilon^{-8} \tilde{R}_a^{-4} F(|x|/\tilde{R}_a)^4 \right] dx \lesssim \varepsilon^{-4} \tilde{R}_a^{1/2} = o(Z^{1/3})$$

für $\varepsilon = [Z^{-1/240}]$ und $\tilde{R}_a = cR_a = cZ^{-t}$ mit $t > 11/30$.

In Lemma 3.6.1 wurde bereits gezeigt, dass

$$\begin{aligned} & -\operatorname{Tr}(\chi_3[\varepsilon_2(E_c(p) - c^2) - \lambda(U_Z - U_g)]\chi_3)_- \\ & \geq -A\varepsilon_2 \left[\left(\frac{\lambda}{\varepsilon_2} \right)^{5/2} Z^{7/3} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_{5/2}^{5/2} + \left(\frac{\lambda}{\varepsilon_2} \right)^4 Z^{4/3} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_4^4 \right]. \end{aligned}$$

Damit und $\tilde{d}p = (2\pi)^{-3} dp$ schätzen wir (4.28) mit denselben Schritten wie in Abschnitt 3.6 durch

$$\begin{aligned} & - \int_{|q| \geq \frac{R_0}{4}} \left[(1 - \varepsilon - \varepsilon_2)(E_c(p) - c^2) - (1 + \varepsilon) \left(\frac{Z}{|q|} - \rho_Z^{\text{TF}} * \frac{1}{|\cdot|}(q) + \lambda U_Z(q) \right) \right]_- \tilde{d}p dq - D[\rho_Z^{\text{TF}}] \\ & - A\varepsilon_2 \left[\left(\frac{\lambda}{\varepsilon_2} \right)^{5/2} Z^{7/3} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_{5/2}^{5/2} + \left(\frac{\lambda}{\varepsilon_2} \right)^4 Z^{4/3} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_4^4 \right] - o(Z^{7/3}) \end{aligned}$$

nach unten ab. Man verfährt dann wieder wie im Beweis von Sørensen beziehungsweise Abschnitt 3.6, indem zunächst der Integrationsbereich angepasst und anschließend mit dem semi-klassischen, nicht-relativistischen Phasenraumintegral verglichen wird. Man erhält schließlich

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_\lambda[\psi] & \geq - \int \left[(1 - \varepsilon - \varepsilon_2) \frac{p^2}{2} - (1 + \varepsilon) \left(\frac{Z}{|q|} - \rho_Z^{\text{TF}} * \frac{1}{|\cdot|}(q) + \lambda U_Z(q) \right) \right]_- \tilde{d}p dq - D[\rho_Z^{\text{TF}}] \\ & - A\varepsilon_2 \left[\left(\frac{\lambda}{\varepsilon_2} \right)^{5/2} Z^{7/3} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_{5/2}^{5/2} + \left(\frac{\lambda}{\varepsilon_2} \right)^4 Z^{4/3} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_4^4 \right] - o(Z^{7/3}) \\ & = - \int \left[\frac{p^2}{2} - \left(\frac{Z}{|q|} - \rho_Z^{\text{TF}} * \frac{1}{|\cdot|}(q) + \lambda U_Z(q) \right) \right]_- \tilde{d}p dq - D[\rho_Z^{\text{TF}}] \\ & - \left(\frac{(1 + \varepsilon)^{5/2}}{(1 - \varepsilon - \varepsilon_2)^{3/2}} - 1 \right) \int \left[\frac{p^2}{2} - \left(\frac{Z}{|q|} - \rho_Z^{\text{TF}} * \frac{1}{|\cdot|}(q) + \lambda U_Z(q) \right) \right]_- \tilde{d}p dq \\ & - A\varepsilon_2 \left[\left(\frac{\lambda}{\varepsilon_2} \right)^{5/2} Z^{7/3} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_{5/2}^{5/2} + \left(\frac{\lambda}{\varepsilon_2} \right)^4 Z^{4/3} \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_4^4 \right] - o(Z^{7/3}). \end{aligned}$$

Mit der Wahl $\varepsilon = [Z^{-1/240}]$ und

$$\varepsilon_2 = \frac{1}{4} \max \left\{ \frac{\|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_{5/2}}{1 + \|U - g_{Z^{-s+1/3}}^2 * U\|_{5/2}}, Z^{-1/3+\delta} \right\} = o(Z^0), \quad \delta \in (0, 1/3)$$

gilt $(1 + \varepsilon)^{5/2}(1 - \varepsilon - \varepsilon_2)^{-3/2} - 1 \leq A(\varepsilon + \varepsilon_2)$. Daraus ist ersichtlich, dass alle Fehler von der Ordnung $o(Z^{7/3})$ sind und man erhält schließlich

$$\mathcal{E}_\lambda[\psi] \geq - \int \left[\frac{p^2}{2} - \left(\frac{Z}{|q|} - \rho_Z^{\text{TF}} * \frac{1}{|\cdot|} + \lambda U_Z(q) \right) \right]_- \tilde{d}p dq - D[\rho_Z^{\text{TF}}] - o(Z^{7/3}),$$

was Behauptung 4.2.2 zeigt.

Kapitel 5

Die starke Scott-Vermutung für Chandrasekhar-Atome

Dieses Kapitel beruht auf einer Zusammenarbeit mit Rupert L. Frank, Heinz Siedentop und Barry Simon. Hinzugefügte Bemerkung vor der Drucklegung: Die Darstellung der Ergebnisse dieses Kapitels folgt einem internen vorläufigen Arbeitsmanuskript der Autoren dieser Zusammenarbeit. Die endgültige Version ist zwischenzeitlich, also seit Einreichung der Dissertation und vor Drucklegung, als Preprint im ArXiv [67] unter wesentlicher Verbesserung sowohl der Darstellung als auch der Ergebnisse erschienen.

Wir betrachten die auf der Längenskala c^{-1} reskalierte Einteilchendichte eines Grundzustands des Vielteilchen-Chandrasekhar-Operators und zeigen, dass sie gegen die Summe der Quadrate der Eigenfunktionen des relativistischen Einteilchen-Wasserstoff-Operators im Grenzwert großer Teilchenzahlen konvergiert. Der Beweis beruht auf dem Argument der linearen Antwort, einer Verallgemeinerung des Feynman–Hellmann-Satzes sowie einer neuen Äquivalenz von Sobolew-Normen, die durch Potenzen von $\sqrt{-\Delta}$ beziehungsweise $\sqrt{-\Delta} - \gamma/|x|$ erzeugt werden, siehe auch Kapitel 7.

Die Resultate dieses Kapitels bestätigen die von Lieb [115] geäußerte *starke Scott-Vermutung* und zeigen insbesondere, dass kernnahe Elektronen relativistische Korrekturen erzeugen.

Das Kapitel beginnt mit der Definition des vorliegenden Systems und der Formulierung der Hauptresultate. Im Anschluß werden die Ergebnisse interpretiert und mit denen des nicht-relativistischen Falls von Iantchenko u. a. [95] verglichen. Danach wird die Strategie des Beweises genauer erläutert.

5.1 Einführung, Definitionen und Resultate

Unser System besteht aus einem am Ursprung fixierten Kern der Ladung Z , welcher mit N Elektronen, die q Spin-Freiheitsgrade haben, über das Coulomb-Potential wechselwirkt. Darüberhinaus berücksichtigen wir die Coulombischen Wechselwirkungen zwischen den Elektronen untereinander. Das System wird durch den Chandrasekhar-Operator beschrieben. Er ist in atomaren Einheiten durch die Friedrichs-Erweiterung im fermionischen Vielteilchen-Hilbertraum $\bigwedge_{\nu=1}^N L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^q)$ der zu

$$\sum_{\nu=1}^N \left(\sqrt{-c^2 \Delta_{\nu} + c^4} - c^2 - \frac{Z}{|x_{\nu}|} \right) + \sum_{1 \leq \nu < \mu \leq N} \frac{1}{|x_{\nu} - x_{\mu}|}$$

gehörenden quadratischen Form auf $\bigwedge_{\nu=1}^N C_c^\infty(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^q)$ definiert. Wir konzentrieren uns im Folgenden auf den Fall $N = Z$ und $q = 1$. Die quadratische Form ist genau dann nach unten beschränkt, wenn $Z/c =: \gamma \leq 2/\pi$ (Kato [101, Kapitel 5, Gleichung (5.33)]). Für $\gamma < 2/\pi$ ist der quadratische Formbereich $H^{1/2}(\mathbb{R}^{3N}) \cap \bigwedge_{\nu=1}^N (L^2(\mathbb{R}^3))$. Wir bezeichnen die erhaltene Friedrichssche Erweiterung mit C_Z . Bekanntermaßen ist $\inf \text{spec}(C_Z)$ ein Eigenwert von C_Z (Lewis et al [112] und Vugalter und Zhislin [185]). Dieser kann entartet sein und wir bezeichnen mit ψ_1, \dots, ψ_M eine Basis des zugehörigen Eigenraums. Wir bezeichnen die zugehörige Grundzustandsdichtematrix mit

$$d = \sum_{\mu=1}^M w_\mu |\psi_\mu\rangle \langle \psi_\mu|,$$

wobei $w_\mu \geq 0$ Gewichte sind, die die Normierungsbedingung $\sum_{\mu=1}^M w_\mu = 1$ erfüllen. Die zugehörige Einteilchendichte ist dann

$$\rho_d(x) := N \sum_{\mu=1}^M w_\mu \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} |\psi_\mu(x, x_2, \dots, x_N)|^2 dx_2 \dots dx_N \quad \text{für } x \in \mathbb{R}^3.$$

Wir bezeichnen mit $Y_{\ell m}$, $\ell \in \mathbb{N}_0$, $m = -\ell, \dots, \ell$ Kugelflächenfunktionen, die in $L^2(\mathbb{S}^2)$ normiert sind [126, Formel (B.93)]. Sei weiter

$$\rho_{\ell,d}(r) := \frac{Nr^2}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \sum_{\mu=1}^M w_\mu \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} \left| \int_{\mathbb{S}^2} \overline{Y_{\ell m}(\omega)} \psi_\mu(r\omega, x_2, \dots, x_N) d\omega \right|^2 dx_2 \dots dx_N$$

für $r \in \mathbb{R}_+$

die radiale Grundzustandsdichte im ℓ -ten Drehimpulskanal. Wegen der Vollständigkeitsrelation der $Y_{\ell m}$ gilt $r^2 \int_{\mathbb{S}^2} \rho_d(r\omega) d\omega = \sum_{\ell} (2\ell+1) \rho_{\ell,d}(r)$.

Unser Resultat betrifft die Grundzustandsdichte auf Abständen der Größenordnung Z^{-1} zum Kern. Es ist bekannt, dass Elektronen auf dieser Längenskala zur Scott-Korrektur der Thomas-Fermi-Approximation der Grundzustandsenergie von C_Z beitragen, siehe Solovej u. a. [162] und Frank u. a. [69]. Wie in diesen Arbeiten spielt der auf der Längenskala c^{-1} reskalierte, relativistische Wasserstoff-Operator

$$C_\gamma^H := \sqrt{-\Delta + 1} - 1 - \frac{\gamma}{|x|} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3)$$

eine fundamentale Rolle. Wegen der sphärischen Symmetrie kann man den Operator in Drehimpulskanäle zerlegen, was auf die radialen Operatoren

$$C_\ell^H := \sqrt{-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}} + 1 - 1 - \frac{\gamma}{r} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}_+, dr)$$

führt. Wir betonen, dass wir uns von nun an, es sei denn, etwas anderes wird explizit bemerkt, mit $L^2(\mathbb{R}_+)$ immer auf $L^2(\mathbb{R}_+, dr)$ beziehen, sprich das Maß ist dr und nicht $r^2 dr$. Weiter betonen wir, dass die Eigenwerte von C_ℓ^H nicht entartet und von m unabhängig sind, weshalb wir einen Index m unterdrücken. Wenn $\psi_{n,\ell}^H$ (mit $n \in \mathbb{N}_0$) die normierten Eigenfunktionen von C_ℓ^H bezeichnen, definieren wir die zugehörige wasserstoffartige Dichte im Kanal ℓ durch

$$\rho_\ell^H(r) := \sum_{n=0}^{\infty} |\psi_{n,\ell}^H(r)|^2. \quad (5.1)$$

Die gesamte Dichte ist dann durch

$$\rho^H(r) := \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \rho_{\ell}^H(r)$$

gegeben.

Unser erstes Resultat stellt sicher, dass die reskalierten Grundzustandsdichten $\rho_{\ell,d}$ und ρ_d auf der Längenskala Z^{-1} gegen etwas Endliches konvergieren. Genauer gesagt zeigen wir, dass die wasserstoffartigen Dichten für alle $r \in \mathbb{R}_+$ endlich sind. Um dieses und die folgenden Hauptresultate präzise zu formulieren, führen wir die Abbildung

$$\begin{aligned} [0, 1] &\rightarrow [0, 2/\pi] \\ \sigma &\mapsto \Phi(\sigma) := (1 - \sigma) \tan \frac{\pi\sigma}{2} \end{aligned} \quad (5.2)$$

ein. Die Funktion erfüllt $\Phi(0) = 0$, $\lim_{\sigma \rightarrow 1} \Phi(\sigma) = 2/\pi$ und ist auf $[0, 1]$ streng monoton. Daher gibt es ein eindeutiges $\sigma_{\gamma} \in [0, 1]$, sodass $\Phi(\sigma_{\gamma}) = \gamma$.

Satz 5.1.1 (Existenz von ρ_{ℓ}^H und ρ^H). *Seien $\gamma \in (0, 2/\pi)$, $\ell \in \mathbb{N}_0$ und $1/2 < s < \min\{3/2 - \sigma_{\gamma}, 3/4\}$. Dann erfüllen die wasserstoffartigen Dichten ρ_{ℓ}^H und ρ^H die Abschätzungen*

$$\begin{aligned} \rho_{\ell}^H(r) &\leq A_{s,\gamma} (\ell + 1/2)^{-4s} \left[\left(\frac{r}{\ell + \frac{1}{2}} \right)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq \ell + \frac{1}{2}\}} + \left(\frac{r}{\ell + \frac{1}{2}} \right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{\ell + \frac{1}{2} \leq r \leq (\ell + \frac{1}{2})^2\}} \right. \\ &\quad \left. + \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{r \geq (\ell + 1/2)^2\}} \right] \end{aligned}$$

und

$$r^2 \rho^H(r) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \rho_{\ell}^H(r) \leq A_{s,\gamma} (r^{2-4s} + r^{1/2}).$$

Die Test-Funktionen, für welche die starke Scott-Vermutung wahr ist, sind in den Funktionenräumen $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$ und $\mathcal{K}_{s,\delta}$ enthalten. Diese werden in (5.20) und (5.26) in den Abschnitten 5.3 beziehungsweise 5.4 definiert. In diesen Abschnitten werden wir einige Inklusionseigenschaften (siehe (5.21) und Lemma 5.4.2) sowie Spur- und Sobolew-Ungleichungen (siehe Behauptungen 5.3.10 und 5.4.6) zeigen.

Um eine ungefähre Vorstellung von diesen Klassen zu bekommen, bemerken wir an dieser Stelle lediglich, dass kompakt getragene Funktionen, die durch ein Vielfaches des Coulomb-Potentials beschränkt oder integrierbar sind, in diesen Klassen enthalten sind.

Wir erinnern schließlich daran, dass der Raum aller kompakt getragenen L^p -Funktionen mit L_{comp}^p bezeichnet wird. Damit sind wir in der Lage, die Hauptresultate dieses Kapitels, sprich die Konvergenz der reskalierten Grundzustandsdichten, zu formulieren.

Satz 5.1.2 (Konvergenz in einem festen Drehimpulskanal). *Seien $\gamma \in (0, 2/\pi)$, $\ell_0 \in \mathbb{N}_0$, $1/2 < s' < s < \min\{3/2 - \sigma_{\gamma}, 1\}$, $\delta' \in [0, 2s' - 1]$ und $\varepsilon \in [0, 2s - 1]$. Sei $U = U_1 + U_2$ mit $U_1 \in r^{-1}L_{\text{comp}}^{\infty}$, $U_2 \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}$ und $|U_2|^{2s} \in \mathcal{K}_{s',\delta'}^{(0)}$. Dann gilt für $Z, c \rightarrow \infty$ mit fixiertem $Z/c = \gamma$*

$$\lim_{Z \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} c^{-3} \rho_{\ell_0,d}(c^{-1}r) U(r) dr = \int_0^{\infty} \rho_{\ell_0}^H(r) U(r) dr.$$

Satz 5.1.3 (Konvergenz in allen Drehimpulskanälen). *Seien $\gamma \in (0, 2/\pi)$, $1/2 < s' < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 3/4\}$, $\delta' \in [4(s - s'), 2s' - 1]$, $\delta \in [0, 2s - 1]$ und $\varepsilon \in [0, 2s - 1]$. Sei $U = U_1 + U_2$ eine Funktion auf $(0, \infty)$ mit $U_1 \in r^{-1}L_{\text{comp}}^\infty$, $U_2 \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}$ und $|U_2|^{2s} \in \mathcal{K}_{s',\delta'} \cap \mathcal{K}_{s,\delta}$. Dann gilt für $Z, c \rightarrow \infty$ mit fixiertem $Z/c = \gamma$*

$$\lim_{Z \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^3} c^{-3} \rho_d(c^{-1}x) U(x) dx = \int_{\mathbb{R}^3} \rho^H(x) U(x) dx.$$

Wir bemerken, dass das Intervall $[4(s - s'), 2s' - 1] \ni \delta'$ nicht leer ist, das heißt $4s + 1 \leq 6s'$, falls $s' \geq 2/3$. Ist ansonsten $1/2 < s' < 2/3$, muss zusätzlich $s \leq (6s' - 1)/4$ verlangt werden, was bereits $s \leq 3/4$ sicher stellt.

Folgendes kann zu den Hauptergebnissen dieses Kapitels zu bemerkt werden.

(1) Wie wir in der Einführung erwähnt haben, sind diese Ergebnisse die relativistischen Analoga zur starken Scott-Vermutung, die von Iantchenko u. a. [95] bewiesen wurde. Wir diskutieren an dieser Stelle einige Ähnlichkeiten und Unterschiede der Sätze 5.1.2 und 5.1.3 mit den Resultaten aus [95]. Beide Resultate zeigen die Konvergenz der Grundzustandsdichten auf der Längenskala Z^{-1} gegen die entsprechenden wasserstoffartigen Dichten in einem gewissen schwachen Sinne. Auf der einen Seite können unsere Test-Funktionen eine Coulomb-Singularität am Ursprung haben (sogar Riemann-Singularitäten, wie $\sin(1/r)r^{-1}$ sind erlaubt). Diese sind in der Arbeit von Iantchenko u. a. nicht abgedeckt. In Anbetracht der allgemeinen Natur relativistischer Coulomb-Systeme ist dieses Ergebnis optimal, da stärkere Singularitäten nicht von der kinetischen Energie kompensiert werden können. Naturgemäß ist dies im nicht-relativistischen Fall anders. Iantchenko u. a. konnten dagegen zeigen, dass die reskalierte Grundzustandsdichte *punktweise* gegen die wasserstoffartige Dichte konvergiert, das heißt Delta-Funktionen sind als Test-Funktionen erlaubt. Dies ist im relativistischen Fall, insbesondere am Ursprung, nicht unbedingt erwartbar, da die Eigenfunktionen singular sein können. Anhand der Eigenfunktionen des Coulomb–Dirac-Operators kann dies explizit gesehen werden, wobei die Singularität am Ursprung von der Kopplungskonstanten γ abhängt, siehe auch [10] oder [172, Formel (8.266)].

(2) Die wasserstoffartige Dichte ist im relativistischen Fall deutlich weniger untersucht als im nicht-relativistischen Fall. Im nicht-relativistischen Fall zeigten Heilmann und Lieb [86], dass die wasserstoffartige Dichte am Ursprung endlich ist, monoton in r fällt und sich für $r \rightarrow \infty$ wie $r^{-3/2}/(\sqrt{2}\pi^2) + o(r^{-3/2})$ verhält. Zusammen mit der starken Scott-Vermutung zeigt dies insbesondere, dass es einen gewissen „glatten“ Übergang zwischen der quantenmechanischen Längenskala Z^{-1} und der semiklassischen Längenskala $Z^{-1/3}$ gibt, da die (reskalierte) Thomas–Fermi-Dichte gerade wie $r^{-3/2}$ am Ursprung divergiert. (Man erinnere sich an die Skalierungsrelation $\rho_Z^{\text{TF}}(x) = Z^2 \rho_1^{\text{TF}}(Z^{1/3}x)$). Für das hier vorliegende relativistische Modell nach Chandrasekhar können wir immerhin zeigen, dass ρ_ℓ^H (siehe (5.1)) wegen der Sätze 5.2.2 und 5.2.3 im nächsten Abschnitt, beziehungsweise Behauptungen 5.3.3 und 5.3.4 in Abschnitt 5.3, fast überall endlich ist. Darüberhinaus ist die potentielle Energie, sprich das Integral gegen r^{-1} , in jedem Kanal endlich, siehe Bemerkung 5.3.5. Satz 5.1.1 ist allerdings etwas präziser und weckt insbesondere etwas Hoffnung, was die Asymptotik für große Abstände zum Kern angeht. Das Resultat sagt zum Einen, dass ρ_ℓ^H und ρ^H für alle $r \in \mathbb{R}_+$ endlich sind und liefert zum Anderen die punktweise obere Schranke

$$\rho^H(r) \leq A_\gamma r^{-3/2} \quad \text{für } r \rightarrow \infty.$$

(Eine analoge Schranke im nicht-relativistischen Fall kann mit sehr ähnlichen Argumenten hergeleitet werden, siehe Anhang B.2 für weitere Details.) Obwohl eine entsprechende untere

Schranke fehlt und die implizite Konstante A_γ wahrscheinlich alles andere als optimal ist, deutet dieses Ergebnis bereits an, dass ρ^H ein ähnliches asymptotisches Verhalten wie die nicht-relativistische Dichte für große Abstände zum Kern haben kann. Dies ist auch zu erwarten, da sich lediglich die kernnächsten Elektronen, deren Geschwindigkeiten ein substantieller Bruchteil der Lichtgeschwindigkeit sind, relativistisch verhalten sollten, wohingegen sich die kernfernen Elektronen (bereits auf der Längenskala $Z^{-1/3}$, wie wir in den Kapiteln 2 bis 4 gesehen hatten) nicht-relativistisch verhalten.

Wie wir bereits im vorigen Punkt angedeutet haben, ist es offen, die Singularität von ρ^H und $\rho_{\ell=0}^H$ am Ursprung zu bestimmen. Sie sollte, wie im Coulomb–Dirac-Modell, von der Kopplungskonstanten γ abhängen. Schließlich wäre es wünschenswert, Aussagen über die Monotonie von ρ^H machen zu können. Man könnte, wie im nicht-relativistischen Fall, erwarten, dass ρ^H ebenfalls monoton fällt.

(3) Der Beweis von Satz 5.1.2 beruht wieder auf dem Argument der linearen Antwort und verläuft analog zu den Beweisen von Lieb und Simon [119], Baumgartner [8] (welcher Griffiths Lemma [78], siehe auch [159, Theorem 1.27], verwendet) sowie Iantchenko u. a. [95]: wir differenzieren bezüglich der Kopplungskonstanten λ einer Störung U im ℓ -ten Drehimpulskanal des Chandrasekhar-Operators. Die Ableitung, sprich die „Antwort“, ist gerade die gegen U integrierte Grundzustandsdichte. Um Satz 5.1.3 zu beweisen, vertauscht man die Summe über die Drehimpulse mit der Ableitung, um das Resultat für einen fixen Drehimpulskanal anwenden zu können, sprich Satz 5.1.2. Dass diese beiden Grenzwerte miteinander vertauscht werden dürfen, folgt aus dem Weierstraßschen Majorantenkriterium mit einer Majoranten, die gleichmäßig in λ und Z in ℓ summierbar ist, siehe auch Behauptung 5.4.3.

Formal ist die Strategie (um die Notation einfach zu halten, hier für die gesamte Dichte) wie folgt: Zunächst schreiben wir die gemittelte, reskalierte Grundzustandsdichte als

$$\int_{\mathbb{R}^3} c^{-3} \rho_d(|x|/c) U(|x|) dx = \frac{1}{\lambda c^2} \operatorname{Tr} \left[\left(C_Z - \left(C_Z - \lambda \sum_{\nu=1}^Z c^2 U(c|x_\nu|) \right) \right) d \right].$$

Ist beispielsweise $\lambda > 0$, so kann die rechte Seite mit dem Variationsprinzip von oben (mit der Konvention, dass der Negativteil positiv ist, sprich $A_- = -A\chi_{(-\infty,0)}(A)$) durch

$$\frac{1}{\lambda c^2} \operatorname{Tr} \left[\left(C_Z - \lambda \sum_{\nu=1}^Z c^2 U(c|x_\nu|) \right)_- - (C_Z)_- \right]$$

abgeschätzt werden. Andererseits suggeriert die Scott-Korrektur, dass die Differenz dieser Grundzustandsenergien für ein festes λ im Grenzwert großer Teilchenzahlen Z gegen die Spektralverschiebung zwischen dem gestörten und dem ungestörten relativistischen Wasserstoff-Operator mit Kopplungskonstante γ konvergiert. In diesem Grenzwert erhält man

$$\frac{1}{\lambda} \operatorname{Tr} [(C_\gamma^H - \lambda U)_- - (C_\gamma^H)_-],$$

wobei C_γ^H den relativistischen Einteilchen-Wasserstoff-Operator auf der Längenskala c^{-1} bezeichnet. An dieser Stelle müssen wir den Limes $\lambda \rightarrow 0$ durchführen. Im Geiste von Hellmann und Feynman erwarten wir, dass der Grenzwert gerade

$$\frac{1}{\lambda} \operatorname{Tr} [(C_\gamma^H - (C_\gamma^H - \lambda U)) d^H] = \int_{\mathbb{R}^3} \rho^H(|x|) U(|x|) dx$$

ist, wobei d^H den Grundzustand von C_γ^H bezeichnet. Wäre das untere Ende des wesentlichen Spektrums nicht Null, wäre das Resultat wohlbekannt und folgte aus gewöhnlicher Störungstheorie. Jedoch trifft dies nicht auf den Wasserstoff-Operator zu, weshalb wir gezwungen sind, eine Regularisierungsprozedur durchzuführen. Eine der Bedingungen für die Existenz der Ableitung ist, dass die Störung auf dem Kern des ungestörten Operators verschwindet. Dies ist insbesondere dann wahr, wenn Null kein Eigenwert des ungestörten Operators ist. Die größte technische Schwierigkeit besteht somit darin, zu rechtfertigen, dass die Ableitung der Summe der negativen Eigenwerte existiert und durch den behaupteten Ausdruck gegeben ist. Dies gestaltet sich am schwierigsten im nullten Drehimpulskanal für Kopplungen $\gamma > 1/2$ wegen des Mangels einer Drehimpulsbarriere.

(4) In Abschnitt 5.2 zeigen wir, dass es (neben der Bedingung, dass die Störung auf dem Kern des ungestörten Operators verschwindet) genügt zu zeigen, dass eine gewisse „relative Spurklasse-Bedingung“ sowie weitere damit verbundene, wohlbegründete technische Annahmen erfüllt sind, um die Summe der negativen Eigenwerte ableiten zu dürfen. Die relative Spurklasse-Bedingung bedeutet, dass der Operator $(C_\ell^H + M)^{-s}U(C_\ell^H + M)^{-s}$ für ein hinreichend großes $M > -\inf \text{spec } C_\ell^H$ (und damit für alle hinreichend großen $M > -\inf \text{spec } C_\ell^H$) und $s > 1/2$ ein Operator der Spurklasse ist. Die Bedingung $s > 1/2$ ist ausschlaggebend, da $(1+k)^{-1} \notin L^1(\mathbb{R}_+, dr)$. Für $\ell \geq 1$ sind die Operatoren $(C_\ell + M)(C_\ell^H + M)^{-1}$ (wobei C_ℓ nur die kinetische Energie im ℓ -ten Kanal meint) für alle $\gamma < 3/2$ wegen der Hardy-Ungleichung beschränkt. Wegen der Operatormonotonie positiver Wurzeln reduziert sich die Verifikation der Spurklasse-Bedingung daher darauf zu zeigen, dass $(C_\ell + M)^{-s}U(C_\ell + M)^{-s}$ in der Spurklasse ist, was relativ unkompliziert ist. Für $\ell = 0$ ist die Situation etwas delikater, da die Operatoren nur für $\gamma < 1/2$ beschränkt sind. An dieser Stelle machen wir Gebrauch von den Resultaten aus Kapitel 7, welche besagen, dass für festes $\gamma < 2/\pi$, die Normen, die durch die Operatoren $(|p| - \gamma/|x|)^s$ und $|p|^s$ (in $L^2(\mathbb{R}^3)$) und daher insbesondere für $\ell = 0$) erzeugt werden, äquivalent zueinander sind, wenn $s \in (1/2, 3/2 - \sigma_\gamma)$ (wobei $\sigma_\gamma \in [0, 1]$ nach (5.2) definiert wurde). Genau an dieser Stelle braucht man die Einschränkung an die Kopplungskonstante $\gamma < 2/\pi$.

Der Rest des Kapitels ist wie folgt gegliedert. Im nächsten Abschnitt bestimmen wir die Ableitung der Summe über die negativen Eigenwerte eines linearen Operators $A - \lambda B$ bezüglich λ . Dies ist, wie eben angesprochen, eines der hauptsächlichen technischen Werkzeuge in diesem Kapitel. In Abschnitt 5.3 zeigen wir, dass die Bedingungen der verallgemeinerten Feynman-Hellmann-Sätze von Test-Funktionen, für welche die starke Scott-Vermutung gelten soll, erfüllt werden. In Abschnitt 5.4 leiten wir eine Majorante her (Behauptung 5.4.3), welche uns erlauben wird, das Weierstraßsche Majorantenkriterium anzuwenden. Dies ist entscheidend für den Beweis von Satz 5.1.3, um die Summe über die Drehimpulse mit den Grenzprozessen $\lim_{\lambda \rightarrow 0} \lim_{Z \rightarrow \infty}$ zu vertauschen. Darüberhinaus werden wir in diesem Abschnitt auch Satz 5.1.1 zeigen, da der Beweis sehr ähnlich zu dem von Behauptung 5.4.3 verläuft. Im letzten Abschnitt setzen wir schließlich alle Teile zusammen und beweisen die beiden Konvergenzresultate, Satz 5.1.2 und Satz 5.1.3.

5.2 Differenzierbarkeit der Summe negativer Eigenwerte

Im Folgenden beweisen wir verallgemeinerte Feynman–Hellmann-Theoreme. Wir beginnen mit der Formulierung eines Satzes mit „natürlichen“ Annahmen an die Operator-Störung. Im Anschluß werden wir dieses Theorem unter sanfteren Annahmen an die Störung verallge-

meinern. Diese Verallgemeinerungen werden wir schließlich anwenden, um die starke Scott-Vermutung in einem festen Drehimpulskanal zu beweisen.

Im Folgenden schreiben wir $A_- = -A\chi_{(-\infty,0)}(A)$, das heißt der Negativteil einer Größe ist positiv.

5.2.1 Differenzierbarkeit unter einer Spurklasse-Bedingung

Satz 5.2.1. *Sei A ein selbstadjungierter Operator, sodass A_- ein Spurklasse-Operator ist. Sei B ein nicht-negativer Operator und relativ Form-Spurklasse-beschränkt bezüglich A , das heißt es gibt eine hinreichend große Zahl $M > |\inf \text{spec}(A)|$, sodass $(A + M)^{-1/2}B(A + M)^{-1/2}$ in der Spurklasse ist. Dann erfüllen die einseitigen Ableitungen von*

$$\lambda \mapsto S(\lambda) := \text{Tr}(A - \lambda B)_-$$

die Relationen

$$\text{Tr } B\chi_{(-\infty,0)}(A) = D^- S(0) \leq D^+ S(0) = \text{Tr } B\chi_{(-\infty,0]}(A).$$

Inbesondere ist S bei $\lambda = 0$ genau dann differenzierbar, wenn $B|_{\ker A} = 0$.

Bemerkungen. (1) Aus der relativen Spurklasse-Beschränktheit folgt, dass die rechte Seite der Behauptung endlich ist. Sei dazu $P = \chi_{(-\infty,0]}(A)$, dann folgt aus der Zyklizität der Spur

$$\text{Tr } BP = \text{Tr}(P(A + M)) \left((A + M)^{-1/2}B(A + M)^{-1/2} \right) < \infty,$$

da $P(A + M)$ beschränkt ist.

(2) Aus dem Variationsprinzip folgt, dass S konvex ist. Seien dazu $t \in [0, 1]$ und $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$, dann gilt

$$\begin{aligned} S((1-t)\lambda_1 + t\lambda_2) &= \text{Tr}[(1-t)(A - \lambda_1 B) + t(A - \lambda_2 B)]_- \\ &\leq (1-t) \text{Tr}(A - \lambda_1 B)_- + t \text{Tr}(A - \lambda_2 B)_- = (1-t)S(\lambda_1) + tS(\lambda_2). \end{aligned}$$

Daraus folgt, dass die links- und rechtsseitigen Ableitungen von S tatsächlich existieren, siehe beispielsweise [159, Theorem 1.26].

(3) Wenn die untere Grenze des wesentlichen Spektrums echt positiv ist, ist das Resultat wohlbekannt und folgt aus dem klassischen Satz von Feynman–Hellmann (für jeden einzelnen Eigenwert und damit auch für die Summe über alle Eigenwerte). Dieses Resultat wird auch im Beweis verwendet. Der Punkt ist, dass man die Summe der negativen Eigenwerte auch dann ableiten darf, wenn die untere Grenze des wesentlichen Spektrums Null ist, sprich, in dem Fall, in welchem gewöhnliche Störungstheorie nicht (direkt) anwendbar ist.

Beweis. Schritt 1. Die Idee ist es, den Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung anzuwenden. Wir behaupten, dass für alle $\lambda \in \mathbb{R}$ der Operator $(A - \lambda B)_-$ in der Spurklasse ist und, dass $S(\lambda) := \text{Tr}(A - \lambda B)_-$ die Gleichheit

$$S(\lambda) - S(0) = \int_0^\lambda T(\lambda') d\lambda'$$

mit

$$T(\lambda) := \text{Tr } B\chi_{(-\infty,0)}(A - \lambda B)$$

erfüllt.

Per Voraussetzung ist $S(0) < \infty$. Da B relativ Form-Spurklasse-beschränkt bezüglich A ist, ist B insbesondere infinitesimal Form-beschränkt bezüglich A , siehe [144, Seite 369]. Daraus folgt insbesondere, dass $(A - \lambda B + M)^{-1/2}(A + M)^{1/2}$ für alle $\lambda \in \mathbb{R}$ beschränkt ist, wenn M hinreichend groß gewählt wird. Damit und mit dem gleichen Argument wie in der ersten Bemerkung zur Endlichkeit von $\text{Tr } B\chi_{(-\infty, 0]}(A)$ folgt, dass B auch relativ Form-Spurklasse-beschränkt bezüglich $(A - \lambda B + M)$ ist. Daher ist $T(\lambda)$ für alle $\lambda \in \mathbb{R}$ endlich. Insbesondere folgt daraus, dass das Integral $\int_0^\lambda T(\lambda') d\lambda'$ endlich ist.

Um zu zeigen, dass $(A - \lambda B)_-$ ein Operator der Spurklasse ist und die behauptete Formel für $S(\lambda)$ gilt, regularisieren wir $S(\lambda)$ und $T(\lambda)$. Dazu führen wir für $\mu \in (-\infty, 0) \cap \rho(A)$ die Funktionen

$$S_\mu(\lambda) := \text{Tr}(A - \lambda B - \mu)_- \quad \text{und} \quad T_\mu(\lambda) = \text{Tr } B\chi_{(-\infty, \mu)}(A - \lambda B)$$

ein. Hierbei bezeichnet $\rho(A)$ die Resolventenmenge von A . Da B insbesondere relativ kompakt ist und $\inf \sigma_{\text{ess}}(A) \geq 0$, hat $A - \lambda B$ nur endlich viele Eigenwerte unterhalb der Schwelle $\mu < 0$. Aus dem Feynman–Hellmann-Satz folgt, dass die Funktion $\lambda \mapsto S_\mu(\lambda)$ für alle $\lambda \in \mathbb{R}$, für die $\mu \notin \sigma_p(A - \lambda B)$ ist, differenzierbar ist und die Ableitung durch $T_\mu(\lambda)$ gegeben ist. Die Bedingung $\mu \notin \sigma_p(A - \lambda B)$ ist wegen des Birman–Schwinger-Prinzips äquivalent zur Bedingung $1/\lambda \notin \sigma(B^{1/2}(A - \mu)^{-1}B^{1/2})$. Da B relativ Form-kompakt bezüglich A ist, ist der Birman–Schwinger-Operator kompakt. Daraus folgt aber wiederum, dass die Bedingung $1/\lambda \notin \sigma(B^{1/2}(A - \mu)^{-1}B^{1/2})$ auf dem Komplement einer diskreten Menge wahr ist. Daher gilt für jedes $\lambda \in \mathbb{R}$

$$S_\mu(\lambda) = S_\mu(0) + \int_0^\lambda T_\mu(\lambda') d\lambda'.$$

Wir lassen nun $\mu \nearrow 0$ gehen. Da $\mu \mapsto S_\mu(0)$, beziehungsweise $\mu \mapsto T_\mu(\lambda')$, nicht-fallend mit endlichem Grenzwert $S(0)$, beziehungsweise endlichem und integrierbarem Grenzwert $T(\lambda')$, sind, folgt aus dem Satz der monotonen Konvergenz, dass auch der Grenzwert $\lim_{\mu \nearrow 0} S_\mu(\lambda) = S(\lambda)$ endlich ist und die behauptete Gleichheit erfüllt.

Schritt 2. Wir behaupten, dass

$$\limsup_{\lambda \searrow 0} T(\lambda) \leq \text{Tr } B\chi_{(-\infty, 0]}(A)$$

und

$$\liminf_{\lambda \nearrow 0} T(\lambda) \geq \text{Tr } B\chi_{(-\infty, 0)}(A).$$

Aus diesen Ungleichungen und Schritt 1 folgt

$$\text{Tr } B\chi_{(-\infty, 0)}(A) \leq D^- S(0) \leq D^+ S(0) \leq \text{Tr } B\chi_{(-\infty, 0]}(A). \quad (5.3)$$

Für $\varepsilon > 0$ definieren wir die „ausgeschmierten“ charakteristischen Funktionen

$$f_\varepsilon^+(\alpha) = \begin{cases} 1 & \text{für } \alpha \in (-\infty, 0] \\ 1 - \alpha/\varepsilon & \text{für } \alpha \in [0, \varepsilon] \\ 0 & \text{für } \alpha \in [\varepsilon, \infty) \end{cases} \quad \text{und} \quad f_\varepsilon^-(\alpha) = \begin{cases} 1 & \text{für } \alpha \in (-\infty, -\varepsilon] \\ -\alpha/\varepsilon & \text{für } \alpha \in [-\varepsilon, 0] \\ 0 & \text{für } \alpha \in [0, \infty) \end{cases}.$$

Offenbar ist $f_\varepsilon^- \leq \chi_{(-\infty, 0)} \leq f_\varepsilon^+$ und daher

$$\text{Tr } Bf_\varepsilon^-(A - \lambda B) \leq T(\lambda) \leq \text{Tr } Bf_\varepsilon^+(A - \lambda B). \quad (5.4)$$

Wir behaupten, dass für alle $\varepsilon > 0$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \operatorname{Tr} B f_{\varepsilon}^{\pm}(A - \lambda B) = \operatorname{Tr} B f_{\varepsilon}^{\pm}(A) \quad (5.5)$$

und

$$\limsup_{\varepsilon \searrow 0} \operatorname{Tr} B f_{\varepsilon}^{+}(A) = \operatorname{Tr} B \chi_{(-\infty, 0]}(A), \quad \liminf_{\varepsilon \searrow 0} \operatorname{Tr} B f_{\varepsilon}^{-}(A) = \operatorname{Tr} B \chi_{(-\infty, 0)}(A) \quad (5.6)$$

gelten. Sobald wir diese Grenzwerte gezeigt haben, können wir zuerst $\lambda \rightarrow 0$ und dann $\varepsilon \searrow 0$ in (5.4) gehen lassen, woraus die Behauptung dieses Schritts folgt.

Um (5.5) zu zeigen, schreiben wir

$$\operatorname{Tr} B f_{\varepsilon}^{\pm}(A - \lambda B) = \operatorname{Tr} C K(\lambda) g_{\varepsilon}^{\pm}(A - \lambda B) K(\lambda)^*,$$

wobei $C = (A + M)^{-1/2} B (A + M)^{-1/2}$, $K(\lambda) = (A + M)^{1/2} (A - \lambda B + M)^{-1/2}$ und $g_{\varepsilon}^{\pm}(\alpha) = (\alpha + M) f_{\varepsilon}^{\pm}(\alpha)$. Da $A - \lambda B$ im Norm-Resolventen-Sinne für $\lambda \rightarrow 0$ gegen A konvergiert (nach [142, Theorem VIII.25]) und die g_{ε}^{\pm} stetig sind, konvergiert $g_{\varepsilon}^{\pm}(A - \lambda B) \rightarrow g_{\varepsilon}^{\pm}(A)$ in Norm, siehe [142, Theorem VIII.20]. Darüberhinaus konvergiert $K(\lambda)^*$ stark gegen die Identität, denn für $\varphi \in \operatorname{ran}((A + M)^{-1/2})$ und $\psi = (A + M)^{1/2} \varphi \in \mathcal{H}$ (dem zugrunde liegenden Hilbertraum) ist

$$\begin{aligned} & \left\| ((A - \lambda B + M)^{-1/2} - (A + M)^{-1/2}) (A + M)^{1/2} \varphi \right\| \\ &= \left\| ((A - \lambda B + M)^{-1/2} - (A + M)^{-1/2}) \psi \right\| \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Diese Konvergenz gilt, da $A - \lambda B$ insbesondere im starken Resolventen-Sinne gegen A konvergiert. Aus [142, Theorem VIII.20] folgt, dass jede stetige und beschränkte Funktion $f(A - \lambda B)$ stark gegen $f(A)$ konvergiert. Wählt man $M = 1 + |\inf \operatorname{spec}(A - \lambda B)|$ für $\lambda > 0$ und $M = 1 + |\inf \operatorname{spec}(A)|$ für $\lambda < 0$ sowie $\tilde{\theta}$ als ausgeglättete Heaviside-Funktion und

$$f(\alpha) = (\alpha + M)^{-1/2} \tilde{\theta}(\alpha - (1 - M))$$

folgt (5.7). Für allgemeines $\varphi \in \mathcal{H}$ sei $\varphi_n := \chi_{(-\infty, n)}(A) \varphi \in \mathcal{D}(A)$. Dann ist

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \lim_{n \rightarrow \infty} \left\| ((A - \lambda B + M)^{-1/2} - (A + M)^{-1/2}) (A + M)^{1/2} \varphi_n \right\| = 0,$$

wobei wir die Grenzwerte vertauscht haben, was erlaubt ist, da $\|K(\lambda)^*\|$ gleichmäßig in λ beschränkt ist, da B infinitesimal Form-beschränkt bezüglich A ist.

Sei nun $C = \sum_n c_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$ die Singulärwertzerlegung von C . Mit der Zyklizität der Spur, der Norm-Konvergenz $g_{\varepsilon}^{\pm}(A - \lambda B) \rightarrow g_{\varepsilon}^{\pm}(A)$ und der starken (und insbesondere schwachen) Operator-Konvergenz $K(\lambda)^* \rightarrow 1$, erhalten wir schließlich mit dem Satz der majorisierten Konvergenz (da $K(\lambda)$ und $g_{\varepsilon}^{\pm}(A - \lambda B)$ gleichmäßig in λ beschränkt sind und C ein Spurklasse-Operator ist)

$$\begin{aligned} & \lim_{\lambda \rightarrow 0} \operatorname{Tr}(C K(\lambda) g_{\varepsilon}^{\pm}(A - \lambda B) K(\lambda)^*) \\ &= \lim_{\lambda \rightarrow 0} \sum_n c_n \cdot (K(\lambda)^* \psi_n, g_{\varepsilon}^{\pm}(A - \lambda B) K(\lambda)^* \psi_n) \\ &= \sum_n c_n (\psi_n, g_{\varepsilon}^{\pm}(A) \psi_n) = \operatorname{Tr}(C g_{\varepsilon}^{\pm}(A)) = \operatorname{Tr} B f_{\varepsilon}^{\pm}(A). \end{aligned}$$

Dies zeigt die Konvergenz (5.5).

Um (5.6) zu zeigen, schreiben wir ähnlich

$$\mathrm{Tr}(Bf_\varepsilon^\pm(A)) = \int_{\mathbb{R}} g_\varepsilon^\pm(\alpha) d \left(\sum_n c_n(\psi_n, E(\alpha)\psi_n) \right)$$

mit derselben Singulärwertzerlegung $C = \sum_n c_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$ wie eben und dem Spektralmaß dE von A . Wir bemerken, dass die Funktionen g_ε^+ beziehungsweise g_ε^- auf dem Träger von dE beschränkt sind und für $\varepsilon \searrow 0$ punktweise gegen $(\alpha + M)\chi_{(-\infty,0]}(\alpha)$, beziehungsweise $(\alpha + M)\chi_{(-\infty,0)}(\alpha)$ konvergieren. Da $d \sum_n c_n(\psi_n, E(\alpha)\psi_n)$ ein endliches Maß ist, folgt aus dem Satz der majorisierten Konvergenz

$$\lim_{\varepsilon \searrow 0} \mathrm{Tr} Bf_\varepsilon^+(A) = \int_{\mathbb{R}} (\alpha + M)\chi_{(-\infty,0]}(\alpha) d \left(\sum_n c_n(\psi_n, E(\alpha)\psi_n) \right) = \mathrm{Tr} B\chi_{(-\infty,0]}(A),$$

beziehungsweise

$$\lim_{\varepsilon \searrow 0} \mathrm{Tr} Bf_\varepsilon^-(A) = \int_{\mathbb{R}} (\alpha + M)\chi_{(-\infty,0)}(\alpha) d \left(\sum_n c_n(\psi_n, E(\alpha)\psi_n) \right) = \mathrm{Tr} B\chi_{(-\infty,0)}(A).$$

Dies zeigt (5.6) und damit die Behauptung dieses Schritts.

Schritt 3. Wir zeigen nun, dass die linke Ungleichung in (5.3) tatsächlich eine Gleichheit ist. Wegen des Variationsprinzips sind die im ersten Schritt definierten Funktionen S_μ konvex und konvergieren für $\mu \nearrow 0$ punktweise gegen S . Daraus folgt mit [159, Theorem 1.27]

$$D^-S(0) \leq \liminf_{\mu \nearrow 0} D^-S_\mu(0).$$

Aus gewöhnlicher Störungstheorie (sprich, wegen des Feynman–Hellmann-Satzes) ist bekannt, dass

$$D^-S_\mu(0) = T_\mu(0).$$

Aus monotoner Konvergenz folgt

$$\lim_{\mu \nearrow 0} T_\mu(0) = \mathrm{Tr} B\chi_{(-\infty,0)}(A),$$

woraus schließlich $D^-S(0) \leq \mathrm{Tr} B\chi_{(-\infty,0)}(A)$ folgt.

Schritt 4. Schließlich zeigen wir, dass die rechte Ungleichung in (5.3) ebenfalls eine Gleichheit ist. Wir kürzen wieder $P := \chi_{(-\infty,0]}(A)$ ab. Wegen des Variationsprinzips ist

$$-\mathrm{Tr}(A - \lambda B)_- \leq \mathrm{Tr}(A - \lambda B)P.$$

Daher ist

$$S(\lambda) - S(0) \geq \lambda \mathrm{Tr} BP$$

und deshalb

$$D^+S(0) = \lim_{\lambda \searrow 0} \frac{S(\lambda) - S(0)}{\lambda} \geq \mathrm{Tr} BP$$

wie behauptet. □

5.2.2 Eine Verallgemeinerung

Die Bedingung, dass B relativ Form-Spurklasse-beschränkt bezüglich A ist, ist für unsere Anwendung zu stark, in der wir $A = C_\ell^H$ und $B = U$ wählen werden. Wegen Katos Ungleichung genügt es die relative Spurklasse-Bedingung bezüglich C_ℓ zu verifizieren. Allerdings ist $(C_\ell + 1)^{-1/2}U(C_\ell + 1)^{-1/2}$ im Allgemeinen kein Spurklasse-Operator, da $\int_0^\infty (k+1)^{-1} dk$ im Unendlichen logarithmisch divergiert, siehe insbesondere den Beweis von Behauptung 5.3.10 später.

In diesem Unterabschnitt stellen wir daher zwei Verallgemeinerungen von Satz 5.2.1 vor, in der die relative Spurklasse-Bedingung etwas abgemildert wird. Wir verlangen lediglich, dass B relativ Form-Spurklasse-beschränkt bezüglich $(A+M)^{2s}$ für ein $s \in (1/2, 1]$ ist. Dabei kann s beliebig nahe an $1/2$ sein. Allerdings benötigen wir dann noch die weitere Annahme, dass die Operatoren $(A+M)^s$ und $(A-\lambda B+M)^s$ vergleichbar sind. Diese Eigenschaft kann oft eher schwer verifiziert werden, weshalb wir im Anschluß eine weitere Verallgemeinerung von Satz 5.2.1 vorstellen. Hier muss der Operator B^s durch eine kleinere Potenz des Operators $(A+M)^{s'}$ (mit $1/2 < s' < s$) kontrolliert werden können. In Anwendungen ist diese Annahme mit Hilfe klassischer Sobolew-Ungleichungen deutlich leichter verifizierbar.

Satz 5.2.2. *Sei A ein selbstadjungierter Operator, sodass A_- ein Spurklasse-Operator ist. Sei $B \geq 0$ ein bezüglich A relativ Form-beschränkter Operator. Angenommen, es gibt $1/2 \leq s \leq 1$, sodass für eine hinreichend große Zahl $M > 0$ sowohl*

$$(A+M)^{-s}B(A+M)^{-s} \quad \text{ein Spurklasse-Operator ist,} \quad (5.8)$$

als auch

$$\limsup_{\lambda \rightarrow 0} \|(A+M)^s(A-\lambda B+M)^{-s}\| < \infty \quad (5.9)$$

gilt. Dann sind die Aussagen in Satz 5.2.1 wahr.

Wir bezeichnen mit $\|\cdot\|_1$ die Spurnorm.

Beweis. Wir folgen den Schritten im Beweis von Satz 5.2.1. Zu Beginn des ersten Schritts mussten wir zeigen, dass $T(\lambda) = \text{Tr } B\chi_{(-\infty,0)}(A-\lambda B)$ endlich und gleichmäßig beschränkt für λ in einer Umgebung von Null ist. Dies folgt aus

$$\limsup_{\lambda \rightarrow 0} \|(A-\lambda B+M)^{-s}B(A-\lambda B+M)^{-s}\|_1 < \infty \quad (5.10)$$

und der Tatsache, dass $(A-\lambda B+M)^{2s}\chi_{(-\infty,0)}(A-\lambda B)$ (für hinreichend kleine λ) gleichmäßig in λ beschränkt ist. Die Endlichkeit von (5.10) folgt wiederum aus den Bedingungen (5.8) und (5.9).

Im ersten Schritt mussten wir außerdem zeigen, dass jedes gegebene $\mu \in (-\infty, 0) \cap \rho(A)$ kein Eigenwert von $A-\lambda B$ für alle $\lambda \in \mathbb{R}$ in einer Umgebung um Null, abseits einer diskreten Menge, ist. Wir verifizieren dies nun unter den aktuellen Bedingungen. Dazu bemerken wir zunächst, dass die Differenz der gestörten und ungestörten Resolvente durch

$$(A-\lambda B+M)^{-1} - (A+M)^{-1} = (A-\lambda B+M)^{-1+s}D(\lambda)E(\lambda)(A+M)^{-1+s}$$

ausgedrückt werden kann, wobei

$$D(\lambda) = (A-\lambda B+M)^{-s}(A+M)^s$$

und

$$E(\lambda) = \lambda(A + M)^{-s}B(A + M)^{-s}.$$

Wegen Voraussetzung (5.9) ist $D(\lambda)$ beschränkt und wegen Voraussetzung (5.8) ist $E(\lambda)$ ein Spurklasse-Operator. Da $s \leq 1$, folgt daraus, dass $(A - \lambda B + M)^{-1} - (A + M)^{-1}$ ein Spurklasse-Operator ist und somit insbesondere kompakt ist. Aus dem Satz von Weyl folgt daher, dass das negative Spektrum von $A - \lambda B$ diskret ist. Da B relativ Form-beschränkt bezüglich A ist, ist $A - \lambda B$ eine analytische Familie vom Typ (B) [101, Kapitel Sieben, Theorem 4.8]. Somit können die Eigenwerte von $A - \lambda B$ zumindest lokal als analytische Funktionen von λ beschrieben werden. Da μ per Voraussetzung kein Eigenwert von A ist, kann es somit *lediglich eine diskrete Menge* von λ 's nahe Null geben, sodass μ ein Eigenwert von $A - \lambda B$ ist. Dies war aber gerade die Behauptung.

Wir kommen nun zum zweiten Schritt. Dort mussten wir (5.5) zeigen. Wir schreiben wieder

$$\operatorname{Tr} B f_{\varepsilon}^{\pm}(A - \lambda B) = \operatorname{Tr} C K(\lambda) g_{\varepsilon}^{\pm}(A - \lambda B) K(\lambda)^*,$$

wobei jetzt $C = (A + M)^{-s}B(A + M)^{-s}$, $K(\lambda) = (A + M)^s(A - \lambda B + M)^{-s}$ und $g_{\varepsilon}^{\pm}(\alpha) = (\alpha + M)^{2s} f_{\varepsilon}^{\pm}(\alpha)$ sind. Aus dem gleichen Grund wie zuvor konvergiert $g_{\varepsilon}^{\pm}(A - \lambda B)$ gegen $g_{\varepsilon}^{\pm}(A)$ in Norm. Die starke Konvergenz $K(\lambda)^* \rightarrow 1$ folgt ebenfalls wie zuvor (zunächst gilt die Konvergenz nur auf Elementen in $\operatorname{ran}(A + M)^{-s}$) mit der Bemerkung, dass $K(\lambda)^*$ wegen der Bedingung (5.9) gleichmäßig in λ beschränkt ist für λ nahe Null. Daher konvergiert auch $K(\lambda) g_{\varepsilon}^{\pm}(A - \lambda B) K(\lambda)^* \rightarrow g_{\varepsilon}^{\pm}(A)$ wie zuvor im schwachen Operator-Sinne. Da per Voraussetzung (5.8) C ein Operator der Spurklasse ist, folgt wieder (5.5).

Die Schritte 3 und 4 bleiben schließlich unverändert. Dies schließt den Beweis von Satz 5.2.2. \square

Wir kommen nun zur zweiten Verallgemeinerung von Satz 5.2.1.

Satz 5.2.3. *Sei A ein selbstadjungierter Operator, sodass A_- in der Spurklasse ist und B ein nicht-negativer Operator. Angenommen, es gibt Zahlen $\max\{1/2, s'\} < s < 1$, sodass für ein $M > 0$ die Bedingung (5.8) (mit demselben s) erfüllt ist und eine Konstante $a > 0$, sodass*

$$B^{2s} \leq a(A + M)^{2s'} \tag{5.11}$$

gilt. Dann sind die Aussagen in Satz 5.2.1 wahr.

Die Annahme $s' < s$ ist für unseren Beweis entscheidend (zumindest für ein Vorzeichen von λ). Allerdings wissen wir nicht, ob sie auch notwendig für den Satz ist.

Wir bemerken, dass (5.11) mit der Hölder- und der Young-Ungleichung impliziert, dass B infinitesimal Form-beschränkt bezüglich A ist. Dies sieht man beispielsweise wie folgt. Ist $d\mu$ ein normiertes, nicht-negatives Maß, dann gilt

$$\int x^{2s'} d\mu(x) \leq \left(\int x^{2s} d\mu(x) \right)^{\frac{s'}{s}} \left(\int d\mu(x) \right)^{1 - \frac{s'}{s}}.$$

Daher gibt es mit dem Spektralsatz für alle $\kappa \in (0, 1)$ ein $M_{\kappa} > 0$, sodass

$$(\psi, B^{2s} \psi) \leq a(\psi, (A + M)^{2s'} \psi) \leq a(\psi, (A + M)^{2s} \psi)^{\frac{s'}{s}} \leq \kappa(\psi, (A + M_{\kappa})^{2s} \psi).$$

Insbesondere folgt daraus, dass $A - \lambda B$ im Sinne quadratischer Formen für alle $\lambda \in \mathbb{R}$ definierbar ist.

Wir werden Satz 5.2.3 aus Satz 5.2.2 folgern, indem wir zeigen, dass Bedingung (5.11) die Bedingung (5.9) impliziert. An dieser Stelle ist $s' < s$ entscheidend. Wir formulieren dieses Argument als separates Lemma, dessen Aussage und Beweis von Neidhardt und Zagrebnov [134] inspiriert sind.

Lemma 5.2.4. *Sei A ein selbstadjungierter Operator mit $\inf \operatorname{spec} A > 0$ und sei B ein Operator, welcher $B \geq 0$ oder $B \leq 0$ erfüllt. Angenommen, es gibt Zahlen $\max\{1/2, \beta\} < \alpha < 1$, sodass*

$$\| |B|^\alpha A^{-\beta} \| < \infty$$

gilt. Falls es eine Konstante C gibt, die nur von α und β abhängt, die $M \geq C \| |B|^\alpha A^{-\beta} \|^{1/(\alpha-\beta)}$ erfüllt, dann gelten die Ungleichungen

$$\frac{1}{2}(A + M)^{2\alpha} \leq (A + B + M)^{2\alpha} \leq 2(A + M)^{2\alpha}.$$

Die Konstanten $1/2$ und 2 können durch beliebige Konstanten $1 - \varepsilon$ und $1 + \varepsilon$ mit $\varepsilon > 0$ auf Kosten der Konstanten C ersetzt werden, welche dann von ε abhängen wird.

Dieses Lemma impliziert sofort Satz 5.2.3.

Beweis von Satz 5.2.3. Wir verifizieren die Annahmen in Satz 5.2.2 mit Hilfe von Lemma 5.2.4, wobei A durch $A + M$ sowie B durch $-\lambda B$ ersetzt werden und $\alpha = s$ sowie $\beta = s'$ gesetzt werden. Das Anwenden des Lemmas zeigt, dass (5.9) durch (5.11) impliziert wird. \square

Bevor wir zum Beweis von Lemma 5.2.4 kommen, bemerken wir, dass das Lemma zur Verifikation von (5.9) im intuitiv schwierigeren Fall $\lambda > 0$ tatsächlich nicht nötig ist. Wir zeigen direkt

Lemma 5.2.5. *Sei A ein nach unten beschränkter, selbstadjungierter Operator, B ein nicht-negativer Operator und $M > |\inf \operatorname{spec} A|$. Angenommen, es gibt $a > 0$ und $s \in [1/2, 1]$, sodass $B^{2s} \leq a(A + M)^{2s}$. Dann gilt für alle $M > \left| \inf \operatorname{spec} \left(A - (2^{2s-1}a)^{-1/(2s)} B \right) \right|$ und $0 < \lambda < (2^{2s-1}a)^{-1/(2s)}$*

$$(A + M)^{2s} \leq (1 - 2^{2s-1}a\lambda^{2s})^{-1} 2^{2s-1}(A - \lambda B + M)^{2s}.$$

Insbesondere folgt daraus, dass die behauptete Formel für $D^+S(0)$ aus Satz 5.2.3 unter der (erwartbaren und schwächeren) Bedingung $B^{2s} \leq a(A + M)^{2s}$ gilt.

Beweis. Aus Operatorkonvexität von $x \mapsto x^{2s}$ mit $2s \in [1, 2]$ (siehe beispielsweise Bhatia [11, Theorem V.2.9 und Theorem V.2.10]) folgt

$$\begin{aligned} (A + M)^{2s} &= (A + M - \lambda B + \lambda B)^{2s} \leq 2^{2s-1} \left((A - \lambda B + M)^{2s} + \lambda^{2s} B^{2s} \right) \\ &\leq 2^{2s-1} (A - \lambda B + M)^{2s} + 2^{2s-1} a \lambda^{2s} (A + M)^{2s}. \end{aligned}$$

Für $\lambda < (2^{2s-1}a)^{-1/(2s)}$ folgt daraus

$$(A + M)^{2s} \leq (1 - 2^{2s-1}a\lambda^{2s})^{-1} 2^{2s-1}(A - \lambda B + M)^{2s},$$

was behauptet war. \square

Wir vermuten, dass für hinreichend kleines $\lambda < 0$ und ansonsten gleichen Voraussetzungen, dieses Lemma immer noch wahr ist.

Wir stellen nun den Beweis von Lemma 5.2.4 vor.

Beweis von Lemma 5.2.4. Schritt 1. Wir zeigen, dass es unter den zusätzlichen Bedingungen

$$\| |B|^\alpha A^{-\alpha} \| < 1 \quad (5.12)$$

und

$$A + B > 0, \quad (5.13)$$

einen Operator S gibt, sodass

$$(A + B)^{-\alpha} = (1 - S)A^{-\alpha}. \quad (5.14)$$

Zudem erfüllt die Operatornorm von S die Schranke

$$\|S\| \leq C_{\alpha,\beta}^{(1)} \frac{1}{(\inf \operatorname{spec} A)^{\alpha-\beta}} \frac{\| |B|^\alpha A^{-\beta} \| \| |B|^\alpha A^{-\alpha} \|^{(1-\alpha)/\alpha}}{1 - \| |B|^\alpha A^{-\alpha} \|^{1/\alpha}}.$$

Um dies zu zeigen, definieren wir für $t > 0$ die verallgemeinerten Birman–Schwinger-Operatoren

$$Y(t) := (A + t)^{-\alpha} |B| (A + t)^{-1+\alpha}.$$

Wir werden in Kürze zeigen, dass Bedingung (5.12) die Invertierbarkeit der Operatoren $1 \pm Y(t)$ impliziert. Akzeptiert man dies für den Moment, sieht man, dass für $t > 0$

$$(A + B + t)^{-1} = (A + t)^{-1} \mp (A + t)^{-1+\alpha} Y(t) (1 \pm Y(t))^{-1} (A + t)^{-\alpha},$$

wobei das obere Vorzeichen gewählt wird, wenn $B \geq 0$ und das untere Vorzeichen gewählt wird, wenn $B \leq 0$. Im Folgenden verwenden wir, dass für alle Zahlen $h > 0$ die Gleichheit

$$h^{-\alpha} = c_\alpha \int_0^\infty (h + t)^{-1} t^{-\alpha} dt \quad \text{mit } c_\alpha = \pi^{-1} \sin(\pi\alpha)$$

mit $\alpha < 1$ gilt. Aus dem Spektralsatz und der obigen Beobachtung zur Differenz von $(A + t)^{-1} - (A + B + t)^{-1}$ folgt

$$\begin{aligned} A^{-\alpha} - (A + B)^{-\alpha} &= c_\alpha \int_0^\infty ((A + t)^{-1} - (A + B + t)^{-1}) t^{-\alpha} dt \\ &= \pm c_\alpha \int_0^\infty (A + t)^{-1+\alpha} Y(t) (1 \pm Y(t))^{-1} (A + t)^{-\alpha} t^{-\alpha} dt. \end{aligned}$$

Somit gilt (5.14) mit dem Operator S (durch Anwenden von A^α von rechts auf beiden Seiten der letzten Gleichung), der durch

$$S := \pm c_\alpha \int_0^\infty (A + t)^{-1+\alpha} Y(t) (1 \pm Y(t))^{-1} (1 + tA^{-1})^{-\alpha} t^{-\alpha} dt \quad (5.15)$$

definiert ist. Offenbar ist

$$\|S\| \leq c_\alpha \int_0^\infty \left\| (A + t)^{-1+\beta} \right\| \left\| (A + t)^{\alpha-\beta} Y(t) \right\| \left\| (1 \pm Y(t))^{-1} \right\| t^{-\alpha} dt. \quad (5.16)$$

Wir beschränken nun die drei Terme des Integranden separat. Zunächst ist

$$\begin{aligned}\|Y(t)\| &\leq \|(A+t)^{-\alpha}|B|^\alpha\| \cdot \| |B|^{1-\alpha}(A+t)^{-1+\alpha} \| \\ &\leq \|A^{-\alpha}|B|^\alpha\| \cdot \| |B|^{1-\alpha}A^{-1+\alpha} \| \\ &\leq \| |B|^\alpha A^{-\alpha} \|^{1/\alpha} .\end{aligned}$$

Im ersten Schritt haben wir (mit $t > 0$)

$$|B|^\alpha(A+t)^{-2\alpha}|B|^\alpha \leq |B|^\alpha A^{-2\alpha}|B|^\alpha$$

verwendet. Im letzten Schritt haben wir $|B|^{2\alpha} \leq \| |B|^\alpha A^{-\alpha} \| A^{2\alpha}$ sowie die Operatormonotonie von $x \mapsto x^{(1-\alpha)/\alpha}$ mit $1/2 \leq \alpha \leq 1$ verwendet. Wegen Annahme (5.12) ist also $\|Y(t)\| < 1$, weshalb $1 \pm Y(t)$ invertierbar ist mit

$$\|(1 \pm Y(t))^{-1}\| \leq (1 - \|Y(t)\|)^{-1} \leq \left(1 - \| |B|^\alpha A^{-\alpha} \|^{1/\alpha}\right)^{-1} .$$

Als Nächstes beschränken wir in ähnlicher Weise

$$\begin{aligned}\|(A+t)^{\alpha-\beta}Y(t)\| &\leq \|(A+t)^{-\beta}|B|^\alpha\| \cdot \|(A+t)^{-1+\alpha}|B|^{1-\alpha}\| \\ &\leq \|A^{-\beta}|B|^\alpha\| \cdot \|A^{-1+\alpha}|B|^{1-\alpha}\| \\ &\leq \| |B|^\alpha A^{-\beta} \| \cdot \| |B|^\alpha A^{-\alpha} \|^{(1-\alpha)/\alpha} .\end{aligned}$$

Schließlich ist

$$\|(A+t)^{-1+\beta}\| \leq (\inf \operatorname{spec} A + t)^{-1+\beta} .$$

Setzt man diese Schranken in (5.16) ein, folgt

$$\begin{aligned}\|S\| &\leq c_\alpha \frac{\| |B|^\alpha A^{-\beta} \| \cdot \| |B|^\alpha A^{-\alpha} \|^{(1-\alpha)/\alpha}}{1 - \| |B|^\alpha A^{-\alpha} \|^{1/\alpha}} \int_0^\infty \frac{dt}{t^\alpha (\inf \operatorname{spec} A + t)^{1-\beta}} \\ &= C_{\alpha,\beta}^{(1)} \frac{1}{(\inf \operatorname{spec} A)^{\alpha-\beta}} \cdot \frac{\| |B|^\alpha A^{-\beta} \| \cdot \| |B|^\alpha A^{-\alpha} \|^{(1-\alpha)/\alpha}}{1 - \| |B|^\alpha A^{-\alpha} \|^{1/\alpha}} .\end{aligned}$$

Wir betonen, dass die Voraussetzung $\beta < \alpha$ an dieser Stelle entscheidend ist, damit das Integral konvergiert. Dies zeigt die Behauptung in Schritt 1.

Schritt 2. Die Aussage des Lemmas wird folgen, indem wir Schritt 1 anwenden, wobei A durch $A + M$ (mit einer hinreichend großen Konstante M) ersetzt wird.

Wir bemerken zunächst

$$\| |B|^\alpha (A + M)^{-\beta} \| \leq \| |B|^\alpha A^{-\beta} \| < \infty . \quad (5.17)$$

Darüberhinaus behaupten wir die Gültigkeit der Schranke

$$\| |B|^\alpha (A + M)^{-\alpha} \| \leq C_{\alpha,\beta}^{(2)} \frac{\| |B|^\alpha A^{-\beta} \|}{M^{\alpha-\beta}} . \quad (5.18)$$

In der Tat erhält man mit dem Spektralsatz

$$\begin{aligned} |B|^{2\alpha} &\leq \left\| |B|^\alpha A^{-\beta} \right\|^2 A^{2\beta} \leq \left\| |B|^\alpha A^{-\beta} \right\|^2 \left(\sup_{a \geq 0} \frac{a^{2\beta}}{(a+M)^{2\alpha}} \right) (A+M)^{2\alpha} \\ &= \left(\left\| |B|^\alpha A^{-\beta} \right\| \frac{C_{\alpha,\beta}^{(2)}}{M^{\alpha-\beta}} \right)^2 (A+M)^{2\alpha}, \end{aligned} \quad (5.19)$$

was (5.18) zeigt.

Aus (5.18) folgt, dass Bedingung (5.12) des ersten Schritts (mit $A+M$ anstatt A) erfüllt ist, wenn

$$M > \left(C_{\alpha,\beta}^{(2)} \left\| |B|^\alpha A^{-\beta} \right\| \right)^{1/(\alpha-\beta)},$$

was wir im Folgenden annehmen. Ungleichung (5.19), zusammen mit Operatormonotonie von $x \mapsto x^{1/(2\alpha)}$ (mit $\alpha \geq 1/2$), impliziert im Fall $B \leq 0$ die Form-Ungleichung

$$B \geq - \left(\left\| |B|^\alpha A^{-\beta} \right\| \frac{C_{\alpha,\beta}^{(2)}}{M^{\alpha-\beta}} \right)^{1/\alpha} (A+M).$$

Daraus folgt

$$A+M+B \geq \left(1 - \left(\left\| |B|^\alpha A^{-\beta} \right\| \frac{C_{\alpha,\beta}^{(2)}}{M^{\alpha-\beta}} \right)^{1/\alpha} \right) (A+M) > 0.$$

Dies zeigt, dass die Bedingung (5.13) in Schritt 1 (mit $A+M$ anstatt A) erfüllt ist. Für $B \geq 0$ ist (5.13) trivialerweise erfüllt.

Wendet man das Ergebnis aus Schritt 1 an, findet man

$$(A+M+B)^{-\alpha} = (1-S_M)(A+M)^{-\alpha} = (A+M)^{-\alpha}(1-S_M^*),$$

wobei S_M wie in (5.15) (mit $A+M$ anstatt A) definiert ist und die Schranke

$$\|S_M\| \leq \frac{C_{\alpha,\beta}^{(1)}}{M^{(\alpha-\beta)/\alpha}} \frac{\left(C_{\alpha,\beta}^{(2)} \right)^{(1-\alpha)/\alpha} \left\| |B|^\alpha A^{-\beta} \right\|^{1/\alpha}}{1 - \left(C_{\alpha,\beta}^{(2)} \right)^{1/\alpha} \left\| |B|^\alpha A^{-\beta} \right\|^{1/\alpha} M^{-(\alpha-\beta)/\alpha}}$$

erfüllt. Daher gibt es eine Konstante C , die nur von α und β abhängt, sodass

$$\|S_M\| \leq 1 - \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \text{falls } M \geq C \left\| |B|^\alpha A^{-\beta} \right\|^{1/(\alpha-\beta)}.$$

Da $1 - 1/\sqrt{2} < \sqrt{2} - 1$, folgt daraus

$$\begin{aligned} (A+B+M)^{-2\alpha} &= (A+M)^{-\alpha}(1-S_M^*)(1-S_M)(A+M)^{-\alpha} \\ &\leq \|1-S_M\|^2 (A+M)^{-2\alpha} \\ &\leq (1+\|S_M\|)^2 (A+M)^{-2\alpha} \\ &\leq 2(A+M)^{-2\alpha}. \end{aligned}$$

Darüberhinaus ist

$$\begin{aligned}
(A + M)^{-2\alpha} &= (A + B + M)^{-\alpha} (1 - S_M^*)^{-1} (1 - S_M)^{-1} (A + B + M)^{-\alpha} \\
&\leq \left\| (1 - S_M)^{-1} \right\|^2 (A + B + M)^{-2\alpha} \\
&\leq (1 - \|S_M\|)^{-2} (A + B + M)^{-2\alpha} \\
&\leq 2(A + B + M)^{-2\alpha}.
\end{aligned}$$

Dies schließt den Beweis dieses Lemmas. \square

5.3 Test-Funktionen und Resultate für festen Drehimpuls

In diesem Abschnitt wenden wir die Sätze 5.2.2 und 5.2.3 an. Dabei spielt A die Rolle des Chandrasekhar-Operators C_ℓ^H , wohingegen B die Rolle der Störung U übernehmen wird. Satz 5.2.2 wird für die Behandlung der Coulomb-Singularität und Satz 5.2.3 für die Behandlung des $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$ -Teils des Potentials verwendet. Unser Ziel ist es, die Annahmen der jeweiligen Sätze zu verifizieren.

Wir führen die Notation

$$\begin{aligned}
p_\ell &:= \sqrt{-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}} \\
C_\ell &:= \sqrt{p_\ell^2 + 1} - 1
\end{aligned}$$

ein und erinnern an die Definition von

$$C_\ell^H = C_\ell - \frac{\gamma}{r} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}_+, dr),$$

wobei $\gamma \in (0, 2/\pi)$ eine feste Konstante ist. Darüberhinaus bezeichnet ρ_ℓ^H die Summe der Quadrate der normierten Eigenfunktionen von C_ℓ^H , siehe (5.1). Wir erinnern an einige grundlegende Eigenschaften von C_ℓ^H .

Lemma 5.3.1. *Seien $\ell \in \mathbb{N}_0$ und $\gamma \leq 2/\pi$, dann ist C_ℓ^H von unten beschränkt und es gilt $\text{Tr}(C_\ell^H)_- < \infty$. Ist $\gamma < 2/\pi$, dann ist Null kein Eigenwert von C_ℓ^H .*

Beweis. Die untere Beschränktheit folgt aus

$$C_\ell^H \geq p_\ell - 1 - \frac{\gamma}{r} \geq p_0 - 1 - \frac{\gamma}{r} \geq -1,$$

wobei die letzte Ungleichung aus Katos Ungleichung [101, Kapitel Fünf, Formel (5.33)] folgt. Die Endlichkeit von $\text{Tr}(C_\ell^H)_-$ wurde in [69, Lemma 1] gezeigt. Die Tatsache, dass Null kein Eigenwert von C_ℓ^H ist, wurde von Herbst in [87, Theorem 2.3] gezeigt. \square

Im nächsten Unterabschnitt fahren wir mit der Definition der Klasse der Test-Funktionen $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$, für die die Scott-Vermutung für festes ℓ gilt, fort. Nach der Definition geben wir einige konkrete Beispiele von Funktionen in dieser Klasse und nennen die Hauptergebnisse dieses Abschnitts. Diese werden dann im letzten Unterabschnitt bewiesen.

5.3.1 Test-Funktionen für festen Drehimpuls

Die Test-Funktionen, für die Satz 5.1.2 gilt, sind für $s \geq 1/2$ und $\delta \in [0, 2s - 1]$ in

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)} &:= \{W \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+) : \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}} < \infty\} \\ \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}} &:= \sup_{R \geq 1/2} R^\delta \left[\int_0^R \left(\frac{r}{R}\right)^{2s-1} |W(r)| dr + \int_R^\infty |W(r)| dr \right] \end{aligned} \quad (5.20)$$

enthalten. Wir schränken uns hier und im Folgenden auf den Bereich $\delta \leq 2s - 1$ ein, da nicht einmal die charakteristische Funktion auf einem festen Intervall für $\delta > 2s - 1$ in $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$ enthalten ist.

Wir bemerken folgende einfache, aber nützliche Inklusionseigenschaften für $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$, nämlich

$$\mathcal{K}_{s',\delta}^{(0)} \subseteq \mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)} \quad \text{für } 1/2 \leq s' < s \text{ und } \delta \in [0, 2s' - 1] \quad (5.21)$$

Diese folgt aus der Definition von $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$ und $(r/R)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq R\}} \leq (r/R)^{2s'-1} \mathbf{1}_{\{r \leq R\}}$. Das bedeutet, je kleiner s ist, desto glatter muss die Funktion am Ursprung sein.

Wir stellen einfache Beispiele von Funktionen vor, die in $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$ enthalten sind.

Beispiel 5.3.2. Beispiele von Funktionen $W \in \mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$ sind

- $r^{-1}L^\infty([0, \rho])$ für ein $\rho > 0$ mit $s > 1/2$ und $\delta \in [0, 2s - 1]$. Modulo einer Konstanten, ist die Norm durch $\max\{\rho^\delta, \rho^\delta \log \rho\} \cdot \|rW\|_\infty$ beschränkt.
- $L^1(\mathbb{R}_+, r^\delta dr)$ für alle $s \geq 1/2$ mit $\delta \in [0, 2s - 1]$.

Die erste Behauptung ist offensichtlich. Um die zweite zu sehen, verwenden wir $\delta \leq 2s - 1$ sowie $r \leq R$ im ersten Summanden und $R \leq r$ im zweiten Summanden der Definition und erhalten

$$R^\delta \int_0^R \left(\frac{r}{R}\right)^{2s-1-\delta} \left(\frac{r}{R}\right)^\delta |W(r)| dr + \int_R^\infty R^\delta |W(r)| dr \leq \|W\|_{L^1(\mathbb{R}_+, r^\delta dr)}.$$

5.3.2 Ergebnisse für festen Drehimpuls

Wir kommen nun zu den zwei wichtigsten Behauptungen dieses Abschnitts. Sie sind unbedingt nötig, um die lineare Antwort zu berechnen und spielen daher eine entscheidende Rolle im Beweis der Konvergenzresultate.

Behauptung 5.3.3. Seien $\gamma \in (0, 2/\pi)$, $\ell \in \mathbb{N}_0$, $1/2 < s' < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$, $\delta' \in [0, 2s' - 1]$ und $\varepsilon \in [0, 2s - 1]$. Sei $0 \leq U \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}$ mit $U^{2s} \in \mathcal{K}_{s',\delta'}^{(0)}$. Dann ist die Abbildung $\lambda \mapsto \text{Tr}(C_\ell^H - \lambda U)_-$ bei $\lambda = 0$ differenzierbar mit Ableitung $\int_0^\infty \rho_\ell^H(r) U(r) dr$.

Behauptung 5.3.4. Seien $\gamma \in (0, 2/\pi)$, $\ell \in \mathbb{N}_0$ und $0 \leq U \in r^{-1}L^\infty_{\text{comp}}(\mathbb{R}_+)$. Dann ist die Abbildung $\lambda \mapsto \text{Tr}(C_\ell^H - \lambda U)_-$ bei $\lambda = 0$ differenzierbar mit Ableitung $\int_0^\infty \rho_\ell^H(r) U(r) dr$.

Wir bemerken Folgendes zur Endlichkeit von ρ_ℓ^H .

Bemerkungen 5.3.5.

1. Wir betonen, dass es Teil der Aussage ist, dass das Integral $\int_0^\infty U(r)\rho_\ell^H(r) dr$ für Funktionen U , die die Bedingungen der Behauptung erfüllen, endlich ist. Wir werden jedoch später einen direkteren Beweis dieser Tatsache geben, siehe Behauptung 5.4.8.
2. Behauptung 5.3.4 impliziert insbesondere für jedes feste $R < \infty$, dass

$$\int_0^R \frac{\rho_\ell^H(r)}{r} dr < \infty, \quad \text{falls } \gamma < 2/\pi.$$

Es gilt jedoch noch mehr – die potentielle Energie in jedem festen Kanal, sprich obiges Integral mit $R = \infty$ ist endlich. Diese Tatsache beruht auf Lemma 5.3.1 und kann ohne die Maschinerie des letzten Abschnitts zu verwenden, hergeleitet werden. Dazu verwendet man die normierten Eigenfunktionen $\psi_{n,\ell}^H$ von C_ℓ^H als Test-Funktionen für ein $\gamma' \in (\gamma, 2/\pi]$. Dann folgt aus dem Variationsprinzip für jedes $N \in \mathbb{N}$ die Ungleichung

$$\sum_{n=0}^N \left(\psi_{n,\ell}^H, \left(\sqrt{p_\ell^2 + 1} - 1 - \frac{\gamma'}{r} \right) \psi_{n,\ell}^H \right) \geq - \text{Tr} \left(\sqrt{p_\ell^2 + 1} - 1 - \frac{\gamma'}{r} \right)_-.$$

Da die rechte Seite endlich ist, gilt

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^N \left(\psi_{n,\ell}^H, \frac{1}{r} \psi_{n,\ell}^H \right) &\leq \frac{1}{\gamma'} \sum_{n=0}^N \left(\psi_{n,\ell}^H, \left(\sqrt{p_\ell^2 + 1} - 1 \right) \psi_{n,\ell}^H \right) \\ &\quad + \frac{1}{\gamma'} \text{Tr} \left(\sqrt{p_\ell^2 + 1} - 1 - \frac{\gamma'}{r} \right)_-. \end{aligned}$$

Da die Eigenwerte negativ sind, gilt weiter

$$\left(\psi_{n,\ell}^H, \left(\sqrt{p_\ell^2 + 1} - 1 \right) \psi_{n,\ell}^H \right) \leq \gamma \left(\psi_{n,\ell}^H, \frac{1}{r} \psi_{n,\ell}^H \right)$$

für alle $n \leq N$. Setzt man dies in die obige Gleichung ein und erinnert sich daran, dass $\gamma' > \gamma$, folgt

$$\sum_{n=0}^N \left(\psi_{n,\ell}^H, \frac{1}{r} \psi_{n,\ell}^H \right) \leq (\gamma' - \gamma)^{-1} \text{Tr} \left(\sqrt{p_\ell^2 + 1} - 1 - \frac{\gamma'}{r} \right)_-.$$

Die Behauptung folgt dann im Grenzwert $N \rightarrow \infty$.

Im Folgenden leiten wir die Behauptungen 5.3.3 und 5.3.4 aus den abstrakten Sätzen des vorigen Abschnitts her. Der Rest dieses Abschnitts befasst sich daher mit der Verifikation der Annahmen dieser Sätze.

5.3.3 Beweis von Behauptung 5.3.3

Wir nehmen folgendes Resultat aus Kapitel 7 vorweg. Es besagt, dass es ein $s > 1/2$ gibt (welches von der festen Kopplungskonstanten $\gamma < 2/\pi$ abhängt), sodass die durch $|p|^s$ und $(|p| - \gamma|x|^{-1})^s$ erzeugten Normen äquivalent zueinander sind. Wir erinnern daran, dass $\sigma_\gamma \in [0, 1]$ nach (5.2) definiert wurde.

Lemma 5.3.6 (Satz 7.1.1). *Seien $\gamma \in (0, 2/\pi]$ und $s \in (0, 1]$. Dann gibt es ein $A_{s,\gamma} < \infty$, sodass*

$$\left(|p| - \frac{\gamma}{|x|}\right)^{2s} \leq A_{s,\gamma} |p|^{2s} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3).$$

Falls außerdem $s < 3/2 - \sigma_\gamma$ ist, dann gibt es ein $a_{s,\gamma} > 0$, sodass

$$\left(|p| - \frac{\gamma}{|x|}\right)^{2s} \geq a_{s,\gamma} |p|^{2s} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3).$$

Bemerkung 5.3.7. Tatsächlich kann die erste Ungleichung für jedes $\gamma \leq 2/\pi$ und die zweite Ungleichung für jedes $\gamma < 1/2$ direkt hergeleitet werden. In diesen Fällen gelten die Ungleichungen des Lemmas sogar für $s = 1$ und implizieren wegen Operatormonotonie positiver Wurzeln die Ungleichungen für $s < 1$. Wegen der Hardy-Ungleichung sind

$$\left\| \left(|p| - \frac{\gamma}{|x|}\right) f \right\| \leq \| |p|f \| + \gamma \| |x|^{-1}f \| \leq (1 + 2\gamma) \| |p|f \|$$

und

$$\left\| \left(|p| - \frac{\gamma}{|x|}\right) f \right\| \geq \| |p|f \| - \gamma \| |x|^{-1}f \| \geq (1 - 2\gamma) \| |p|f \|.$$

Der Punkt von Lemma 5.3.6 ist, dass *beliebige* Kopplungskonstanten $\gamma < 2/\pi$ behandelt werden können, wenn man die Potenz $s = 1$ (was „Operator-Ungleichungen“ entspricht) verkleinert, aber immer noch über $1/2$ behält (was „Form-Ungleichungen“ entspricht).

Aus Lemma 5.3.6 folgern wir

Korollar 5.3.8. *Sei $\gamma \in (0, 2/\pi]$. Falls $0 < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$ und $M > -\inf \text{spec } C_\ell^H$, dann sind*

$$(C_\ell^H + M)^{-s} (C_\ell + M)^s \quad \text{und} \quad (C_\ell^H + M)^s (C_\ell + M)^{-s}$$

gleichmäßig in ℓ beschränkt.

Beweis. Da $0 \geq \sqrt{p_\ell^2 + 1} - 1 - p_\ell \geq -1$ ist, folgt aus dem Satz von Kato–Rellich, dass $(C_\ell^H + M)^{-1} (p_\ell - \gamma r^{-1} + M)$ und $(C_\ell^H + M) (p_\ell - \gamma r^{-1} + M)^{-1}$ beschränkt sind. Wegen Operatormonotonie von $x \mapsto x^s$ und der Annahme $s \leq 1$ sind damit auch die Operatoren $(C_\ell^H + M)^{-s} (p_\ell - \gamma r^{-1} + M)^s$ und $(C_\ell^H + M)^s (p_\ell - \gamma r^{-1} + M)^{-s}$ beschränkt. Es genügt daher zu zeigen, dass $(p_\ell - \gamma r^{-1} + M)^{-s} (p_\ell + M)^s$ und $(p_\ell - \gamma r^{-1} + M)^s (p_\ell + M)^{-s}$ beschränkt sind. Mit Lemma 5.3.6 und der Annahme an s folgt

$$(p_\ell + M)^{2s} \leq 2^{(2s-1)_+} (p_\ell^{2s} + M^{2s}) \leq 2^{(2s-1)_+} \left(a_{s,\gamma}^{-1} \left(p_\ell - \frac{\gamma}{r} \right)^{2s} + M^{2s} \right).$$

Der Operator auf der rechten Seite ist, modulo einer Konstanten, durch $(p_\ell - \gamma r^{-1} + M)^{2s}$ beschränkt. Dies zeigt, dass $(p_\ell - \gamma r^{-1} + M)^{-s} (p_\ell + M)^s$ beschränkt ist. Der Beweis der Beschränktheit von $(p_\ell - \gamma r^{-1} + M)^s (p_\ell + M)^{-s}$ verläuft analog. \square

Die folgenden Aussagen zeigen, dass unser Raum der Test-Funktionen $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$ (siehe (5.20)) in natürlicher Weise in diesem Problem auftaucht.

Lemma 5.3.9. *Sei $M > 0$ eine feste Konstante und $s \in (1/2, 1]$. Dann gilt für alle $r \geq 0$ und $\nu \geq 1/2$*

$$\int_0^\infty dk \frac{kr J_\nu(kr)^2}{(\sqrt{k^2 + 1} - 1 + M)^{2s}} \leq A_{s,M} \left[\left(\frac{r}{\nu} \right)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq \nu\}} + \mathbf{1}_{\{r \geq \nu\}} \right].$$

Wir verschieben diese Rechnung in Anhang B.1. Der Parameter $R \geq 1/2$ in der Definition der Klasse $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$ ist gerade ν , welches die Rolle von $\ell + 1/2$ einnimmt. Wir zeigen nun, dass Funktionen in $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$ relative Spurklassen- und Form-Ungleichungen bezüglich $(C_\ell + M)^s$ erfüllen. Dazu erinnern wir zunächst an die Fourier–Bessel- (oder Hankel-)Transformation Φ_ℓ , welche durch

$$(\Phi_\ell f)(k) := i^\ell \int_0^\infty (kr)^{1/2} J_{\ell+1/2}(kr) f(r) dr \quad \text{für alle } \ell \in \mathbb{N}_0$$

definiert ist (siehe beispielsweise Messiah [126, Formel (B.105)]). Es ist bekannt, dass für jedes $\ell \in \mathbb{N}_0$ der Operator Φ_ℓ auf $L^2(\mathbb{R}_+)$ unitär ist und p_ℓ^2 diagonalisiert. Das bedeutet, dass für jedes f aus dem Definitionsbereich des Operators gilt

$$(\Phi_\ell p_\ell^2 f)(k) = k^2 (\Phi_\ell f)(k).$$

Im Folgenden bezeichnet $\|\cdot\|_2$ die Hilbert–Schmidt-Norm.

Behauptung 5.3.10. *Seien $M > 0$, $s \in (1/2, 1]$, $\delta \in [0, 2s - 1]$, $\ell \in \mathbb{N}_0$ und $0 \leq W \in \mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$. Dann gilt*

$$\|W^{1/2}(C_\ell + M)^{-s}\|_2^2 \leq A_{s,M}(\ell + 1/2)^{-\delta} \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}} \quad (5.22)$$

und insbesondere

$$W \leq A_{s,M}(\ell + 1/2)^{-\delta} \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}} (C_\ell + M)^{2s}. \quad (5.23)$$

Per Dualität kann aus dieser Behauptung eine Sobolew-Ungleichung gewonnen werden, siehe Anhang D.3.

Beweis. Mit der Fourier–Bessel-Transformation und Lemma 5.3.9 erhält man

$$\begin{aligned} \|W^{1/2}(C_\ell + M)^{-s}\|_2^2 &= \int_0^\infty dr W(r) \int_0^\infty dk \frac{kr J_{\ell+1/2}(kr)^2}{(\sqrt{k^2 + 1} - 1 + M)^{2s}} \\ &\leq A_{s,M}(\ell + 1/2)^{-\delta} \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}}. \end{aligned}$$

Die Form-Ungleichung folgt unmittelbar aus der Spur-Ungleichung. \square

Kombiniert man Korollar 5.3.8 und Behauptung 5.3.10 sieht man, dass man die vorigen Spur- und Form-Ungleichungen auch bezüglich des relativistischen Wasserstoff-Operators formulieren kann.

Behauptung 5.3.11. *Seien $M > -\inf \text{spec } C_\ell^H$, $\gamma \in (0, 2/\pi)$, $1/2 < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$, $\delta \in [0, 2s - 1]$, $\ell \in \mathbb{N}_0$ und $0 \leq W \in \mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$. Dann gilt*

$$\|W^{1/2}(C_\ell^H + M)^{-s}\|_2^2 \leq A_{\gamma,s,M}(\ell + 1/2)^{-\delta} \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}}. \quad (5.24)$$

Insbesondere gilt

$$W \leq A_{\gamma,s,M}(\ell + 1/2)^{-\delta} \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}} (C_\ell^H + M)^{2s}. \quad (5.25)$$

Mit diesen Vorbereitungen kommen wir zum

Beweis von Behauptung 5.3.3. Wir wenden Satz 5.2.3 mit $A = C_\ell^H$, $B = U$ und $s > 1/2$ mit $s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$ an. Die Potenz $1/2 < s' < s$ kann beliebig klein sein.

Wir verifizieren nun die Bedingungen von Satz 5.2.3. Die Annahmen, die C_ℓ^H betreffen, folgen aus Lemma 5.3.1. Insbesondere impliziert die Tatsache, dass Null kein Eigenwert von C_ℓ^H ist, dass die links- und rechtsseitigen Ableitungen bei $\lambda = 0$ übereinstimmen.

Die Bedingung, dass $(C_\ell^H + M)^{-s}U(C_\ell^H + M)^{-s}$ ein Spurklasse-Operator für ein $M > -\inf \text{spec } C_\ell^H$ ist, folgt aus Behauptung 5.3.11 mit $U \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}$.

Schließlich folgt die Ungleichung $U^{2s} \leq a(C_\ell^H + M)^{2s'}$ für $1/2 < s' < s$ aus der Annahme $U^{2s} \in \mathcal{K}_{s',\delta'}^{(0)}$ und (5.25). Insbesondere ist U relativ Form-beschränkt bezüglich C_ℓ^H mit beliebig kleiner Form-Schranke. \square

5.3.4 Beweis von Behauptung 5.3.4

Um Behauptung 5.3.4 zu zeigen, benötigen wir eine Verallgemeinerung des zweiten Teils von Lemma 5.3.1, die wir ebenfalls aus Kapitel 7 vorwegnehmen.

Lemma 5.3.12 (Satz 7.4.1). *Sei $0 < s \leq 1$. Für jedes $\gamma' > 0$ gibt es ein $a_{s,\gamma,\gamma'} > 0$, sodass, wenn $s < 3/2 - \sigma_\gamma$, dann gilt für alle $0 \leq U(x) \leq \gamma'/|x|$*

$$\left(|p| - \frac{\gamma}{|x|} + U\right)^{2s} \geq a_{s,\gamma,\gamma'} |p|^{2s} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3).$$

Außerdem gibt es für jedes $0 < \gamma' < 2/\pi - \gamma$ ein $a'_{s,\gamma,\gamma'} > 0$, sodass, wenn $s < 3/2 - \sigma_{\gamma+\gamma'}$, dann gilt für alle $0 \leq U(x) \leq \gamma'/|x|$

$$\left(|p| - \frac{\gamma}{|x|} - U\right)^{2s} \geq a'_{s,\gamma,\gamma'} |p|^{2s} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3).$$

Wie im Beweis von Korollar 5.3.8 folgern wir

Korollar 5.3.13. *Seien $\gamma \in (0, 2/\pi)$, $\ell \in \mathbb{N}_0$ und $0 \leq U \in r^{-1}L^\infty(\mathbb{R}_+)$. Falls $0 < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$ sowie $M > -\inf \text{spec } C_\ell^H$ sind, gilt*

$$\limsup_{\lambda \rightarrow 0} \left\| (C_\ell^H - \lambda U + M)^{-s} (C_\ell^H + M)^s \right\| < \infty.$$

Beweis. Der Beweis verläuft analog zu dem von Korollar 5.3.8. Wir ersetzen als Erstes $(C_\ell^H - \lambda U + M)^{-s}$ durch $(p_\ell - \gamma/r - \lambda U + M)^{-s}$, wenden dann Lemma 5.3.12 an und verfahren mit dem Parameter M wie im Beweis von Korollar 5.3.8. Bei der Anwendung von

Lemma 5.3.12 unterscheiden wir zwischen $\lambda < 0$ und $\lambda > 0$. Im ersten Fall folgt die behauptete Schranke sofort. Im zweiten Fall wählen wir $\gamma' > 0$ so, dass $s < 3/2 - \sigma_{\gamma+\gamma'}$. Dann können wir für jedes $0 < \lambda \leq \gamma'/\|rU\|_\infty$ die Ungleichung aus Lemma 5.3.12 anwenden. Wir betonen, dass die Konstante dieser Ungleichung nicht von λ abhängt. Dies zeigt die behauptete Schranke. \square

Beweis von Behauptung 5.3.4. Wir wenden Satz 5.2.2 mit $A = C_\ell^H$, $B = U \in r^{-1}L_{\text{comp}}^\infty$ und $1/2 < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$ an.

Die Annahmen, die C_ℓ^H betreffen, haben wir bereits im Beweis von Behauptung 5.3.3 nachgewiesen. Die Tatsache, dass U relativ Form-beschränkt bezüglich C_ℓ^H ist, folgt aus der Kato-Ungleichung.

Die Bedingung, dass der Operator $(C_\ell^H + M)^{-s} U (C_\ell^H + M)^{-s}$ ein Spurklasse-Operator ist, folgt aus Behauptung 5.3.11 und $U \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}$ für $s \in (1/2, 1]$ und $\varepsilon \in [0, 2s - 1]$.

Die Bedingung, dass $(C_\ell^H + M)^s (C_\ell^H - \lambda U + M)^{-s}$ gleichmäßig für λ nahe Null beschränkt ist, folgt aus den Korollaren 5.3.8 und 5.3.13. Dies schließt den Beweis. \square

5.4 Kontrolle großer Drehimpulse

5.4.1 Neue Klasse von Funktionen und eine Majorante

Die Funktionen, für welche Satz 5.1.3 gelten, sind für $s \geq 1/2$ und $\delta \in [0, 2s - 1]$ in der Klasse

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_{s,\delta} &:= \{W \in L_{\text{loc}}^1(\mathbb{R}_+) : \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}} < \infty\} \\ \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}} &:= \sup_{R \geq 1/2} R^\delta \left[\int_0^R \left(\frac{r}{R}\right)^{2s-1} |W(r)| dr + \int_R^{R^2} \left(\frac{r}{R}\right)^{4s-1} |W(r)| dr \right. \\ &\quad \left. + R^{4s-1} \int_{R^2}^\infty |W(r)| dr \right] \end{aligned} \quad (5.26)$$

enthalten.

Wir geben wieder einfache Beispiele von Funktionen, die zu $\mathcal{K}_{s,\delta}$ gehören.

Beispiel 5.4.1. Beispiele von Funktionen $W \in \mathcal{K}_{s,\delta}$ sind

- $r^{-1}L^\infty([0, \rho])$ für ein $\rho > 0$ mit $s > 1/2$ und $\delta \in [0, 2s - 1]$. Die Norm ist durch eine Konstante mal

$$\max\{\rho^{\delta/2} + \rho^{\delta/2+2s-1/2}(1 + \log \rho), \rho^\delta + \rho^{\delta/2+2s-1/2}, \rho^\delta\} \cdot \|rW\|_\infty$$

beschränkt.

- $L^1(\mathbb{R}_+, r^\delta dr) \cap L^1(\mathbb{R}_+, r^{4s-1+\delta} dr)$ für jedes $s \geq 1/2$ mit $\delta \in [0, 2s - 1]$.

Die erste Behauptung folgt wieder aus einer direkten Rechnung. Für die zweite Behauptung schätzen wir den zweiten Summanden in der Definition (5.26) durch den dritten Summanden ab, verwenden $\delta \leq 2s - 1$ und $r \leq R$ im ersten Summanden und $R \leq r$ im letzten

Summanden. Wir erhalten schließlich

$$\begin{aligned} & R^\delta \int_0^R \left(\frac{r}{R}\right)^{2s-1-\delta} \left(\frac{r}{R}\right)^\delta |W(r)| dr + \int_R^\infty R^{4s-1+\delta} |W(r)| dr \\ & \leq \int_0^R |W(r)| r^\delta dr + \int_R^\infty |W(r)| r^{4s-1+\delta} dr \\ & \leq \|W\|_{L^1(\mathbb{R}_+, r^\delta dr)} + \|W\|_{L^1(\mathbb{R}_+, r^{4s-1+\delta} dr)}. \end{aligned}$$

Funktionen in $\mathcal{K}_{s,\delta}$ erfüllen ebenfalls einige nützliche Inklusionseigenschaften.

Lemma 5.4.2. *Seien $1/2 \leq s' < s$ und $\delta \in [0, 2s - 1]$. Dann erfüllt die Klasse $\mathcal{K}_{s,\delta}$ die folgenden Inklusionseigenschaften.*

1. *Ist $W \in \mathcal{K}_{s',\delta}$ mit $\delta \in [0, 2s' - 1]$ kompakt getragen mit $\text{supp}(W) = [0, \rho]$ für ein $\rho > 0$, dann ist $W \in \mathcal{K}_{s,\delta}$ mit $\|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}} \leq (1 + \rho^{2(s-s')}) \|W\|_{\mathcal{K}_{s',\delta}}$.*
2. *Es gilt $\mathcal{K}_{s,\delta} \subseteq \mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$.*

Wie für die $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$ -Klasse bedeutet das, dass Funktionen in $\mathcal{K}_{s,\delta}$ glatter am Ursprung sein müssen, je kleiner s ist. Darüberhinaus müssen Funktionen in $\mathcal{K}_{s,\delta}$ schneller im Unendlichen abfallen als solche in $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$.

Beweis. Die erste Eigenschaft folgt aus den Beobachtungen

$$\begin{aligned} (r/R)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq R\}} &\leq (r/R)^{2s'-1} \mathbf{1}_{\{r \leq R\}}, \\ (r/R)^{4(s-s')} \mathbf{1}_{\{R \leq r \leq \rho \leq R^2\}} &\leq \rho^{2(s-s')}, \\ R^{4(s-s')} \mathbf{1}_{\{R^2 \leq \rho\}} &\leq \rho^{2(s-s')} \end{aligned}$$

und der Definition (5.26).

Für die zweite Eigenschaft verwendet man $(R/r)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{R \leq r \leq R^2\}} \leq \mathbf{1}_{\{R \leq r \leq R^2\}}$ und $R^{1-4s} \leq 2^{4s-1}$ auf dem Gebiet $r \geq R^2 \geq 1/4$. \square

Die folgende entscheidende Behauptung wird es uns erlauben, das Weierstraßsche Majorantenkriterium anzuwenden, um Satz 5.1.3 mehr oder weniger direkt aus Satz 5.1.2 zu folgern.

Behauptung 5.4.3. *Seien $0 < \gamma \leq 2/\pi$, $0 \leq V(r) \leq \gamma/r$, $\lambda \in \mathbb{R}$, $1/2 < s' < s \leq 3/4$, $\varepsilon \in [0, 2s - 1]$, $\delta \in [0, 2s - 1]$ und $\delta' \in [4(s - s'), 2s' - 1]$. Sei weiterhin $U = U_1 + U_2$ eine reellwertige Funktion auf $(0, \infty)$ mit $U_1 \in r^{-1} L^\infty_{\text{comp}}(\mathbb{R}_+)$ und $U_2 \leq 0$ oder $U_2 \geq 0$, sodass $U_2 \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}$ und $|U_2|^{2s} \in \mathcal{K}_{s',\delta'} \cap \mathcal{K}_{s,\delta}$. Sei schließlich*

$$\alpha := \left(A_{s,a_\gamma} (1 - 2/\pi)^{-2s} \| |U_2|^{2s} \|_{\mathcal{K}_{s,\delta}} + A_{s,s'}^{-2} \| |U_2|^{2s} \|_{\mathcal{K}_{s',\delta'}} \right)^{1/(2s)},$$

wobei $A_{s,s'}$ die universelle Konstante C aus Lemma 5.2.4, a_γ die Konstante aus Behauptung 5.4.7 und A_{s,a_γ} die Konstante aus (5.29) sind. Falls λ

$$|\lambda| < \min \left\{ \frac{1 - \gamma}{\|rU_1\|_\infty}, \alpha^{-1} \right\} \quad (5.27)$$

erfüllt, gibt es eine Konstante $A_{\gamma,s} < \infty$ und ein $L_\gamma \in \mathbb{N}$, sodass für alle $\mathbb{N} \ni \ell \geq L_\gamma$ die Abschätzung

$$\mathrm{Tr}(C_\ell - V - \lambda U)_- - \mathrm{Tr}(C_\ell - V)_- \leq A_{\gamma,s} \lambda \|U\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}} (\ell + 1/2)^{-4s-\varepsilon}$$

gilt.

Wir machen einige Bemerkungen zu dieser Aussage.

Bemerkungen 5.4.4.

1. Diese Aussage ist ausschlaggebend, um Satz 5.1.3 zu zeigen, da sie uns erlaubt die Summation über ℓ mit dem Grenzwert $\lambda \rightarrow 0$ zu vertauschen, um schließlich die Scott-Vermutung für festes ℓ (Satz 5.1.2) anzuwenden. Wir bemerken dabei, dass die Schranke linear in λ ist und uns daher erlaubt abzuleiten.

In der konkreten Situation später wird V entweder γ/r oder ein abgeschirmtes Thomas-Fermi-Potential sein. Damit $\|U_1\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}}$ endlich ist, muss $\varepsilon \leq 2s - 1$ sein, siehe Beispiel 5.4.1. Um also die Abschätzung

$$\lambda^{-1}(2\ell + 1) [\mathrm{Tr}(C_\ell - V - \lambda U)_- - \mathrm{Tr}(C_\ell - V)_-] = o((\ell + 1/2)^{-1})$$

zu erhalten, müssen wir $2s - 1 \geq \varepsilon > 2 - 4s$ verlangen, das heißt $s > 1/2$ und $\varepsilon \geq 0$.

2. Die Bedingungen $|U_2|^{2s} \in \mathcal{K}_{s',\delta'} \subseteq \mathcal{K}_{s',\delta'}^{(0)}$ und $U_2 \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon} \subseteq \mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}$ (wegen der zweiten Inklusionseigenschaft aus Lemma 5.4.2) zeigen, dass Behauptung 5.3.3 für solche U_2 anwendbar ist. Um im nullten Drehimpulskanal für $\gamma > 1/2$ ableiten zu dürfen brauchen wir später die zusätzliche Einschränkung $s < 3/2 - \sigma_\gamma$.
3. Die Spurklasse-Bedingung deutet nur an, wie singularär U beim Ursprung sein darf. Sie sagt nichts darüber aus, wie langsam die Funktion im Unendlichen abfällt. Wir sind auf dieses Phänomen bereits bei festem Drehimpuls gestoßen. Wir konnten Satz 5.2.2 nicht verwenden, um beispielsweise die Endlichkeit der potentiellen Energie in jedem festen Kanal zu beweisen, da wir keine Kontrolle über den langreichweitigen Teil des Coulomb-Potentials hatten.
4. Die Bedingung, dass U_2 eine definite Funktion ist, ist wahrscheinlich technischer Natur und kommt daher, dass wir Lemma 5.2.4 anwenden wollen, wobei $B = \lambda U_2$ und $A = (C_\ell + a(\ell + 1/2)^{-2})$. In der konkreten Anwendung später, sprich im Beweis von Satz 5.1.3, ist dies jedoch kein großer Verlust, da der Beweis des Satzes ohnehin (wegen Linearität) auf den Fall, für welchen U nicht-negativ und entweder U_1 oder U_2 ist, zurückgeführt wird, siehe auch Unterabschnitt 5.5.1.

5.4.2 Beweis von Behauptung 5.4.3

Die folgenden drei Aussagen motivieren die Definition der Klasse $\mathcal{K}_{s,\delta}$.

Lemma 5.4.5. *Seien $a > 0$ und $s \in (1/2, 3/4]$. Dann gilt für jedes $r \geq 0$ und $\nu \geq 1/2$ die Abschätzung*

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty dk \frac{kr J_\nu(kr)^2}{(\sqrt{k^2 + 1} - 1 + a\nu^{-2})^{2s}} \\ & \leq A_{s,a} \left[\left(\frac{r}{\nu}\right)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq \nu\}} + \left(\frac{r}{\nu}\right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{\nu \leq r \leq \nu^2\}} + \nu^{4s-1} \mathbf{1}_{\{r \geq \nu^2\}} \right]. \end{aligned}$$

Der Beweis dieser Abschätzung kann ebenfalls in Anhang B.1 nachgeschlagen werden.

Der Parameter $R \geq 1/2$ in der Definition von $\mathcal{K}_{s,\delta}$ ist gerade ν , was wiederum die Rolle von $\ell + 1/2$ einnimmt. Wir zeigen nun, dass Funktionen in der $\mathcal{K}_{s,\delta}$ -Klasse relative Spur- und Form-Ungleichungen bezüglich $(C_\ell + a(\ell + 1/2)^{-2})^s$ erfüllen.

Behauptung 5.4.6. *Seien $a > 0$, $s \in (1/2, 3/4]$, $\delta \in [0, 2s - 1]$, $\ell \in \mathbb{N}_0$ und $0 \leq W \in \mathcal{K}_{s,\delta}$. Dann gilt*

$$\|W^{1/2}(C_\ell + a(\ell + 1/2)^{-2})^{-s}\|_2^2 \leq A_{s,a}(\ell + 1/2)^{-\delta} \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}} \quad (5.28)$$

und insbesondere

$$W \leq A_{s,a}(\ell + 1/2)^{-\delta} \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}} (C_\ell + a(\ell + 1/2)^{-2})^{2s}. \quad (5.29)$$

Auch aus dieser Ungleichung kann per Dualität eine Sobolew-Ungleichung gewonnen werden, siehe wieder Anhang D.3.

Beweis. Mit der Fourier-Bessel-Transformation und Lemma 5.4.5 folgt wieder

$$\begin{aligned} & \|W^{1/2}(C_\ell + a(\ell + 1/2)^{-2})^{-s}\|_2^2 \\ &= \int_0^\infty dr W(r) \int_0^\infty dk \frac{kr J_{\ell+1/2}(kr)^2}{(\sqrt{k^2 + 1} - 1 + a(\ell + 1/2)^{-2})^{2s}} \\ &\leq A_s(\ell + 1/2)^{-\delta} \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}}. \end{aligned}$$

Die Form-Ungleichung ist eine unmittelbare Konsequenz aus der Spur-Ungleichung. \square

Für $V \leq \gamma/r$ und geeignete Potentiale U zeigen wir, dass $\inf \text{spec}(C_\ell - V - \lambda U) \geq -a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2}$, falls $|\lambda|$ hinreichend klein ist. Dies rührt im Wesentlichen vom Verhalten der kinetischen Energie für kleine Impulse her und wird für den Beweis von Behauptung 5.4.3 wesentlich sein. Für $\lambda = 0$ wurde dies bereits von Frank u. a. [70, Theorem 2.2] gezeigt.

Behauptung 5.4.7. *Seien $\ell \in \mathbb{N}$, $0 < \gamma \leq 2/\pi$, $0 \leq V(r) \leq \gamma/r$, $\lambda \in \mathbb{R}$, $s \in (1/2, 3/4]$, $\delta \in [0, 2s - 1]$ und $U = U_1 + U_2$ eine reellwertige Funktion auf $(0, \infty)$, sodass $U_1 \in r^{-1}L_{\text{comp}}^\infty(\mathbb{R}_+)$ und $|U_2|^{2s} \in \mathcal{K}_{s,\delta}$. Dann gibt es eine Konstante $a_\gamma > 0$, sodass*

$$C_\ell - V - \lambda U \geq -a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2}$$

für alle λ gilt, die

$$|\lambda| < \min \left\{ \frac{1 - \gamma}{\|rU_1\|_\infty}, (A_{s,a_\gamma}(1 - 2/\pi)^{-2s} \| |U_2|^{2s} \|_{\mathcal{K}_{s,\delta}})^{-1/(2s)} \right\}$$

erfüllen, wobei A_{s,a_γ} die Konstante aus (5.29) ist.

Beweis. Wir benutzen, dass, wenn $\ell \geq 1$, dann ist $p_\ell - \kappa/r \geq 0$ für alle $\kappa \leq \pi/2$ (siehe beispielsweise [6, Lemma 2.2.3 und Theorem 2.2.4]). Insbesondere ist also $C_\ell - \kappa/r$ für alle $\ell \geq 1$ und $\kappa \leq \pi/2$ von unten beschränkt. Mit $\gamma + \lambda \|rU_1\|_\infty < 1$, dem Variationsprinzip und den Argumenten des Beweises von [70, Theorem 2.2] gilt somit die Abschätzung

$$(2/\pi)C_\ell - (V + \lambda U_1) \geq -(2/\pi)a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2}$$

für alle $\ell \in \mathbb{N}$ mit einem hinreichend großen $a_\gamma > 0$. Andererseits haben wir wegen (5.29) die Schranke

$$|U_2|^{2s} \leq \frac{A_{s,a_\gamma}}{(1-2/\pi)^{2s}} \| |U_2|^{2s} \|_{\mathcal{K}_{s,\delta}} (\ell+1/2)^{-\delta} (1-2/\pi)^{2s} (C_\ell + a_\gamma(\ell+1/2)^{-2})^{2s}.$$

Die Behauptung folgt dann aus der Operatormonotonie von Potenzen zwischen Null und Eins. \square

Damit kommen wir zum

Beweis von Behauptung 5.4.3. Mit dem Variationsprinzip haben wir

$$s_{\ell,\lambda} := \text{Tr}(C_\ell - V - \lambda U)_- - \text{Tr}(C_\ell - V)_- \leq \lambda \text{Tr}(d_{\ell,\lambda} U),$$

wobei $d_{\ell,\lambda}$ die orthogonale Projektion auf den negativen Spektralraum von $C_\ell - V - \lambda U$ bezeichnet. Definiert man

$$\begin{aligned} A &:= d_{\ell,\lambda}(C_\ell - V - \lambda U + a_\ell)^s \\ B &:= (C_\ell - V - \lambda U + a_\ell)^{-s}(C_\ell + a_\ell)^s \\ C &:= (C_\ell + a_\ell)^{-s}U(C_\ell + a_\ell)^{-s}, \end{aligned}$$

so gilt

$$s_{\ell,\lambda} \leq \lambda \text{Tr} ABCB^* A^*.$$

Wir wählen

$$a_\ell := \frac{a}{(\ell+1/2)^2}$$

für ein hinreichend großes $a > a_\gamma$ (mit a_γ aus der unteren Schranke aus Behauptung 5.4.7) und betonen, dass a möglicherweise von γ abhängt, aber unabhängig von ℓ und λ ist. Da $d_{\ell,\lambda}$ auf den negativen Spektralraum von $C_\ell - V - \lambda U$ projiziert, folgt aus Behauptung 5.4.7 die Schranke $\|A\|^2 \leq a^{2s}(\ell+1/2)^{-4s}$.

Wir widmen uns nun dem Operator B und zeigen $\|B\| \leq A_{s,\gamma}$. Dazu schreiben wir $B = B_1 B_2$, wobei

$$\begin{aligned} B_1 &:= (C_\ell - V - \lambda U + a_\ell)^{-s}(C_\ell - V - \lambda U_1 + a_\ell)^s \\ B_2 &:= (C_\ell - V - \lambda U_1 + a_\ell)^{-s}(C_\ell + a_\ell)^s. \end{aligned}$$

Wir schätzen als Erstes $\|B_2\|$ ab, indem wir

$$(C_\ell + a_\ell)^2 \leq A_\gamma(C_\ell - V - \lambda U_1 + a_\ell)^2$$

zeigen und dann die Operatormonotonie der Abbildung $x \mapsto x^s$ mit $s \in (0, 1]$ verwenden. Mit der Hardy-Ungleichung

$$\left(f, \frac{(\ell+1/2)^2}{r^2} f \right) = \int_0^\infty \frac{\ell(\ell+1) + 1/4}{r^2} |f(r)|^2 dr \leq (f, p_\ell^2 f)$$

und dem Satz von Plancherel, sprich

$$\|(p_\ell + a_\ell)(C_\ell + a_\ell)^{-1}\| \leq \frac{1}{\sqrt{2a_\ell}} + \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{a_\ell}}{2\sqrt{2}},$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} & \| (C_\ell - V - \lambda U_1 + a_\ell) f \| \\ & \geq \left[1 - (\gamma + |\lambda| \|rU_1\|_\infty) \left(\frac{1}{\sqrt{2a}} + \frac{1}{2\ell + 1} + \sqrt{\frac{a}{8}} (\ell + 1/2)^{-2} \right) \right] \| (C_\ell + a_\ell) f \|. \end{aligned}$$

Wählt man $a > a_\gamma$ hinreichend groß, sieht man, dass

$$\| (C_\ell - V - \lambda U_1 + a_\ell) f \| \geq A_\gamma \| (C_\ell + a_\ell) f \| \quad (5.30)$$

für alle $\ell \geq L_\gamma$ gilt, wobei L_γ durch die Ungleichung

$$\frac{1}{\sqrt{2a}} + \frac{1}{2L_\gamma + 1} + \frac{\sqrt{a/8}}{(L_\gamma + 1/2)^2} < 1 \quad (5.31)$$

definiert ist (wir erinnern an $\gamma + |\lambda| \|rU_1\|_\infty < 1$). Aus (5.30) und der Operatormonotonie von $x \mapsto x^s$ mit $s \in (0, 1]$ folgt dann

$$(C_\ell + a_\ell)^{2s} \leq A_\gamma (C_\ell - V - \lambda U_1 + a_\ell)^{2s}$$

für alle $\ell \geq L_\gamma$ und $\lambda \in \mathbb{R}$, welche (5.27) erfüllen. Wir schätzen nun $\|B_1\|$ ab. Mit Lemma 5.2.4 (welches voraussetzt, dass λU_2 eine definite Funktion ist), erhalten wir

$$(C_\ell - V - \lambda U_1 + a_\ell/2 + a_\ell/2)^{2s} \leq 2(C_\ell - V - \lambda U_1 + a_\ell/2 - \lambda U_2 + a_\ell/2)^{2s},$$

wenn wir die Ungleichung

$$\begin{aligned} \| |\lambda U_2|^s (C_\ell - V - \lambda U_1 + a_\ell/2)^{-s'} \| & \leq A_{s,s'} (a_\ell/2)^{s-s'} \\ & = A_{s,s'} (a/2)^{s-s'} (\ell + 1/2)^{2(s'-s)} \end{aligned} \quad (5.32)$$

für ein $1/2 < s' < s$ zeigen können. Mit Operatormonotonie (da $s' < s$) und (5.29) haben wir

$$\begin{aligned} |U_2|^{2s} & \leq A_{s',a_\gamma} (\ell + 1/2)^{-\delta'} \| |U_2|^{2s} \|_{s',\delta'} (C_\ell + a_\ell)^{2s'} \\ & \leq A_{s',\gamma} (\ell + 1/2)^{-\delta'} \| |U_2|^{2s} \|_{s',\delta'} (C_\ell - V - \lambda U_1 + a_\ell)^{2s'}. \end{aligned}$$

Daher ist die linke Seite von (5.32) durch

$$A_{s',\gamma}^{1/2} |\lambda|^s \sqrt{\| |U_2|^{2s} \|_{s',\delta'} (\ell + 1/2)^{-\delta'/2}}$$

beschränkt. Wegen der Einschränkung (5.27) an λ und $\delta' \geq 4(s - s')$ ist die rechte Seite durch den gewünschten Ausdruck $(\ell + 1/2)^{2(s'-s)}$ beschränkt. Dies zeigt (5.32) und damit auch die Schranke $\|B\| \leq A_{s,\gamma}$, welche gleichmäßig in λ und ℓ ist.

Schließlich berechnen wir die Spurnorm von C . Mit der Cauchy-Schwarz-Ungleichung für Spurideale [158, Theorem 2.8] und Behauptung 5.4.6 ist $\|C\|_1$ nach oben durch

$$\|C\|_1 \leq \left\| |U|^{1/2} (C_\ell + a_\ell)^{-s} \right\|_2^2 \leq A_{s,a} \|U\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}} (\ell + 1/2)^{-\varepsilon}$$

beschränkt. Kombiniert man die Schranken für $\|A\|^2$, $\|B\|^2$ und $\|C\|_1$, erhält man schließlich

$$s_{\ell,\lambda} \leq A_{\gamma,s} \lambda \|U\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}} (\ell + 1/2)^{-4s-\varepsilon},$$

was behauptet war. \square

5.4.3 Beweis von Satz 5.1.1 zur Existenz von ρ^H

Die Strategie für den Beweis von Satz 5.1.1 ist sehr ähnlich zu der von Behauptung 5.4.3. Da die Sätze des Abschnitts 5.2, insbesondere die Behauptungen 5.3.3 und 5.3.4, bereits die Endlichkeit der Dichten punktweise fast überall für alle $\ell \leq L_\gamma$ und ein gewisses, festes $L_\gamma = \mathcal{O}(1)$ garantieren, müssen wir lediglich die großen Drehimpulse kontrollieren.

Bevor wir zum Beweis von Satz 5.1.1 kommen, beginnen wir mit einer Aufwärmübung. Wir zeigen, ohne die Maschinerie des Abschnitts 5.2 in Anspruch zu nehmen, direkt die Endlichkeit von ρ_ℓ^H und ρ^H punktweise fast überall.

Behauptung 5.4.8. *Seien $\gamma \in (0, 2/\pi)$ und $\ell \in \mathbb{N}_0$. Falls $1/2 < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 3/4\}$, $\varepsilon \in [0, 2s - 1]$, $W^{(0)} \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}$ und $W \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}$, dann gibt es Konstanten $A_{s,\gamma,\ell}$ und $A_{s,\gamma} > 0$, sodass*

$$\int_0^\infty \rho_\ell^H(r) W^{(0)}(r) dr \leq A_{s,\gamma,\ell} \|W^{(0)}\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}} \quad \text{und} \quad \int_{\mathbb{R}^3} \rho^H(x) W(|x|) dx \leq A_{s,\gamma} \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}}.$$

Beweis. Es bezeichne d_ℓ die orthogonale Projektion auf den negativen Spektralraum von $C_\ell - \gamma/r$. Dann ist

$$\int_0^\infty \rho_\ell^H(r) W(r) dr = \text{Tr } d_\ell W = \text{Tr } ABCB^* A^*,$$

wobei nun

$$\begin{aligned} A &:= d_\ell (C_\ell - \gamma/r + a_\ell)^s \\ B &:= (C_\ell - \gamma/r + a_\ell)^{-s} (C_\ell + a_\ell)^s \\ C &:= (C_\ell + a_\ell)^{-s} W (C_\ell + a_\ell)^{-s} \end{aligned}$$

sind, wobei $a_\ell = a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2}$ mit einem hinreichend großen $a_\gamma > 0$, welches nicht von ℓ abhängt. Wegen [70, Theorem 2.2] gilt zunächst wieder die gewöhnliche Schranke $\|A\| \leq a_{s,\gamma}(\ell + 1/2)^{-4s}$. Wie im Beweis von Behauptung 5.4.3 ist $\|C\|_1 \leq A_{s,\gamma}(\ell + 1/2)^{-\varepsilon} \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}}$. Die gleichmäßige Beschränktheit von $\|B\|$ in ℓ wurde für $\gamma \leq 2/\pi$, hinreichend großes a_γ und alle $\ell \geq L_\gamma$ im Beweis von Behauptung 5.4.3 gezeigt (dort war es $\|B_2\|$). Dabei erfüllte die feste Zahl L_γ die Ungleichung (5.31). Für $\ell \leq L_\gamma$ spielt die Gleichmäßigkeit der Abschätzung von $\|B\|$ in ℓ keine Rolle, da wir es hier nur mit einer festen und endlichen Zahl von Drehimpulskanälen zu tun haben. In diesem Fall schätzen wir

$$\|B\| \leq \|B_1\| \|B_2\| \|B_3\|$$

ab, wobei

$$\begin{aligned} B_1 &:= (C_\ell + a_\ell)^s (p_\ell + a_\ell)^{-s} \\ B_2 &:= (p_\ell + a_\ell)^s (p_\ell - \gamma/r + a_\ell)^{-s} \\ B_3 &:= (p_\ell - \gamma/r + a_\ell)^s (C_\ell - \gamma/r + a_\ell)^{-s}. \end{aligned}$$

Mit dem Satz von Plancherel ist $\|B_1\| \leq A_s$ für alle $\ell \in \mathbb{N}_0$. Mit Lemma 5.3.6 gilt für festes $\gamma < 2/\pi$

$$(p_\ell + a_\ell)^{2s} \leq 2^{(2s-1)+} (p_\ell^{2s} + a_\ell^{2s}) \leq 2^{(2s-1)+} \left(a_{s,\gamma}^{-1} \left(p_\ell - \frac{\gamma}{r} \right)^{2s} + a_\ell^{2s} \right),$$

falls $1/2 < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$. Hierbei ist $a_{s,\gamma}$ die Konstante aus Lemma 5.3.6. Der Operator auf der rechten Seite ist klarerweise durch eine Konstante mal $(p_\ell - \gamma/r + a_\ell)^{2s}$ beschränkt. Somit ist auch $\|B_2\| \leq A_{s,\gamma}$ für alle $\ell \in \mathbb{N}_0$. Um die Endlichkeit von $\|B_3\|$ zu zeigen, verwenden wir, dass die Differenz $\sqrt{p^2 + 1} - 1 - |p|$ beschränkt ist. Daher gibt es ein $A > 0$, sodass

$$\begin{aligned} \|(p_\ell - \gamma/r + a_\ell)(C_\ell - \gamma/r + a_\ell)^{-1}\| &\leq 1 + \|(p_\ell - C_\ell)(C_\ell - \gamma/r + a_\ell)^{-1}\| \\ &\leq A(\ell + 1/2)^2 \leq AL_\gamma^2. \end{aligned}$$

Verwendet man dann die Operatormonotonie der Abbildung $x \mapsto x^s$ mit $s \in (0, 1]$ und kombiniert die Schranken für B_1, B_2 und B_3 , erhält man schließlich

$$\|B\| \leq A_{s,\gamma}.$$

Kombiniert man nun die Schranken für A, B und C , erhält man

$$\int_{\mathbb{R}^3} \rho^H(x) W(|x|) dx = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \operatorname{Tr} d_\ell W \leq A_{\gamma,s} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)(\ell+1/2)^{-4s-\varepsilon} \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}}.$$

Die rechte Seite ist summierbar, falls $2s - 1 \geq \varepsilon > 2 - 4s$, sprich $s > 1/2$ und $\varepsilon \geq 0$.

Das obige Argument führt auch auf den direkteren Beweis der Endlichkeit von ρ_ℓ^H . Mit $W^{(0)} \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}$ erhält man

$$\int_0^\infty \rho_\ell^H(r) W^{(0)}(r) dr = \operatorname{Tr} d_\ell W^{(0)} \leq A_{\gamma,s} (\ell + 1/2)^{-\varepsilon} \|W^{(0)}\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}},$$

was aus der obigen Beweisführung mit den Operatoren

$$\begin{aligned} A &:= d_\ell (C_\ell - \gamma/r + M)^s \\ B &:= (C_\ell - \gamma/r + M)^{-s} (C_\ell + M)^s \\ C &:= (C_\ell + M)^{-s} W^{(0)} (C_\ell + M)^{-s} \end{aligned}$$

folgt, wobei $M > -\inf \operatorname{spec} C_\ell^H$ eine Konstante der Ordnung $\mathcal{O}(1)$ ist. \square

Mit dieser Vorbereitung kommen wir zum

Beweis von Satz 5.1.1. Wir setzen $U = \delta_r$ (der radialen Delta-Funktion bei $r \in \mathbb{R}_+$) in den obigen Überlegungen und schreiben, wie zuvor,

$$\rho_\ell^H(r) = \operatorname{Tr} d_\ell \delta_r = \operatorname{Tr} ABCB^*A^*$$

mit

$$\begin{aligned} A &:= d_\ell (C_\ell - \gamma/r + a_\ell)^s \\ B &:= (C_\ell - \gamma/r + a_\ell)^{-s} (C_\ell + a_\ell)^s \\ C &:= (C_\ell + a_\ell)^{-s} \delta_r (C_\ell + a_\ell)^{-s}, \end{aligned}$$

$a_\ell = a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2}$ und einem hinreichend großen $a_\gamma > 0$, welches nicht von ℓ abhängt. Zunächst haben wir wieder die gewöhnliche Schranke $\|A\| \leq a_{s,\gamma}(\ell + 1/2)^{-4s}$ wegen [70, Theorem 2.2]. Die Spur von C ist gerade $(C_\ell + a_\ell)^{-2s}(r, r)$, da der Kern $(C_\ell + a_\ell)^{-2s}(r, r')$

wegen der Sobolew-Einbettung (mit $2s > d = 1$) eine stetige Funktion in beiden Variablen ist. Die Diagonale wurde bereits in Lemma 5.4.5 durch

$$(C_\ell + a_\ell)^{-2s}(r, r) \leq A_{s, a_\gamma} \left[\left(\frac{r}{\ell + \frac{1}{2}} \right)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq \ell + \frac{1}{2}\}} + \left(\frac{r}{\ell + \frac{1}{2}} \right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{\ell + \frac{1}{2} \leq r \leq (\ell + \frac{1}{2})^2\}} \right. \\ \left. + \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{r \geq (\ell + 1/2)^2\}} \right]$$

abgeschätzt. Die Endlichkeit von $\|B\|$ wurde im Beweis von Behauptung 5.4.8 gezeigt. Kombiniert man die Schranken für A, B und C , erhält man

$$\rho_\ell^H(r) = \text{Tr } d_\ell \delta_r \\ \leq A_{s, \gamma} (\ell + 1/2)^{-4s} \left[\left(\frac{r}{\ell + \frac{1}{2}} \right)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq \ell + \frac{1}{2}\}} + \left(\frac{r}{\ell + \frac{1}{2}} \right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{\ell + \frac{1}{2} \leq r \leq (\ell + \frac{1}{2})^2\}} \right. \\ \left. + \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{r \geq (\ell + 1/2)^2\}} \right].$$

Insbesondere ist die mit $2\ell + 1$ multiplizierte Seite für $s > 1/2$ summierbar und man erhält

$$r^2 \rho^H(r) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \rho_\ell^H(r) \leq A_{s, \gamma} (r^{2-4s} + r^{1/2}).$$

□

5.5 Beweis der Konvergenzresultate

5.5.1 Beweis von Satz 5.1.2 (fester Drehimpuls)

Wir behaupten als Erstes, dass es genügt den Satz für nicht-negative Funktionen U , die entweder in $r^{-1}L_{\text{comp}}^\infty(\mathbb{R}_+)$ oder in $\mathcal{K}_{s, \varepsilon}^{(0)}$ mit $U^{2s} \in \mathcal{K}_{s', \delta'}^{(0)}$, $1/2 < s' < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$, $\varepsilon \in [0, 2s - 1]$ und $\delta' \in [0, 2s' - 1]$ enthalten sind.

Tatsächlich sind $(U_1)_+$, $(U_1)_-$, $(U_2)_+$ und $(U_2)_-$ vier Funktionen mit den benötigten Eigenschaften. Da die Behauptung von Satz 5.1.2 linear in U ist, genügt es, diese für jede einzelne dieser vier Funktionen separat zu zeigen.

Wir nehmen daher von nun an an, dass $U \geq 0$ entweder in $r^{-1}L_{\text{comp}}^\infty(\mathbb{R}_+)$ oder in $\mathcal{K}_{s, \varepsilon}^{(0)}$ mit $U^{2s} \in \mathcal{K}_{s', \delta'}^{(0)}$ mit $1/2 < s' < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$ enthalten ist. Wir definieren die orthogonale Projektion Π_ℓ auf den ℓ -ten Drehimpulskanal durch

$$\Pi_\ell := \sum_{m=-\ell}^{\ell} |Y_{\ell, m}\rangle \langle Y_{\ell, m}|$$

sowie den geeignet gestörten Chandrasekhar-Operator

$$C_{Z, \lambda} := C_Z - \lambda \sum_{\nu=1}^N c^2 U(c|x_\nu|) \Pi_{\ell_0, \nu} \quad \text{in} \quad \bigwedge_{\nu=1}^N L^2(\mathbb{R}^3).$$

Hierbei wirkt die Projektion $\Pi_{\ell_0, \nu}$ als Π_{ℓ_0} bezüglich dem ν -ten Teilchen. Da $U^{2s} \in \mathcal{K}_{s', \delta'}^{(0)}$, ist $U^{2s} \leq a(C_\ell^H + M)^{2s'}$ für $1/2 < s' < s$ wegen (5.25). Insbesondere ist U infinitesimal Form-beschränkt bezüglich C_ℓ^H (siehe auch die Diskussion zwischen Satz 5.2.3 und Lemma 5.2.4), weshalb $C_{Z, \lambda}$ im Sinne quadratischer Formen für alle $\lambda \in \mathbb{R}$ definiert werden kann. Ist $U \in r^{-1}L_{\text{comp}}^\infty(\mathbb{R}_+)$, dann kann $C_{Z, \lambda}$ für alle λ in einer Umgebung von Null (welche unabhängig von Z ist) mittels Katos Ungleichung definiert werden.

Wir erinnern daran, dass d ein Grundzustand des Vielteilchen-Operators C_Z war und bemerken die Gleichheit

$$\lambda(2\ell_0 + 1) \int_0^\infty c^{-3} \rho_{\ell_0, d}(c^{-1}r) U(r) dr = c^{-2} \text{Tr}(d(C_Z - C_{Z, \lambda})). \quad (5.33)$$

Wir schätzen im Folgenden die rechte Seite nach oben ab. Dazu definieren wir

$$C_c(v) = \sqrt{-c^2 \Delta + c^4} - c^2 - v \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3)$$

für selbstadjungierte Operatoren v in $L^2(\mathbb{R}^3)$, die Form-beschränkt bezüglich $|p|$ mit Form-Schranke $< c$ sind. Wir erinnern daran, dass wir mit ρ_Z^{TF} den eindeutigen Minimierer des Thomas–Fermi-Funktional eines neutralen Atoms mit Grundzustandsenergie $E^{\text{TF}}(Z)$ bezeichnen (Lieb und Simon [119, Theorem II.20]). Wir erinnern außerdem an den Radius $R_Z^{\text{TF}}(x)$ des Austauschlochs bei $x \in \mathbb{R}^3$, der durch

$$\int_{|x-y| \leq R_Z^{\text{TF}}(x)} \rho_Z^{\text{TF}}(y) dy = \frac{1}{2}$$

definiert ist und setzen

$$\chi_Z^{\text{TF}}(x) := \int_{|x-y| \geq R_Z^{\text{TF}}(x)} \frac{\rho_Z^{\text{TF}}(y)}{|x-y|} dy.$$

Schließlich definieren wir für Spurklasse-Operatoren A die Spur im ℓ -ten Drehimpulskanal durch

$$\text{Tr}_\ell A := \text{Tr} \Pi_\ell A \Pi_\ell.$$

Wir reduzieren nun das Vielteilchen-Problem auf ein Einteilchen-Problem und schätzen dazu als Erstes $\text{Tr} dC_{Z, \lambda}$ von unten durch Terme, die nur Einteilchen-Operatoren beinhalten, ab.

Lemma 5.5.1. *Für alle λ in einer Umgebung von Null und alle $\mathbb{N} \ni L < Z$ gilt*

$$\begin{aligned} \text{Tr} C_{Z, \lambda} d &\geq - \sum_{\ell=0}^{L-1} \text{Tr}_\ell C_c(Z|x|^{-1} + \lambda c^2 U(c|x|) \Pi_{\ell_0})_- \\ &\quad - \sum_{\ell=L}^Z \text{Tr}_\ell C_c(Z|x|^{-1} + \lambda c^2 U(c|x|) \Pi_{\ell_0} - \chi_Z^{\text{TF}})_- - D[\rho_Z^{\text{TF}}]. \end{aligned}$$

Beweis. Die Korrelationsungleichung von Mancas u. a. [123] liefert zunächst

$$\sum_{\nu < \mu} \frac{1}{|x_\nu - x_\mu|} \geq \sum_{\nu=1}^Z \chi_Z^{\text{TF}}(x_\nu) - D[\rho_Z^{\text{TF}}].$$

Wenn $d^{(1)}$ die Einteilchendichtematrix von d bezeichnet, folgt aus der Nicht-Negativität und der sphärischen Symmetrie von $\chi_Z^{\text{TF}}(x)$

$$\begin{aligned} \text{Tr } C_{Z,\lambda} d &\geq - \sum_{\ell=0}^{L-1} \text{Tr}_\ell d^{(1)} C_c(Z|x|^{-1} + \lambda c^2 U(c|x|) \Pi_{\ell_0}) \\ &\quad - \sum_{\ell=L}^{\infty} \text{Tr}_\ell d^{(1)} C_c(Z|x|^{-1} - \chi_Z^{\text{TF}}(x) + \lambda c^2 U(c|x|) \Pi_{\ell_0}) - D[\rho_Z^{\text{TF}}] \end{aligned}$$

für jedes $L < Z$. Da der Absolutbetrag der Energie monoton fällt, wenn ℓ wächst (siehe auch Behauptung 5.4.7), kann der letzte Ausdruck weiter nach unten abgeschätzt werden, indem man $d^{(1)}$ durch eine Einteilchendichtematrix ersetzt, die so definiert ist, dass alle Kanäle $\ell < L$ vollständig besetzt sind. Da es ohnehin nie mehr als Z besetzte Drehimpulskanäle gibt, kann die zweite Summe sicherlich bei Z abgeschnitten werden. Die Anwendung des Variationsprinzips zeigt schließlich die behauptete Schranke. \square

Als Nächstes erinnern wir an einige Resultate aus [69], welche das asymptotische Verhalten der Grundzustandsenergie von C_Z betreffen. Frank u. a. zeigten in [69, Theorem 1 und Theorem 2], dass die Spektralverschiebung zwischen den wasserstoffartigen Schrödinger- und Chandrasekhar-Operatoren

$$s(\gamma) := \gamma^{-2} \text{Tr} \left[\left(\sqrt{p^2 + 1} - 1 - \frac{\gamma}{|x|} \right)_- - \left(\frac{p^2}{2} - \frac{\gamma}{|x|} \right)_- \right] \quad (5.34)$$

für alle $\gamma \leq 2/\pi$ endlich ist. Insbesondere gilt für alle $v \leq (2/\pi)r^{-1}$ und $\ell \in \mathbb{N}_0$

$$\text{Tr}_\ell \left[\left(\sqrt{p^2 + 1} - 1 - v \right)_- - \left(\frac{p^2}{2} - v \right)_- \right] \leq a \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^{-2}. \quad (5.35)$$

Das heißt dass die mit dem Entartungsfaktor $2\ell + 1$ multiplizierte Spektralverschiebung in jedem Drehimpulskanal immer noch summierbar ist.

Lemma 5.5.2. *Es gilt*

$$\inf \text{spec } C_Z = E^{\text{TF}}(Z) + \left(\frac{1}{4} - s(\gamma) \right) Z^2 + \mathcal{O}(Z^{47/24}). \quad (5.36)$$

Wenn darüberhinaus $L = [Z^{1/9}]$ ist, gilt außerdem

$$\begin{aligned} & - \sum_{\ell=0}^{L-1} \text{Tr}_\ell C_c(Z|x|^{-1})_- - \sum_{\ell=L}^Z \text{Tr}_\ell C_c(Z|x|^{-1} - \chi_Z^{\text{TF}})_- - D[\rho_Z^{\text{TF}}] \\ & \geq E^{\text{TF}}(Z) + \left(\frac{1}{4} - s(\gamma) \right) Z^2 - \text{konst } Z^{47/24}. \end{aligned} \quad (5.37)$$

Beweis. Die erste Behauptung ist [69, Theorem 1]. Die Zweite folgt aus der Kombination der Ersten, der nicht-relativistischen Scott-Korrektur (siehe auch [70, Proposition 4.1]), (5.34) sowie (5.35). Wie Frank u. a. später in [70] bemerkten, ist es unabdingbar, die Summe über ℓ auch im nicht-relativistischen Fall (bei Z) abzuschneiden. Dies liegt daran, dass das mittlere Feld $Z/|x| - \chi_Z^{\text{TF}}(x)$ nur wie $Z/|x|$ im Unendlichen abfällt, weshalb die Summe der negativen Eigenwerte über alle Kanäle divergiert. \square

Mit diesen Vorbereitungen beginnen wir mit dem Hauptteil des Beweises von Satz 5.1.2. Aus (5.36) und (5.37) folgt für $L = [Z^{1/9}]$ die Ungleichung

$$\begin{aligned} \operatorname{Tr} C_Z d &= \inf \operatorname{spec} C_Z = E^{\text{TF}}(Z) + \left(\frac{1}{4} - s(\gamma)\right) Z^2 + \text{konst } Z^{47/24} \\ &\leq - \sum_{\ell=0}^{L-1} \operatorname{Tr}_\ell C_c(Z|x|^{-1})_- - \sum_{\ell=L}^Z \operatorname{Tr}_\ell C_c(Z|x|^{-1} - \chi_Z^{\text{TF}})_- - D[\rho_Z^{\text{TF}}] \\ &\quad + \text{konst } Z^{47/24}. \end{aligned}$$

Kombiniert man dies mit der Schranke aus Lemma 5.5.1, erhält man

$$\begin{aligned} \operatorname{Tr}(C_Z - C_{Z,\lambda})d &\leq \sum_{\ell=0}^{L-1} (\operatorname{Tr}_\ell C_c(Z|x|^{-1} + \lambda c^2 U(c|x|)\Pi_{\ell_0})_- - \operatorname{Tr}_\ell C_c(Z|x|^{-1})_-) \\ &\quad + \sum_{\ell=L}^Z (\operatorname{Tr}_\ell C_c(Z|x|^{-1} + \lambda c^2 U(c|x|)\Pi_{\ell_0} - \chi_Z^{\text{TF}})_- \\ &\quad \quad - \operatorname{Tr}_\ell C_c(Z|x|^{-1} - \chi_Z^{\text{TF}})_-) \\ &\quad + \text{konst } Z^{47/24}. \end{aligned}$$

Offensichtlich verschwindet die Differenz der Spuren nur dann nicht, wenn $\ell = \ell_0$. Für hinreichend großes Z wird irgendwann $L = [Z^{1/9}] > \ell_0$. Für solche Z vereinfacht sich daher der letzte Ausdruck zu

$$\begin{aligned} \operatorname{Tr}(C_Z - C_{Z,\lambda})d &\leq \operatorname{Tr}_{\ell_0} C_c(Z|x|^{-1} + \lambda c^2 U(c|x|))_- - \operatorname{Tr}_{\ell_0} C_c(Z|x|^{-1})_- \\ &\quad + \text{konst } Z^{47/24} \\ &= c^2 (\operatorname{Tr}_{\ell_0} C_1(\gamma|x|^{-1} + \lambda U(|x|))_- - \operatorname{Tr}_{\ell_0} C_1(\gamma|x|^{-1})_- \\ &\quad \quad + \text{konst } Z^{-1/24}) \\ &= c^2(2\ell_0 + 1) \left(\operatorname{Tr} (C_{\ell_0}^H - \lambda U)_- - \operatorname{Tr} (C_{\ell_0}^H)_- + \text{konst } Z^{-1/24} \right). \end{aligned}$$

Hierbei haben wir verwendet, dass die Operatoren $C_{\ell_0}^H$ und $C_{\ell_0}^H - \lambda U$ nicht von $m \in \{-\ell_0, -\ell_0 + 1, \dots, \ell_0 - 1, \ell_0\}$ abhängen, weshalb die Spur $\operatorname{Tr}_{\ell_0}$ den Entartungsfaktor $2\ell_0 + 1$ gibt. Setzt man diese Schranke in (5.33) ein und lässt $Z \rightarrow \infty$ gehen, erhält man

$$\limsup_{Z \rightarrow \infty} \lambda \int_0^\infty c^{-3} \rho_{\ell_0,d}(c^{-1}r) U(r) dr \leq \operatorname{Tr} (C_{\ell_0}^H - \lambda U)_- - \operatorname{Tr} (C_{\ell_0}^H)_-.$$

Daraus folgt

$$\limsup_{Z \rightarrow \infty} \int_0^\infty c^{-3} \rho_{\ell_0,d}(c^{-1}r) U(r) dr \leq \lambda^{-1} \left(\operatorname{Tr} (C_{\ell_0}^H - \lambda U)_- - \operatorname{Tr} (C_{\ell_0}^H)_- \right)$$

für $\lambda > 0$, beziehungsweise

$$\liminf_{Z \rightarrow \infty} \int_0^\infty c^{-3} \rho_{\ell_0,d}(c^{-1}r) U(r) dr \geq \lambda^{-1} \left(\operatorname{Tr} (C_{\ell_0}^H - \lambda U)_- - \operatorname{Tr} (C_{\ell_0}^H)_- \right)$$

für $\lambda < 0$. Jetzt können wir $\lambda \rightarrow 0$ gehen lassen. Gemäß der Behauptungen 5.3.3 beziehungsweise 5.3.4 konvergieren die rechten Seiten der letzten beiden Ungleichungen gegen $\int_0^\infty \rho_{\ell_0}^H(r)U(r) dr$. Dies zeigt, dass $\int_0^\infty c^{-3}\rho_{\ell_0,d}(c^{-1}r)U(r) dr$ einen Grenzwert für $Z \rightarrow \infty$ hat und dieser gerade durch den behaupteten Ausdruck gegeben ist. Die schließt den Beweis des Satzes.

5.5.2 Beweis von Satz 5.1.3 (alle Drehimpulse)

Wir wissen bereits, dass die starke Scott-Vermutung in jedem festen Drehimpulskanal – also für alle Kanäle $\ell \leq L_\gamma$ für ein beliebiges, festes $L_\gamma = \mathcal{O}(1)$ – und gewisse Test-Funktionen wahr ist. Die Summierung über $\ell = 0, \dots, L_\gamma$ stellt daher kein Problem dar. Um die Vermutung allerdings für die gesamte Dichte zu beweisen – das heißt wir summieren über *alle* $\ell \in \mathbb{N}_0$ – müssen wir wissen, ob man die Summierung über ℓ (für $\ell \geq L_\gamma$) mit den Grenzwerten $\lambda \rightarrow 0$ und $Z \rightarrow \infty$ vertauschen kann. An dieser Stelle kommt die Majorante aus Behauptung 5.4.3 zum Einsatz. Wir erinnern daran, dass U als sphärisch symmetrisch vorausgesetzt war, weshalb wir den gestörten Operator wieder in Drehimpulskanäle zerlegen können. Wir erinnern und definieren dann für $L' \in \mathbb{N}$ die Operatoren

$$C_Z = \sum_{\nu=1}^N \left(\sqrt{-c^2\Delta_\nu + c^4} - c^2 - \frac{Z}{|x_\nu|} \right) + \sum_{1 \leq \nu < \mu \leq N} \frac{1}{|x_\nu - x_\mu|},$$

$$C_{Z,\lambda}^{L_\gamma} := C_Z - \lambda \sum_{\nu=1}^N c^2 U(c|x_\nu|) \sum_{\ell_0=L_\gamma}^{L'} \Pi_{\ell_0,\nu} \quad \text{in } \bigwedge_{\nu=1}^N L^2(\mathbb{R}^3).$$

Mit denselben Argumenten wie im vorigen Unterabschnitt können wir annehmen, dass $U \geq 0$ entweder in $r^{-1}L_{\text{comp}}^\infty(\mathbb{R}_+)$ oder in $\mathcal{K}_{s,\varepsilon}$ mit $U^{2s} \in \mathcal{K}_{s,\delta} \cap \mathcal{K}_{s',\delta'}$ enthalten und sphärisch symmetrisch ist. Wir erinnern daran, dass die Parameter die Schranken $1/2 < s' < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 3/4\}$, $\delta' \in [4(s - s'), 2s' - 1]$, $\delta \in [0, 2s - 1]$ und $\varepsilon \in [0, 2s - 1]$ erfüllen. Darüberhinaus erinnern wir an die Inklusionseigenschaft $\mathcal{K}_{s,\delta} \subseteq \mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$ aus Lemma 5.4.2, welche sicherstellt, dass Satz 5.1.2, sprich, die starke Scott-Vermutung in jedem einzelnen Drehimpulskanal, für solche Test-Funktionen wahr ist. Wir wählen L_γ aus Behauptung 5.4.3, das heißt L_γ erfüllt die Ungleichung (5.31).

Wie in (5.33) ist

$$\lambda \sum_{\ell_0=L_\gamma}^{L'} (2\ell_0 + 1) \int_0^\infty c^{-3}\rho_{\ell_0,d}(c^{-1}r)U(r) dr = c^{-2} \text{Tr}(d(C_Z - C_{Z,\lambda}^{L_\gamma})). \quad (5.38)$$

Wir erinnern an die Reihenfolge $\lim_{\lambda \rightarrow 0} \lim_{Z \rightarrow \infty} \lim_{L' \rightarrow \infty}$ der durchzuführenden Grenzwerte. Unser erstes Ziel besteht darin, den Grenzwert $Z \rightarrow \infty$ mit dem Grenzwert $L' \rightarrow \infty$ zu vertauschen, um das Vielteilchen-Problem wieder auf ein effektives Einteilchen-Problem zu reduzieren, welches nur noch wasserstoffartige Operatoren involviert. Im Anschluß vertauschen wir noch die Grenzwerte $\lambda \rightarrow 0$ und $L' \rightarrow \infty$, um Satz 5.1.2, sprich die starke Scott-Vermutung für festen Drehimpuls, anzuwenden. Die Vertauschung dieser Grenzwerte ist gerechtfertigt, sobald wir das Weierstraßsche Majorantenkriterium mit der Majoranten aus Behauptung 5.4.3 anwenden können.

Wir verwenden wie vorher Lemma 5.5.1 und 5.5.2, und erhalten die Abschätzung

$$\begin{aligned}
& c^{-2} \operatorname{Tr}(d(C_Z - C_{Z,\lambda}^{L_\gamma})) \\
& \leq c^{-2} \sum_{\ell=0}^{L-1} \left(\operatorname{Tr}_\ell C_c \left(\frac{Z}{|x|} + \lambda c^2 U(c|x|) \sum_{\ell_0=L_\gamma}^{L'} \Pi_{\ell_0} \right)_- - \operatorname{Tr}_\ell C_c \left(\frac{Z}{|x|} \right)_- \right) \\
& \quad + c^{-2} \sum_{\ell=L}^Z \left(\operatorname{Tr}_\ell C_c \left(\frac{Z}{|x|} - \chi_Z^{\text{TF}} + \lambda c^2 U(c|x|) \sum_{\ell_0=L_\gamma}^{L'} \Pi_{\ell_0} \right)_- - \operatorname{Tr}_\ell C_c \left(\frac{Z}{|x|} - \chi_Z^{\text{TF}} \right)_- \right) \\
& \quad + \text{konst } Z^{-1/24}.
\end{aligned}$$

Reskaliert man noch $x \mapsto x/c$, so sieht man, dass (5.38) nach oben durch

$$\begin{aligned}
& \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\operatorname{Tr}_\ell C_1 (\gamma|x|^{-1} + \lambda U(|x|))_- - \operatorname{Tr}_\ell C_1 (\gamma|x|^{-1})_- \right) \theta(\ell - L_\gamma) \theta(L - 1 - \ell) \theta(L' - \ell) \\
& \quad + \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\operatorname{Tr}_\ell C_1 (\gamma|x|^{-1} - c^{-2} \chi_Z^{\text{TF}}(x/c) + \lambda U(|x|))_- \right. \\
& \quad \quad \left. - \operatorname{Tr}_\ell C_1 (\gamma|x|^{-1} - c^{-2} \chi_Z^{\text{TF}}(x/c))_- \right) \theta(\ell - L) \theta(Z - \ell) \theta(L' - \ell) \\
& \quad + \text{konst } Z^{-1/24}
\end{aligned} \tag{5.39}$$

beschränkt ist. Hier haben wir bereits antizipiert, dass die zweite Summe für $L = \lceil Z^{1/9} \rceil$ immer bei L und nicht bei $L_\gamma = \mathcal{O}(1)$ beginnt. Wegen Behauptung 5.4.3 sind beide Summanden für hinreichend kleines $|\lambda|$, ein $1/2 < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 3/4\}$ und $\varepsilon \in [0, 2s - 1]$ nach oben durch

$$A_{s,\gamma} \lambda \|U\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}} (\ell + 1/2)^{-4s-\varepsilon} \tag{5.40}$$

beschränkt. Nachdem man beide Seiten von (5.38) durch λ geteilt sowie den Entartungsfaktor $(2\ell + 1)$ von Tr_ℓ nicht vergessen hat, sieht man, dass die Majorante gleichmäßig in λ und Z summierbar in ℓ ist, wenn s und ε die Bedingungen aus dem Satz erfüllen. Für $Z \rightarrow \infty$ verschwindet daher die zweite Summe in (5.39), da sie durch $L^{-4s-\varepsilon+2}$ beschränkt ist. Damit erhalten wir für $\lambda > 0$

$$\begin{aligned}
& \limsup_{Z \rightarrow \infty} \lim_{L' \rightarrow \infty} \sum_{\ell=L_\gamma}^{L'} (2\ell + 1) \int_0^\infty c^{-3} \rho_{\ell,d}(c^{-1}r) U(r) dr \\
& \leq \lim_{L' \rightarrow \infty} \sum_{\ell=L_\gamma}^{L'} (2\ell + 1) \lambda^{-1} \left(\operatorname{Tr} (C_\ell^H - \lambda U)_- - \operatorname{Tr} (C_\ell^H)_- \right),
\end{aligned}$$

beziehungsweise für $\lambda < 0$

$$\begin{aligned}
& \liminf_{Z \rightarrow \infty} \lim_{L' \rightarrow \infty} \sum_{\ell=L_\gamma}^{L'} (2\ell + 1) \int_0^\infty c^{-3} \rho_{\ell,d}(c^{-1}r) U(r) dr \\
& \geq \lim_{L' \rightarrow \infty} \sum_{\ell=L_\gamma}^{L'} (2\ell + 1) \lambda^{-1} \left(\operatorname{Tr} (C_\ell^H - \lambda U)_- - \operatorname{Tr} (C_\ell^H)_- \right).
\end{aligned}$$

Mit dem Weierstraßschen Majorantenkriterium und der mit $(2\ell + 1)/\lambda$ multiplizierten Majoranten aus (5.40) kann man schließlich die Grenzwerte $\liminf_{\lambda \searrow 0}$, falls $\lambda > 0$, beziehungsweise $\limsup_{\lambda \nearrow 0}$, falls $\lambda < 0$, mit der Summe über ℓ (genauer gesagt mit dem Limes $L' \rightarrow \infty$) vertauschen. Gemäß der Behauptungen 5.3.3 und 5.3.4, sprich der starken Scott-Vermutung für festes ℓ (welche wegen der Inklusionseigenschaften aus Lemma 5.4.2 anwendbar sind), konvergieren die rechten Seiten der letzten beiden Abschätzungen gegen

$$\sum_{\ell=L_\gamma}^{L'} (2\ell + 1) \int_0^\infty \rho_\ell^H(r) U(r) dr \quad \text{für } \lambda \rightarrow 0.$$

Lässt man nun $L' \rightarrow \infty$ gehen, erhält man (zusammen mit den ersten $L_\gamma - 1$ Summanden)

$$\begin{aligned} \lim_{Z \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^3} c^{-3} \rho_d(c^{-1}x) U(|x|) dx &= \lim_{Z \rightarrow \infty} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \int_0^\infty c^{-3} \rho_{\ell,d}(c^{-1}r) U(r) dr \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \int_0^\infty \rho_\ell^H(r) U(r) dr = \int_{\mathbb{R}^3} \rho^H(x) U(|x|) dx, \end{aligned}$$

was den Beweis von Satz 5.1.3 schließt.

Kapitel 6

Die starke Scott-Vermutung für Furry-Atome

Das Ziel dieses Kapitels ist die Verallgemeinerung der starken Scott-Vermutung auf das Furry-Modell. Der Beweis beruht wieder auf dem Argument der linearen Antwort und den verallgemeinerten Feynman–Hellmann-Sätzen des letzten Kapitels. Die Schwierigkeit besteht darin, die Bedingungen dieser Sätze nachzuweisen. Dazu zeigen wir, dass die Normen, die durch Potenzen des Furry-Operators mit Kopplungen $\gamma < 1$ erzeugt werden, zu denen, die durch Potenzen des Chandrasekhar-Operators mit Kopplungen $\kappa_\gamma < 2/\pi$ erzeugt werden, äquivalent sind, wobei $\kappa_\gamma = \sqrt{1 - \gamma^2} \cot(\pi\sqrt{1 - \gamma^2}/2)$. Diese Äquivalenz erlaubt es, relative Spur- und Form-Ungleichungen bezüglich des Furry-Operators auf entsprechende Ungleichungen bezüglich des Chandrasekhar-Operators zurückzuführen, um damit die Bedingungen der Feynman-Hellmann-Sätze zu verifizieren.

6.1 Einführung, Definitionen und Resultate

Unser System besteht aus einem am Ursprung fixierten Kern mit Kernladung Z sowie $N = Z$ Elektronen, die durch den Dirac-Operator beschrieben werden. Der unprojizierte Einteilchen-Operator, welcher ein Elektron im Feld einer Punktladung Z beschreibt, ist in atomaren Einheiten durch

$$D_Z^H := -ic\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + c^2\beta - \frac{Z}{|x|} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \quad (6.1)$$

gegeben. Hierbei bezeichnet c wieder die Lichtgeschwindigkeit. Der obere Index H hebt die wasserstoffartige Natur dieses Operators hervor. Des Weiteren sind

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_{\mathbb{C}^2} \end{pmatrix},$$

und $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ die drei Pauli-Matrizen in der Standard-Darstellung. Unter Skalieren $x \mapsto x/c$ ist D_Z^H unitär äquivalent zu

$$c^2 \left[-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta - \frac{\gamma}{|x|} \right] =: c^2 D_\gamma^H, \quad (6.2)$$

wobei $\gamma := Z/c$. Nenciu [135] zeigte, dass D_γ^H , zuerst auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$ definiert, eine ausgezeichnete selbstadjungierte Erweiterung besitzt, wenn $\gamma \in (-1, 1)$. Der Definitionsbereich dieser Realisierung beinhaltet $H^1(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$ und der Formbereich ist $H^{1/2}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$. Insbesondere sind potentielle und kinetische Energie getrennt voneinander endlich [149, 183, 106], sprich

$$\langle \varphi, D_\gamma^H \psi \rangle = \langle \varphi, (-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta)\psi \rangle - \langle \varphi, \gamma|x|^{-1}\psi \rangle$$

für $\varphi \in H^{1/2}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$ und $\psi \in \text{dom}(D_\gamma^H)$. Unter Missbrauch der Notation unterscheiden wir im Folgenden nicht mehr zwischen dem ursprünglichen Operator und seiner Erweiterung.

Wie wir in der Einleitung bereits bemerkt haben, ist die Tatsache, dass ein Teilchen sowohl positive, als auch negative Energie besitzen kann, fragwürdig. In Kapitel 4 haben wir die Projektion des Vielteilchen-Operators auf den positiven Spektralraum des freien Dirac-Operators untersucht, was auf den Brown–Ravenhall-Operator führte. Im vorigen Kapitel sahen wir, dass sich das Vielteilchen-Problem auf der Längenskala Z^{-1} im Grenzwert $Z \rightarrow \infty$ auf ein effektives Einteilchen-Problem, welches lediglich wasserstoffartige Operatoren involviert, reduziert. Um die Scott-Vermutung auch für den Vielteilchen-Dirac-Operator zu untersuchen, erscheint es daher sinnvoll, zunächst die Projektion dieses Operators auf den positiven Spektralraum des Coulomb–Dirac-Operators zu betrachten, was auf den Furry-Operator führt. Der zugrunde liegende Einteilchen-Hilbertraum ist in diesem Fall

$$\mathfrak{H}_Z := \Lambda_Z(L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)) := \mathbf{1}_{(0, \infty)}(D_Z^H)(L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)).$$

Entsprechend definiert man die Projektion Λ_γ für den reskalierten Operator D_γ^H und bezeichnet den entsprechenden Hilbertraum mit \mathfrak{H}_γ . Mit Nencius obigem Resultat ist

$$\Lambda_Z(\mathcal{S}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)) \subseteq H^{1/2}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$$

und dicht in \mathfrak{H}_Z .

Der Vielteilchen-Furry-Operator wird mit

$$D_Z := \sum_{\nu=1}^N (D_Z^H - c^2)_\nu + \sum_{1 \leq \nu < \mu \leq N} \frac{1}{|x_\nu - x_\mu|} \quad \text{in} \quad \bigwedge_{\nu=1}^N \mathfrak{H}_Z \quad (6.3)$$

bezeichnet. Eine allgemeine Grundzustandsdichtematrix d von D_Z in $\bigwedge_{\nu=1}^N \mathfrak{H}_Z$ kann als

$$d = \sum_{\mu=1}^M w_\mu |\psi_\mu\rangle \langle \psi_\mu| \quad (6.4)$$

geschrieben werden. Hierbei bilden die $\psi_\mu \in \bigwedge_{\nu=1}^N \mathfrak{H}_Z$ eine Orthonormalbasis für den Grundzustands-Eigenraum und w_μ sind nicht-negative Gewichte, die $\sum_{\mu=1}^M w_\mu = 1$ erfüllen. Dies spiegelt die Tatsache wider, dass ein fermionischer Grundzustand entartet sein kann. Wir bezeichnen die dazugehörige (über den Spin gemittelte) Einteilchendichte mit

$$\rho_d(x) := N \sum_{\mu=1}^M w_\mu \sum_{\sigma, \sigma_2, \dots, \sigma_N=1}^4 \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} |\psi_\mu(x, \sigma; x_2, \sigma_2; \dots; x_N, \sigma_N)|^2 dx_2 \dots dx_N. \quad (6.5)$$

Wegen der vorliegenden sphärischen Symmetrie ist es sinnvoll – analog zur Drehimpuls-kanalzerlegung für sphärisch symmetrische Operatoren in $L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C})$ – eine Partialwellenzerlegung durchzuführen (siehe [6, Abschnitt 2.1.1] und Anhang C). Demnach besitzt jedes $f \in L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$ die Darstellung

$$f(x) = \sum_{\ell \in \mathbb{N}_0} \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \sum_{m=-j}^j \sum_{\pm} \frac{f_{j,\ell,m}^{\pm}(|x|)}{|x|} \Phi_{j,\ell,m}^{\pm} \left(\frac{x}{|x|} \right) \in \bigoplus_{\ell \in \mathbb{N}_0} \bigoplus_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \bigoplus_{m=-j}^j \mathfrak{H}_{j,\ell,m}, \quad x \in \mathbb{R}^3,$$

wobei $f_{j,\ell,m}^{\pm} \in L^2(\mathbb{R}_+, dr)$ und $\Phi_{j,\ell,m}^{\pm} \in L^2(\mathbb{S}^2 : \mathbb{C}^4)$ sphärische Dirac-Spinoren sind, die eine Orthonormalbasis von $L^2(\mathbb{S}^2 : \mathbb{C}^4)$ bilden, das heißt insbesondere $\langle \Phi_{j,\ell,m}^{\pm}, \Phi_{j',\ell',m'}^{\pm} \rangle_{L^2(\mathbb{S}^2 : \mathbb{C}^4)} = \delta_{\ell\ell'} \delta_{jj'} \delta_{mm'}$. Des Weiteren sind $\mathfrak{H}_{j,\ell} := \bigoplus_{m=-j}^j \mathfrak{H}_{j,\ell,m}$ und $\Pi_{j,\ell,m}$ und $\Pi_{j,\ell}$ bezeichnen die orthogonalen Projektionen auf $\mathfrak{H}_{j,\ell,m}$ beziehungsweise $\mathfrak{H}_{j,\ell}$. Für einen Spurklasse-Operator A in $L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$ bezeichnet

$$\text{Tr}_{j,\ell}(A) := \text{Tr}(\Pi_{j,\ell} A \Pi_{j,\ell}) = \sum_{m=-j}^j \text{Tr}(\Pi_{j,\ell,m} A \Pi_{j,\ell,m}) =: \sum_{m=-j}^j \text{Tr}_{j,\ell,m}(A)$$

die Spur im Kanal (j, ℓ) beziehungsweise (j, ℓ, m) . Für die explizite Darstellung der $\Phi_{j,\ell,m}^{\pm}$ und weitere Details verweisen wir auf Anhang C. Für $r \in \mathbb{R}_+$ definieren wir die radiale Grundzustandsdichte $\rho_{j,\ell,d}$ im Kanal (j, ℓ) (mit $\ell \in \mathbb{N}_0$, $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$, $x' = (x_2, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^{3(N-1)}$ und $\sigma' = (\sigma_2, \dots, \sigma_N) \in \{1, \dots, 4\}^{N-1}$) durch

$$\rho_{j,\ell,d}(r) := \frac{Nr^2}{2j+1} \sum_{\sigma'} \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} dx' [\text{Tr}_{L^2(\mathbb{S}^2 : \mathbb{C}^4)}(\Pi_{j,\ell,1} d)](r; x', \sigma'; r; x', \sigma').$$

Hierbei meint $\Pi_{j,\ell,1}$ die Projektion auf $\mathfrak{H}_{j,\ell}$ bezüglich des ersten Teilchens, das heißt $\Pi_{j,\ell,1}$ wirkt als $\Pi_{j,\ell}$ bezüglich des ersten Teilchens. Man kann diese Gleichheit auch expliziter schreiben, indem man $\tilde{\psi}(x; x', \sigma') \in \mathbb{C}^{4+N-1}$ als die Sammlung $\{\psi(x, \sigma; x', \sigma')\}_{\sigma=1}^4$ für festes $\sigma' \in \{1, \dots, 4\}^{N-1}$ definiert. Dann ist

$$\rho_{j,\ell,d}(r) = \frac{Nr^2}{2j+1} \sum_{m=-j}^j \sum_{\pm} \sum_{\mu=1}^M w_{\mu} \sum_{\sigma'} \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} dx' \left| \int_{\mathbb{S}^2} d\omega \langle \Phi_{j,\ell,m}^{\pm}(\omega), \tilde{\psi}_{\mu}(r\omega; x', \sigma') \rangle_{\mathbb{C}^4} \right|^2, \quad (6.6)$$

wobei das Skalarprodukt in \mathbb{C}^4 nur bezüglich der ersten vier Komponenten von $\tilde{\psi}_{\mu}$ zu verstehen ist. Wir bemerken an dieser Stelle, dass die Spektralprojektion Λ_{γ} mit der Partialwellenzerlegung kommutiert, sprich $\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_{\gamma} = \Lambda_{\gamma} \Pi_{j,\ell,m}$. Dies ist beispielsweise aus der Partialwellenzerlegung von D_{γ}^H (welcher die $\mathfrak{H}_{j,\ell,m}$ invariant lässt) ersichtlich, siehe auch [6, Abschnitte 2.1.1 und 2.1.2]. Weiter bezeichnet man die radiale Dichte im Drehimpulskanal ℓ für $r \in \mathbb{R}_+$ mit

$$\rho_{\ell,d}(r) := \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} (2j+1) \rho_{j,\ell,d}(r).$$

Unser Hauptresultat betrifft die Grundzustandsdichte auf Abständen der Größenordnung Z^{-1} zum Kern. Handrek und Siedentop [80] zeigten, dass Elektronen auf dieser Längenskala

zur Scott-Korrektur der Thomas–Fermi-Approximation der Grundzustandsenergie des Operators $(\bigwedge_{\nu=1}^Z \Lambda_Z) D_Z (\bigwedge_{\nu=1}^Z \Lambda_Z)$ beitragen. Wie in dieser Arbeit spielt auch hier der reskalierte Coulomb–Dirac-Operator

$$\Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1) \Lambda_\gamma = \Lambda_\gamma (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta - \frac{\gamma}{|x|} - 1) \Lambda_\gamma \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$$

eine fundamentale Rolle. Wir betonen, dass die Eigenfunktionen und Eigenwerte von $\Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1) \Lambda_\gamma$ explizit bekannt sind (siehe beispielsweise das klassische Lehrbuch von Bethe [10] oder Thaller [172, Formel (8.265) und (8.266)]). Es bezeichne $\psi_{n,j,\ell,m}^H$ (mit $n \in \mathbb{N}_0$, $\ell \in \mathbb{N}_0$, $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$ und $m \in \{-j, \dots, j\}$) die normierte Eigenfunktion des Operators

$$\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4) \quad (6.7)$$

mit dazugehörigem Eigenwert $e_{\gamma,n,j,\ell}$, welcher unabhängig von der Azimuthal-Quantenzahl m ist. Die Eigenfunktionen sind von der Form

$$\psi_{n,j,\ell,m}^H(x) = \sum_{\pm} \frac{(\psi_{n,j,\ell}^H)^\pm(|x|)}{|x|} \Phi_{j,\ell,m}^\pm(x/|x|),$$

wobei die Funktionen $(\psi_{n,j,\ell}^H)^\pm(r) \in L^2(\mathbb{R}_+)$ ebenfalls unabhängig von m sind.

Wir definieren dann die radiale wasserstoffartige Dichte im Kanal (j, ℓ) (mit $\ell \in \mathbb{N}_0$, $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$) als

$$\rho_{j,\ell}^H(r) := \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\pm} |(\psi_{n,j,\ell}^H)^\pm(r)|^2. \quad (6.8)$$

Dementsprechend ist die wasserstoffartige Dichte im Kanal ℓ durch

$$\rho_\ell^H(r) := \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} (2j + 1) \rho_{j,\ell}^H(r)$$

und die gesamte wasserstoffartige Dichte durch

$$\rho^H(r) := \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} \rho_\ell^H(r)$$

gegeben.

Unser erstes Resultat stellt sicher, dass die reskalierten Grundzustandsdichten $\rho_{\ell,d}$ und ρ_d auf der Längenskala Z^{-1} konvergieren. Genauer gesagt zeigen wir, dass die wasserstoffartigen Dichten für alle $r \in \mathbb{R}_+$ endlich sind. Um dieses und die folgenden Hauptresultate präzise zu formulieren, erinnern wir an den Raum L_{comp}^p der kompakt getragenen L^p -Funktionen und führen die Abbildungen

$$\begin{aligned} [0, 1] &\rightarrow [0, 2/\pi] \\ \gamma &\mapsto \Psi(\gamma) = \sqrt{1 - \gamma^2} \cot\left(\frac{\pi}{2} \sqrt{1 - \gamma^2}\right) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} [0, 1] &\rightarrow [0, 2/\pi] \\ \sigma &\mapsto \Phi(\sigma) := (1 - \sigma) \tan \frac{\pi\sigma}{2} \end{aligned}$$

ein. Beide Funktionen sind auf $[0, 1]$ streng monoton steigend. Zudem erfüllen sie $\Psi(0) = 0$, $\lim_{\gamma \rightarrow 1} \Psi(\gamma) = 2/\pi$, $\Phi(0) = 0$ und $\lim_{\sigma \rightarrow 1} \Phi(\sigma) = 2/\pi$. Darüberhinaus ist Ψ konvex und Φ konkav. Daher gibt es genau ein $\kappa_\gamma \in [0, 2/\pi]$, sodass $\Psi(\gamma) = \kappa_\gamma$ und genau ein $\sigma_\kappa \in [0, 1]$, sodass $\Phi(\sigma_\kappa) = \kappa$. Führt man diese beiden Relationen zusammen, erkennt man, dass es ein eindeutiges $\sigma_\gamma \in [0, 1]$ gibt, sodass

$$\Psi^{-1}(\Phi(\sigma_\gamma)) = \gamma. \quad (6.9)$$

Durch Vergleichen der linken und rechten Seite dieser Gleichung, welche als

$$(1 - \sigma_\gamma) \tan \left(\frac{\pi}{2} \sigma_\gamma \right) = \sqrt{1 - \gamma^2} \cot \left(\frac{\pi}{2} \sqrt{1 - \gamma^2} \right)$$

umgeschrieben werden kann, findet man mit dem Ansatz $1 - \gamma^2 = (1 - \sigma_\gamma)^2$, dass

$$\sigma_\gamma = 1 - \sqrt{1 - \gamma^2} \quad (6.10)$$

die eindeutige Lösung von (6.9) ist. Insbesondere gelten $\sigma_0 = 0$ und $\sigma_1 = 1$ und σ_γ ist streng monoton steigend auf $[0, 1]$. Mit diesen Vorbereitungen formulieren wir

Satz 6.1.1 (Existenz von ρ_ℓ^H und ρ^H). *Seien $0 < \gamma < 1$, $\ell \in \mathbb{N}_0$ und $1/2 < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 3/4\}$. Dann erfüllen die wasserstoffartigen Dichten ρ_ℓ^H und ρ^H*

$$\begin{aligned} \rho_\ell^H(r) &\leq A_{s,\gamma} (\ell + 1/2)^{1-4s} \left[\left(\frac{r}{\ell + \frac{1}{2}} \right)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq \ell + \frac{1}{2}\}} + \left(\frac{r}{\ell + \frac{1}{2}} \right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{\ell + \frac{1}{2} \leq r \leq (\ell + \frac{1}{2})^2\}} \right. \\ &\quad \left. + \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{r \geq (\ell + 1/2)^2\}} \right] \end{aligned}$$

sowie

$$r^2 \rho^H(r) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} \rho_\ell^H(r) \leq A_{s,\gamma} (r^{2-4s} + r^{1/2}).$$

Die Test-Funktionen, für welche die starke Scott-Vermutung wahr ist, gehören zu den aus Kapitel 5 bekannten Funktionenräumen $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$ und $\mathcal{K}_{s,\delta}$. Wir erinnern an die Definitionen

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)} &:= \{W \in L_{\text{loc}}^1(\mathbb{R}_+) : \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}} < \infty\} \\ \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}} &:= \sup_{R \geq 1/2} R^\delta \left[\int_0^R \left(\frac{r}{R} \right)^{2s-1} |W(r)| dr + \int_R^\infty |W(r)| dr \right] \end{aligned} \quad (6.11)$$

und

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_{s,\delta} &:= \{W \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+) : \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}} < \infty\} \\ \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}} &:= \sup_{R \geq 1/2} R^\delta \left[\int_0^R \left(\frac{r}{R}\right)^{2s-1} |W(r)| dr + \int_R^{R^2} \left(\frac{r}{R}\right)^{4s-1} |W(r)| dr \right. \\ &\quad \left. + R^{4s-1} \int_{R^2}^\infty |W(r)| dr \right] \end{aligned} \quad (6.12)$$

für $s \geq 1/2$ und $\delta \in [0, 2s - 1]$.

Wir erinnern daran, dass $r^{-1}L^\infty_{\text{comp}}(\mathbb{R}_+)$ -Funktionen sowohl in $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$, als auch in $\mathcal{K}_{s,\delta}$ für $s > 1/2$ und $\delta \in [0, 2s - 1]$ liegen. Des Weiteren sind $L^1(\mathbb{R}_+, r^\delta dr) \subseteq \mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$ und $L^1(\mathbb{R}_+, r^\delta dr) \cap L^1(\mathbb{R}_+, r^{4s-1+\delta} dr) \subseteq \mathcal{K}_{s,\delta}$, wenn $s \geq 1/2$ und $\delta \in [0, 2s - 1]$.

Wir erinnern an die grundlegenden Inklusionseigenschaften.

Lemma 6.1.2. *Seien $1/2 \leq s' < s$ und $\delta \in [0, 2s - 1]$. Dann erfüllen die Räume $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$ und $\mathcal{K}_{s,\delta}$ die folgenden Inklusionseigenschaften.*

1. *Es gilt $\mathcal{K}_{s',\delta}^{(0)} \subseteq \mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$, falls $\delta \in [0, 2s' - 1]$.*
2. *Ist $W \in \mathcal{K}_{s',\delta}$ mit $\delta \in [0, 2s' - 1]$ kompakt getragen mit $\text{supp}(W) = [0, \rho]$ für ein $\rho > 0$, dann $W \in \mathcal{K}_{s,\delta}$ mit $\|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}} \leq (1 + \rho^{2(s-s')})\|W\|_{\mathcal{K}_{s',\delta}}$.*
3. *Es gilt $\mathcal{K}_{s,\delta} \subseteq \mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$.*

Dies bedeutet, dass die Funktionen glatter am Ursprung sein müssen, je kleiner s ist. Darüberhinaus müssen Funktionen aus $\mathcal{K}_{s,\delta}$ schneller im Unendlichen abfallen als Funktionen aus $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$.

Wir sind nun in der Lage, die Hauptresultate dieses Kapitels, sprich die Konvergenz der reskalierten Grundzustandsdichten, zu formulieren.

Satz 6.1.3 (Konvergenz in einem festen Drehimpulskanal). *Seien $0 < \gamma < 1$, $\ell_0 \in \mathbb{N}_0$, $1/2 < s' < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$, $\delta' \in [0, 2s' - 1]$ und $\varepsilon \in [0, 2s - 1]$. Sei $U = U_1 + U_2$ mit $U_1 \in r^{-1}L^\infty_{\text{comp}}$, $U_2 \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}$ und $|U_2|^{2s} \in \mathcal{K}_{s',\delta'}^{(0)}$. Dann gilt für $Z, c \rightarrow \infty$ mit fixierten $Z/c = \gamma$*

$$\lim_{Z \rightarrow \infty} \int_0^\infty c^{-3} \rho_{\ell_0,d}(c^{-1}r) U(r) dr = \int_0^\infty \rho_{\ell_0}^H(r) U(r) dr.$$

Satz 6.1.4 (Konvergenz in allen Drehimpulskanälen). *Seien $0 < \gamma < 1$, $1/2 < s' < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 3/4\}$, $\delta' \in [4(s - s'), 2s' - 1]$, $\delta \in [0, 2s - 1]$ und $\varepsilon \in [0, 2s - 1]$. Sei $U = U_1 + U_2$ eine Funktion auf $(0, \infty)$ mit $U_1 \in r^{-1}L^\infty_{\text{comp}}$, $U_2 \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}$ und $|U_2|^{2s} \in \mathcal{K}_{s',\delta'} \cap \mathcal{K}_{s,\delta}$. Dann gilt für $Z, c \rightarrow \infty$ mit fixierten $Z/c = \gamma$*

$$\lim_{Z \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^3} c^{-3} \rho_d(c^{-1}x) U(x) dx = \int_{\mathbb{R}^3} \rho^H(x) U(x) dx.$$

Folgendes ist zu den Hauptergebnissen dieses Kapitels zu bemerken.

(1) Bereits im nicht-relativistischen Fall wurde von Iantchenko u. a. nach [95, Theorem 2] bemerkt, dass es nicht notwendig ist, eine Folge von Grundzustandsdichtematrizen zu

betrachten. Stattdessen könnte man auch eine Folge von Zuständen d_Z in $\bigwedge_{\nu=1}^Z \mathfrak{H}_Z$ verwenden, die lediglich approximierende Grundzustände sind, das heißt sie erfüllen

$$\lim_{Z \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr}(D_Z d_Z) - E_Q(Z)}{Z^2} = 0.$$

Hierbei bezeichnet $E_Q(Z)$ den tiefsten Punkt im Spektrum von D_Z in $\bigwedge_{\nu=1}^Z \mathfrak{H}_Z$, welcher kein Eigenwert sein muss. Beispielsweise ist im nicht-relativistischen Fall bekannt, dass der tiefste Punkt des Spektrums des Vielteilchen-Operators kein Eigenwert ist, wenn $N > 2Z$.

(2) Der Beweis der Konvergenzresultate erfolgt wieder mit dem Argument der linearen Antwort und verläuft analog zum Beweis des letzten Kapitels. Wir zeigen zunächst, dass die Differenz der Erwartungswerte des geeignet gestörten und ungestörten Vielteilchen-Hamilton-Operators im ungestörten Grundzustand für $Z \rightarrow \infty$ gegen die Spektralverschiebung zwischen den entsprechend gestörten und ungestörten wasserstoffartigen Einteilchen-Operatoren konvergiert. Dann verwenden wir die verallgemeinerten Feynman–Hellmann-Sätze des letzten Kapitels, um die Summe der negativen Eigenwerte des gestörten Wasserstoff-Operators abzuleiten. Die Schwierigkeit in der Anwendung dieser Sätze besteht darin, die Voraussetzungen, wie beispielsweise die relative Spurklasse-Bedingung, nachzuweisen. Im Kanal (j, ℓ) muss man beispielsweise zeigen, dass

$$(\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (U \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{1/2} (\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1 + M) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{-s}$$

für ein $M > |\inf \text{spec}(\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})|$ und $s > 1/2$ ein Hilbert–Schmidt-Operator ist. Die Bedingung $s > 1/2$ ist, wie im Fall des Chandrasekhar-Operators, entscheidend, da $(1+k)^{-1} \notin L^1(\mathbb{R}_+, dr)$. Die „Idee“ ist es, die relative Spurklasse-Bedingung bezüglich des Furry-Operators auf die Spurklasse-Bedingung bezüglich des Chandrasekhar-Operators zurückzuführen, da diese bereits im letzten Kapitel für Funktionen aus den Klassen $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$ und $\mathcal{K}_{s,\delta}$ nachgewiesen wurde. Die größte technische Hürde, die wir hier nehmen müssen, ist zu zeigen, dass die Chandrasekhar- und Furry-Operatoren miteinander vergleichbar sind. In Korollar 7.1.8 des nächsten Kapitels zeigen wir, dass die von $|p|^s \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}$ und $|\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - \gamma/|x||^s$ erzeugten Normen für festes $\gamma < 1$ in $L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$ (und daher in jedem Kanal (j, ℓ)) äquivalent zueinander sind, wenn $1/2 < s < 3/2 - \sigma_\gamma$, wobei $\sigma_\gamma \in [0, 1]$ in (6.10) definiert wurde. Man erinnere sich dazu auch an Lemma 5.3.6 des letzten Kapitels. Auf diesem Ergebnis aufbauend, zeigen wir in Korollar 6.2.9, dass die Operatoren $\Lambda_\gamma ((|p| + M)^s \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}) \Lambda_\gamma$ und $(\Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma)^s$ vergleichbar sind. Dies ist eines der wichtigsten Werkzeuge in diesem Kapitel.

(3) Es erscheint plausibel, die eben besprochene Maschinerie zu umgehen und die Konvergenzresultate viel direkter zu zeigen. Wir erinnern daran, dass die Eigenwerte des Coulomb–Dirac-Operators explizit bekannt sind (Sommerfeld [164], Gordon [75] und Darwin [30]). Wäre es möglich, eine Schranke wie

$$\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (U \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m} \leq a \Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m} \quad (6.13)$$

für geeignete (nicht-negative, sphärisch symmetrische) Funktionen U zu zeigen, so würde diese Ungleichung die Schranke

$$\frac{e_{\gamma,n,j,\ell,0} - e_{\gamma,n,j,\ell,\lambda}}{\lambda} \leq a \cdot e_{\gamma,n,j,\ell,0}$$

implizieren, wobei $e_{\gamma,n,j,\ell,\lambda}$ die negativen Eigenwerte von $\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H - \lambda U - 1) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m}$ bezeichnen. Insbesondere ist die rechte Seite in $n \in \mathbb{N}_0$ summierbar. Für festes $\ell \in \mathbb{N}_0$

und $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$ würde diese Ungleichung die Vertauschung des Grenzwerts $\lambda \rightarrow 0$ mit der Summe über n erlauben, um im Anschluß das gewöhnliche Feynman–Hellmann-Theorem anzuwenden. Diese Hoffnung wird durch die Arbeit von Iantchenko u. a. [95] im nicht-relativistischen Fall genährt. Mit Hilfe ihres Lemmas 2 zeigten sie zunächst punktweise Konvergenz der Radialdichten, indem sie $U(r) = \delta(r - a)$ für ein festes $a > 0$ ansetzten. Mit der Poincaré-Ungleichung konnten sie $|f(a)|^2 \leq 4a\pi^{-1}\|f'\|_2^2$ abschätzen, was es ihnen erlaubte eine zu (6.13) ähnliche Schranke an die Eigenwerte des gestörten Operators zu formulieren. Sie verfahren dann wie eben geschildert, um die Summe der negativen Eigenwerte nach λ abzuleiten. Für weitere Details verweisen wir auf ihre Beweise von [95, Lemma 2 und Theorem 1].

(4) Wie im letzten Kapitel, zeigen wir, dass die wasserstoffartige Dichte ρ^H für alle $r \in \mathbb{R}_+$ endlich ist und erhalten ebenfalls die punktweise obere Schranke

$$\rho^H(r) \leq A_\gamma r^{-3/2} \quad \text{für } r \rightarrow \infty.$$

Obwohl die Eigenfunktionen des Coulomb–Dirac-Operators explizit bekannt sind, ist es immer noch ein offenes Problem, sowohl das exakte asymptotische Verhalten für $r \rightarrow \infty$ zu bestimmen, als auch die Monotonie von ρ^H zu zeigen.

Notation

Wir werden oft Funktionen des Furry-Operators $\Lambda_\gamma D_\gamma^H \Lambda_\gamma$ (oder seiner Projektion auf $\mathfrak{H}_{j,\ell,m}$) mit Funktionen von Operatoren $S \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}$ in $L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$ (oder ihrer Projektionen auf $\mathfrak{H}_{j,\ell,m}$) vergleichen. Hierbei ist S typischerweise ein nach unten beschränkter, sphärisch symmetrischer, skalarer Operator wie $\sqrt{-\Delta} - \gamma/|x|$, oder eine nicht-negative, sphärisch symmetrische, skalarwertige Funktion, wie die Test-Funktion U . Um die Notation einfach zu halten, werden wir allerdings den Zusatz $\mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}$ unterdrücken, falls dies unmittelbar aus dem Kontext hervorgeht.

6.2 Anwendung der Feynman–Hellmann-Sätze im Furry-Bild – fester Drehimpuls

Die beiden wichtigsten technischen Werkzeuge für die Durchführung des Arguments der linearen Antwort wurden bereits im letzten Kapitel eingeführt, siehe die Sätze 5.2.2 und 5.2.3. Der Vollständigkeit halber wiederholen wir diese hier kurz. Coulombische Singularitäten werden mit dem ersten, und $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$ -Funktionen mit dem zweiten Satz behandelt. Im Folgenden schreiben wir wieder $A_- = -A\chi_{(-\infty,0)}$, das heißt der Negativteil ist positiv definiert.

Behauptung 6.2.1. *Sei A ein selbstadjungierter Operator, sodass A_- in der Spurklasse ist. Sei $B \geq 0$ ein bezüglich A relativ Form-beschränkter Operator. Angenommen, es gibt $1/2 \leq s \leq 1$, sodass für eine hinreichend große Zahl $M > 0$ sowohl*

$$(A + M)^{-s} B (A + M)^{-s} \quad \text{in der Spurklasse ist} \tag{6.14}$$

sowie

$$\limsup_{\lambda \rightarrow 0} \left\| (A + M)^s (A - \lambda B + M)^{-s} \right\| < \infty \tag{6.15}$$

gilt. Dann erfüllen die einseitigen Ableitungen von

$$\lambda \mapsto S(\lambda) := \operatorname{Tr}(A - \lambda B)_-$$

die Relationen

$$\operatorname{Tr} B\chi_{(-\infty,0)}(A) = D^- S(0) \leq D^+ S(0) = \operatorname{Tr} B\chi_{(-\infty,0]}(A).$$

Inbesondere ist S bei $\lambda = 0$ genau dann differenzierbar, wenn $B|_{\ker A} = 0$.

Behauptung 6.2.2. Sei A ein selbstadjungierter Operator, sodass A_- in der Spurklasse ist und B ein nicht-negativer Operator. Angenommen, es gibt Zahlen $\max\{s', 1/2\} < s < 1$, sodass für ein $M > 0$ die Bedingung (6.14) (mit demselben s) erfüllt ist und eine Konstante $a > 0$, sodass

$$B^{2s} \leq a(A + M)^{2s'} \quad (6.16)$$

gilt. Dann sind die Aussagen in Behauptung 6.2.1 wahr.

Wir erinnern nochmals daran, dass die Bedingungen der Behauptungen garantieren, dass die rechtsseitige Ableitung endlich ist. Des Weiteren stimmen die links- und rechtsseitigen Ableitungen überein, wenn Null kein Eigenwert von A ist.

In der Anwendung wird A der Furry-Operator $\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m}$ sein, wohingegen $B = \Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(U \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4})\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m}$ die Rolle der Test-Funktion übernimmt. Wir erinnern zunächst an einige grundlegende Eigenschaften von $\Lambda_\gamma D_\gamma^H \Lambda_\gamma$.

Lemma 6.2.3. Seien $\ell \in \mathbb{N}_0$, $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$ und $\gamma \in (0, 1)$. Dann ist $\Lambda_\gamma D_\gamma^H \Lambda_\gamma$ von unten beschränkt und $\operatorname{Tr}_{j,\ell}(\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1)\Lambda_\gamma)_- < \infty$. Darüberhinaus ist Null kein Eigenwert von $\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1)\Lambda_\gamma$.

Beweis. Per Definition von Λ_γ ist $\Lambda_\gamma D_\gamma^H \Lambda_\gamma$ von unten beschränkt.

Die Endlichkeit von $\operatorname{Tr}_{j,\ell}(\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1)\Lambda_\gamma)_-$ folgt beispielsweise aus der expliziten Formel der Eigenwerte (Sommerfeld [164], Gordon [75] und Darwin [30])

$$e_{\gamma,n,j,\ell} = \left(1 - \frac{\gamma^2}{\left(n + 1 + \ell - (j + \frac{1}{2}) + \sqrt{(j + 1/2)^2 - \gamma^2} \right)^2 + \gamma^2} \right)^{1/2} - 1.$$

Alternativ folgt sie, für $\ell \geq 1$, aus dem Min-Max-Prinzip für Operatoren mit Spektrallücken (Griesemer u. a. [76]), welches

$$\operatorname{Tr}_{j,\ell}(\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1)\Lambda_\gamma)_- \leq \operatorname{Tr}_{j,\ell}(\Lambda_0(D_\gamma^H - 1)\Lambda_0)_-$$

mit $\Lambda_0 := \mathbf{1}_{(0,\infty)}(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta)$ impliziert sowie [70, Theorem 2.1], welches wiederum besagt, dass die rechte Seite endlich ist. Man bemerkt, dass das Min-Max-Prinzip [76, Theorem 1] auf Drehimpulskanäle eingeschränkte Dirac-Operatoren mit radialen Potentialen, die Coulomb-Singularitäten besitzen, anwendbar ist. Wegen $\ell \geq 1$ und der Hardy-Ungleichung sind auch Kopplungskonstanten $\gamma \in (0, 1)$ behandelbar. Für mehr Details verweisen wir auf die Diskussion nach [80, Formel (29)].

Die Tatsache, dass Null kein Eigenwert von $\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1)\Lambda_\gamma$ ist, wird im Buch von Thaller [171, Corollary 4.22] oder Balinsky und Evans [6, Theorem 3.1.4] bewiesen. Obwohl die Aussage dort nur für $\gamma \leq \sqrt{3}/2$ gemacht wird, setzt sie sich auf das Intervall $[\sqrt{3}/2, 1)$ fort, da der Beweis lediglich von der Gültigkeit eines Virial-Satzes abhängt. Dieser wurde jedoch auch für Coulomb–Dirac-Operatoren von Kalf [100] für Kopplungen $|\gamma| < 1$ gezeigt. \square

Die folgenden Behauptungen zeigen die Anwendbarkeit der Behauptungen 6.2.1 und 6.2.2. Sie sind entscheidend, um die lineare Antwort zu berechnen und spielen daher eine zentrale Rolle beim Beweis der Konvergenzresultate.

Behauptung 6.2.4. *Seien $\gamma \in (0, 1)$, $1/2 < s' < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$, $\delta' \in [0, 2s' - 1]$ und $\varepsilon \in [0, 2s - 1]$. Seien $0 \leq U \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}$ mit $U^{2s} \in \mathcal{K}_{s',\delta'}^{(0)}$, $\ell \in \mathbb{N}_0$ und $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$ und $m \in \{-j, \dots, j\}$. Dann ist die Abbildung*

$$\lambda \mapsto \text{Tr}_{j,\ell,m}(\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - \lambda U \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4} - 1)\Lambda_\gamma)_-$$

bei $\lambda = 0$ differenzierbar mit Ableitung $\int_0^\infty \rho_{j,\ell}^H(r)U(r) dr$.

Behauptung 6.2.5. *Seien $\gamma \in (0, 1)$, $0 \leq U \in r^{-1}L_{\text{comp}}^\infty(\mathbb{R}_+)$, $\ell \in \mathbb{N}_0$ und $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$ und $m \in \{-j, \dots, j\}$. Dann ist die Abbildung*

$$\lambda \mapsto \text{Tr}_{j,\ell,m}(\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - \lambda U \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4} - 1)\Lambda_\gamma)_-$$

bei $\lambda = 0$ differenzierbar mit Ableitung $\int_0^\infty \rho_{j,\ell}^H(r)U(r) dr$.

Wir bemerken Folgendes zur Endlichkeit von $\rho_{j,\ell}^H$ beziehungsweise $\rho_\ell^H(r) = \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} (2j + 1)\rho_{j,\ell}^H(r)$.

Bemerkungen 6.2.6. Wie im letzten Kapitel, ist es Teil der Behauptungen, dass das Integral $\int_0^\infty \rho_\ell^H(r)U(r)dr$ für die Test-Funktionen aus den obigen Behauptungen endlich ist. Wir geben später wieder einen direkteren Beweis dieser Tatsache (Behauptung 6.3.5), der nicht auf der Maschinerie der Behauptungen 6.2.2 und 6.2.1 beruht.

Des Weiteren kann wieder sehr direkt gezeigt werden, dass die potentielle Energie im Kanal ℓ endlich ist, was aus einer expliziten Rechnung von Burke und Grant [17] folgt. Sie bestimmten den Erwartungswert des Coulomb-Potentials für die Eigenfunktionen $\psi_{n,j,\ell,m}^H$. Darauf aufbauend zeigten Handrek und Sidentop in [80, Lemma 2], dass es für gegebenes $\gamma_0 \in (0, 1)$ eine Konstante a_{γ_0} gibt, sodass für alle $n \in \mathbb{N}_0$, $j \geq 1/2$, $\ell = j \pm 1/2$, $m = -j, \dots, j$ und $\gamma \in (0, \gamma_0]$ die Ungleichung

$$\langle \psi_{n,j,\ell,m}^H, \frac{\gamma}{|x|} \psi_{n,j,\ell,m}^H \rangle \leq \frac{a_{\gamma_0} \gamma^2}{(n + \ell + 1)^2}$$

gilt. Offensichtlich ist die rechte Seite in $n \in \mathbb{N}_0$, $m = -j, \dots, j$ und $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$ summierbar.

Wir zeigen die Behauptungen 6.2.4 und 6.2.5 mit Hilfe der Behauptungen 6.2.2 beziehungsweise 6.2.1. Der Rest dieses Abschnitts befasst sich daher mit der Verifikation der Annahmen dieser Sätze. Dazu reduzieren wir das Problem zunächst auf den Chandrasekhar-Operator und verwenden dann die Resultate des letzten Kapitels.

In diesem und dem nächsten Abschnitt werden wir oft die Davis–Sherman-Ungleichung [32, 33] (siehe auch [18, Theorem 4.19]) verwenden. Sie besagt, dass für alle operatorkonvexen Funktionen f und alle orthogonalen Projektionen P die Form-Ungleichung

$$Pf(PAP)P \leq Pf(A)P$$

für alle selbstadjungierten Operatoren A in einem Hilbertraum \mathcal{H} gilt. Ist darüberhinaus $f(0) = 0$, so vereinfacht sich die Ungleichung zu

$$f(PAP) \leq Pf(A)P. \quad (6.17)$$

Tatsächlich gilt mit $\tilde{P} = 1 - P$

$$f(PAP) = Pf(PAP)P + \tilde{P}f(PAP)\tilde{P},$$

da P mit PAP und daher jeder Funktion $f(PAP)$ kommutiert. Andererseits gilt wegen des Spektralsatzes $\tilde{P}f(T)\tilde{P} = \tilde{P}f(\tilde{P}T\tilde{P})\tilde{P}$ für jeden selbstadjungierten Operator T , der mit \tilde{P} beziehungsweise P vertauscht. Daher erhält man mit $T = PAP$

$$\tilde{P}f(PAP)\tilde{P} = \tilde{P}f(\tilde{P}PAP\tilde{P})\tilde{P} = \tilde{P}f(0)\tilde{P}$$

und die rechte Seite verschwindet, wenn $f(0) = 0$. Typischerweise ist die Situation so, dass $A \geq 0$ und $f(x) = x^{2s}$ mit $s \in [1/2, 1]$.

6.2.1 Vergleich der Chandrasekhar- und Furry-Operatoren

Wir bezeichnen den masselosen Coulomb–Dirac-Operator mit

$$D_\gamma^0 := -i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - \frac{\gamma}{|x|} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4).$$

Wir nehmen folgendes Resultat (Korollar 7.1.8) aus Kapitel 7 vorweg. Es besagt, dass es ein $s > 1/2$ gibt (welches von der festen Kopplungskonstanten $\gamma < 1$ abhängt), sodass die durch $|p|^s$ und $|D_\gamma^0|^s$ erzeugten Normen äquivalent sind. Wir erinnern an die Relation $\sigma_\gamma = 1 - \sqrt{1 - \gamma^2}$, siehe (6.10).

Lemma 6.2.7. *Seien $\gamma \in (0, 1)$ und $s \in (0, 1]$. Dann gibt es eine Konstante $A_{s,\gamma} < \infty$, sodass*

$$|D_\gamma^0|^{2s} \leq A_{s,\gamma}|p|^{2s} \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$$

und, falls zusätzlich $s < 3/2 - \sigma_\gamma$, dann gibt es eine Konstante $a_{s,\gamma} > 0$, sodass

$$|D_\gamma^0|^{2s} \geq a_{s,\gamma}|p|^{2s} \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4).$$

Bemerkung 6.2.8. Die erste Schranke ist eine unmittelbare Konsequenz aus der Hardy-Ungleichung und der Operatormonotonie von $x \mapsto x^s$ mit $0 < s < 1$. Die zweite Schranke folgt aus Lemma 5.3.6 (siehe auch Satz 7.1.1 des nächsten Kapitels) und einer Beobachtung von Morozov und Müller [132]. Für $s = 1$ zeigen Sie in Lemma IV.4, dass $(D_\gamma^0)^2$ nach unten durch eine Konstante mal $(|p| - \kappa_\gamma/|x|)^2 \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}$ abgeschätzt werden kann. Andererseits besagt ihr Lemma IV.5, dass auf dem orthogonalen Komplement dieses Kanals $(D_\gamma^0)^2$ tatsächlich durch eine Konstante mal $|p|^2 \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}$ abgeschätzt werden kann. Dies kann wiederum (wie zuvor mit der Hardy-Ungleichung) weiter von unten durch $(|p| - \kappa_\gamma/|x|)^2 \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}$ abgeschätzt werden, wobei $\kappa_\gamma = \Psi(\gamma)$ (siehe die Diskussion vor (6.10)). Die zweite Abschätzung in Lemma 6.2.7 würde daher sofort für alle $\ell \geq 1$ und $\gamma < 1$ beziehungsweise für $\ell = 0$ und $\kappa_\gamma < 1/2$ (wegen der Hardy-Ungleichung), sprich $\gamma < \sqrt{3}/2$ aus der Operatormonotonie von $x \mapsto x^s$ mit $0 < s < 1$ folgen. Der Punkt von Lemma 6.2.7 ist, dass *beliebige* Kopplungskonstanten $\gamma < 1$ behandelt werden können, wenn man die Potenz $s = 1$ (was „Operator-Ungleichungen“ entspricht) verkleinert, aber immer noch über $1/2$ behält (was „Form-Ungleichungen“ entspricht).

Aus Lemma 6.2.7 folgern wir folgendes wichtige

Korollar 6.2.9. *Seien $\gamma \in (0, 1)$ und $M > |\inf \text{spec}(\Lambda_\gamma D_\gamma^H)| = 0$. Falls $0 < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$, dann gilt*

$$\Lambda_\gamma (|p| + M)^{2s} \Lambda_\gamma \leq \frac{2 \max\{a_{s,\gamma}^{-1}, 1\}}{(1 - \gamma^2)^s} (\Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma)^{2s}. \quad (6.18)$$

Ist $0 < s \leq 1$, dann gilt zudem

$$(\Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma)^{2s} \leq A_{M,\gamma} \Lambda_\gamma (|p| + M)^{2s} \Lambda_\gamma.$$

Beweis. Wir beginnen mit der ersten Ungleichung und bemerken zunächst, dass

$$(D_\gamma^H)^2 \geq (1 - \gamma^2) |D_\gamma^0|^2$$

nach dem Beweis von [132, Corollary I.2] gilt. Da $\Lambda_\gamma D_\gamma^H \Lambda_\gamma = \Lambda_\gamma |D_\gamma^H| \Lambda_\gamma$ und $\Lambda_\gamma |D_\gamma^H|^{2s} \Lambda_\gamma = (\Lambda_\gamma D_\gamma^H \Lambda_\gamma)^{2s}$ (wegen des Spektralsatzes), erhält man mit der Operatormonotonie von $x \mapsto x^s$ mit $s \in (0, 1]$

$$\begin{aligned} \Lambda_\gamma (|D_\gamma^0|^{2s} + M^{2s}) \Lambda_\gamma &\leq (1 - \gamma^2)^{-s} \Lambda_\gamma (|D_\gamma^H|^{2s} + M^{2s}) \Lambda_\gamma \\ &\leq 2^{(1-2s)+} (1 - \gamma^2)^{-s} (\Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma)^{2s}. \end{aligned}$$

Es genügt daher

$$\Lambda_\gamma (|p| + M)^{2s} \Lambda_\gamma \leq 2^{(2s-1)+} \max\{1, a_{s,\gamma}^{-1}\} \Lambda_\gamma (|D_\gamma^0|^{2s} + M^{2s}) \Lambda_\gamma \quad (6.19)$$

zu zeigen. Mit Lemma 6.2.7 und der Annahme an s gilt

$$(|p| + M)^{2s} \leq 2^{(2s-1)+} (|p|^{2s} + M^{2s}) \leq 2^{(2s-1)+} (a_{s,\gamma}^{-1} |D_\gamma^0|^{2s} + M^{2s}).$$

Die rechte Seite ist durch $2^{(2s-1)+} \max\{1, a_{s,\gamma}^{-1}\} (|D_\gamma^0|^{2s} + M^{2s})$ beschränkt, was (6.19) zeigt.

Um die zweite Behauptung zu zeigen, verwenden wir wieder $\Lambda_\gamma D_\gamma^H = \Lambda_\gamma |D_\gamma^H|$, um

$$\begin{aligned} (\Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma)^{2s} &\leq 2^{(2s-1)+} \Lambda_\gamma ((\Lambda_\gamma |D_\gamma^H| \Lambda_\gamma)^{2s} + M^{2s}) \Lambda_\gamma \\ &= 2^{(2s-1)+} \Lambda_\gamma (|D_\gamma^H|^{2s} + M^{2s}) \Lambda_\gamma \end{aligned}$$

zu folgern. Mit der Hardy-Ungleichung und $(\alpha \cdot p + \beta)^2 = p^2 + 1$ erhält man

$$|D_\gamma^H|^2 = (D_\gamma^H)^2 \leq 2 \left(p^2 + 1 + \frac{\gamma^2}{|x|^2} \right) \leq a_{M,\gamma} (|p|^2 + 1) \leq a_{M,\gamma} (|p| + M)^2.$$

Daraus folgt mit Operatormonotonie positiver Wurzeln und der vorigen Schranke

$$(\Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma)^{2s} \leq a_{M,\gamma} \Lambda_\gamma (|p| + M)^{2s} \Lambda_\gamma,$$

was den Beweis schließt. \square

Wir führen die folgenden *nicht-radialen* Operatoren

$$\begin{aligned} p_\ell &:= \Pi_{j,\ell,m}(\sqrt{-\Delta} \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4})\Pi_{j,\ell,m}, \\ C_\ell &:= \Pi_{j,\ell,m} \left((\sqrt{-\Delta + 1} - 1) \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4} \right) \Pi_{j,\ell,m} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4) \end{aligned}$$

sowie die entsprechenden *radialen* Operatoren

$$p_\ell^{(r)} := \sqrt{-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}}, \quad (6.20)$$

$$C_\ell^{(r)} := \sqrt{-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + 1} - 1 \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}_+ : \mathbb{C}, dr) \quad (6.21)$$

ein und bemerken, dass die Schranken aus Korollar 6.2.9 in jedem einzelnen Raum $\mathfrak{H}_{j,\ell,m}$ gelten. Wir erinnern daran, dass jedes Element $f \in \mathfrak{H}_{j,\ell,m}$ von der Form

$$f(x) = \sum_{\pm} |x|^{-1} f^\pm(|x|) \Phi_{j,\ell,m}^\pm(x/|x|)$$

ist, wobei $f^\pm \in L^2(\mathbb{R}_+)$ und $\Phi_{j,\ell,m}^\pm$, bis auf (j, ℓ, m) -abhängige Normierungskonstanten, die \mathbb{C}^4 -Vektoren $(Y_{\ell,m-1/2}, Y_{\ell,m+1/2}, 0, 0)$ beziehungsweise $(0, 0, Y_{2j-\ell,m-1/2}, Y_{2j-\ell,m+1/2})$ sind. Sowohl D_γ^H , als auch $|p| \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}$ lassen die Räume $\mathfrak{H}_{j,\ell,m}$ invariant, das heißt sie kommutieren mit der Projektion $\Pi_{j,\ell,m}$, denn für $f \in \mathfrak{H}_{j,\ell,m} \cap H^{1/2}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$ und $g \in \mathfrak{H}_{j',\ell',m'} \cap H^{1/2}(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$ sind

$$\langle f, (|p| \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4})g \rangle_{L^2(\mathbb{R}^3:\mathbb{C}^4)} = (\langle f^+, p_\ell^{(r)} g^+ \rangle_{L^2(\mathbb{R}_+:\mathbb{C})} + \langle f^-, p_{2j-\ell}^{(r)} g^- \rangle_{L^2(\mathbb{R}_+:\mathbb{C})}) \delta_{jj'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

und (mit $\kappa_{j,\ell} = j(j+1) - \ell(\ell+1) + 1/4$, siehe auch [6, Formel (2.1.43)])

$$\langle f, D_\gamma^H g \rangle_{L^2(\mathbb{R}^3:\mathbb{C}^4)} = \left\langle \begin{pmatrix} f^+ \\ f^- \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 - \frac{\gamma}{r} & -\frac{d}{dr} - \frac{\kappa_{j,\ell}}{r} \\ \frac{d}{dr} - \frac{\kappa_{j,\ell}}{r} & -1 - \frac{\gamma}{r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g^+ \\ g^- \end{pmatrix} \right\rangle_{L^2(\mathbb{R}_+:\mathbb{C}^2)} \delta_{jj'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}.$$

Diese Tatsache und der Spektralsatz zeigen, dass die Projektion von (6.18) auf $\mathfrak{H}_{j,\ell,m}$, sprich

$$\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (|p| + M)^{2s} \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m} \leq a_{s,\gamma} \Pi_{j,\ell,m} (\Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma)^{2s} \Pi_{j,\ell,m}, \quad (6.22)$$

äquivalent ist zu

$$\Lambda_\gamma (\Pi_{j,\ell,m} (|p| + M) \Pi_{j,\ell,m})^{2s} \Lambda_\gamma \leq a_{s,\gamma} (\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{2s}. \quad (6.23)$$

6.2.2 Beweis von Behauptung 6.2.4

Wir erinnern an die Spur- und Form-Ungleichungen aus Behauptung 5.3.10, die für die Klasse $\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$ galten. In diesem Kapitel wurden sie bezüglich Potenzen von $C_\ell^{(r)} + M$ formuliert. Wegen des Satzes von Plancherel kann man sie aber genauso gut durch Potenzen von $p_\ell^{(r)} + M$ ausdrücken. Hier werden wir sie allerdings bezüglich des nicht-radialen Operators p_ℓ formulieren. Im Folgenden bezeichnen $\|\cdot\|_1$ und $\|\cdot\|_2$ die Spur- beziehungsweise die Hilbert–Schmidt-Norm im jeweiligen Hilbertraum, also entweder $L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$ oder $L^2(\mathbb{R}_+ : \mathbb{C}, dr)$.

Behauptung 6.2.10. *Seien $M > 0$, $s \in (1/2, 1]$, $\delta \in [0, 2s - 1]$, $\ell \in \mathbb{N}_0$, $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$ und $0 \leq W \in \mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$. Dann gilt*

$$\|(\Pi_{j,\ell,m}(W \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4})\Pi_{j,\ell,m})^{1/2}(p_\ell + M\Pi_{j,\ell,m})^{-s}\|_2^2 \leq A_{s,M}(\ell + 1/2)^{-\delta}\|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}} \quad (6.24)$$

und insbesondere

$$\Pi_{j,\ell,m}(W \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4})\Pi_{j,\ell,m} \leq A_{s,M}(\ell + 1/2)^{-\delta}\|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}}(p_\ell + M\Pi_{j,\ell,m})^{2s}. \quad (6.25)$$

Beweis. Es genügt (6.24) zu zeigen, da die Form-Ungleichung unmittelbar aus der Spur-Ungleichung folgt. Da $\Pi_{j,\ell,m}$ mit $p_\ell + M\Pi_{j,\ell}$ kommutiert und $\mathfrak{H}_{j,\ell,m}$ invariant unter $|p|$ ist, gilt zunächst

$$\begin{aligned} & (p_\ell + M\Pi_{j,\ell,m})^{-s}\Pi_{j,\ell,m}W\Pi_{j,\ell,m}(p_\ell + M\Pi_{j,\ell,m})^{-s} \\ &= \Pi_{j,\ell,m}(p_\ell + M\Pi_{j,\ell,m})^{-s}\Pi_{j,\ell,m}W\Pi_{j,\ell,m}(p_\ell + M\Pi_{j,\ell,m})^{-s}\Pi_{j,\ell,m} \\ &= \Pi_{j,\ell,m}(|p| + M)^{-s}\Pi_{j,\ell,m}W\Pi_{j,\ell,m}(|p| + M)^{-s}\Pi_{j,\ell,m} \\ &= \Pi_{j,\ell,m}(|p| + M)^{-s}W(|p| + M)^{-s}\Pi_{j,\ell,m}. \end{aligned}$$

Bezeichnet $\{(f_n^+, f_n^-)\}_{n \in \mathbb{N}}$ eine Orthonormalbasis in $L^2(\mathbb{R}_+ : \mathbb{C}^2)$, kann die linke Seite von (6.24) mit der Abkürzung $A_\ell := (p_\ell^{(r)} + M)^{-s}W(p_\ell^{(r)} + M)^{-s}$ durch

$$\begin{aligned} & \text{Tr}_{j,\ell,m}[(|p| + M)^{-s}W(|p| + M)^{-s} \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}] \\ &= \sum_n \left(\langle f_n^+, (p_\ell^{(r)} + M)^{-s}W(p_\ell^{(r)} + M)^{-s}f_n^+ \rangle_{L^2(\mathbb{R}_+)} \right. \\ & \quad \left. + \langle f_n^-, (p_{2j-\ell}^{(r)} + M)^{-s}W(p_{2j-\ell}^{(r)} + M)^{-s}f_n^- \rangle_{L^2(\mathbb{R}_+)} \right) \\ & \leq \text{Tr}_{L^2(\mathbb{R}_+ : \mathbb{C}^2)}((A_\ell + A_{2j-\ell}) \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2}) \\ &= 2(\|W^{1/2}(p_\ell^{(r)} + M)^{-s}\|_2^2 + \|W^{1/2}(p_{2j-\ell}^{(r)} + M)^{-s}\|_2^2). \end{aligned}$$

abgeschätzt werden. Kombiniert man dies mit Behauptung 5.3.10 des letzten Kapitels, spricht

$$\|W^{1/2}(p_\ell^{(r)} + M)^{-s}\|_2^2 \leq A_{s,M}(\ell + 1/2)^{-\delta}\|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}},$$

und bemerkt, dass $(\ell + 1/2)(2j - \ell + 1/2)^{-1} \leq 3$ für $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$, folgt die Behauptung. \square

Kombiniert man Korollar 6.2.9 in jedem Kanal (j, ℓ, m) (sprich (6.23)) und Behauptung 6.2.10, erhält man eine Verallgemeinerung der Ungleichungen (6.24) und (6.25) bezüglich des Furry-Operators.

Behauptung 6.2.11. *Seien $M > |\inf \text{spec}(\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma D_\gamma^H \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})|$, $\gamma \in (0, 1)$, $1/2 < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$, $\delta \in [0, 2s - 1]$, $\ell \in \mathbb{N}_0$, $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$ und $0 \leq W \in \mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}$. Dann gilt*

$$\begin{aligned} & \|(\Pi_{j,\ell,m}(W \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4})\Pi_{j,\ell,m})^{1/2}\Lambda_\gamma(\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D_\gamma^H + M)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^{-s}\|_2^2 \\ & \leq A_{\gamma,s,M}(\ell + 1/2)^{-\delta}\|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}} \end{aligned} \quad (6.26)$$

und insbesondere

$$\begin{aligned} & \Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(W \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4})\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m} \\ & \leq A_{\gamma,s,M}(\ell + 1/2)^{-\delta}\|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}^{(0)}}(\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D_{j,\ell}^H + M)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^{2s}. \end{aligned} \quad (6.27)$$

Da $\Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m} = \Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma$, ist die linke Seite von (6.26) äquivalent zu

$$\|(\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (W \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{1/2} (\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{-s}\|_2^2.$$

Mit diesen Vorbereitungen kommen wir zum

Beweis von Behauptung 6.2.4. Wir wenden Behauptung 6.2.2 mit $1/2 < s' < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$,

$$\begin{aligned} A &= \Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m} \quad \text{und} \\ B &= \Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (U \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m} \geq 0 \end{aligned}$$

an. Dazu verifizieren wir die Annahmen von Behauptung 6.2.2. Die Annahmen, die den ungestörten Operator $\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m}$ betreffen, folgen aus Lemma 6.2.3. Insbesondere stimmen die links- und rechtsseitigen Ableitungen bei $\lambda = 0$ überein, da Null kein Eigenwert von $\Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1) \Lambda_\gamma$ ist.

Für $M' > 1$ ist die Hilbert–Schmidt-Norm

$$\|(\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (U \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{1/2} (\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1 + M') \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{-s}\|_2$$

wegen Behauptung 6.2.11 mit $M := M' - 1 > 0$ endlich, da $U \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}$.

Schließlich verifizieren wir

$$(\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (U \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{2s} \leq a (\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{2s'} \quad (6.28)$$

für ein $1/2 \leq s' < s$. Man bemerkt, dass diese Form-Ungleichung wieder impliziert, dass $\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (U \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m}$ infinitesimal Form-beschränkt bezüglich $\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma D_\gamma^H \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m}$ ist. Um (6.28) zu zeigen, verwenden wir die Davis–Sherman-Ungleichung (6.17) mit $f(x) = x^{2s}$ und erhalten

$$(\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (U \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{2s} \leq \Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (U \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4})^{2s} \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m}.$$

Die linke Seite von (6.28) ist somit wegen (6.27) durch eine Konstante mal $(\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{2s'}$ beschränkt, da $U^{2s} \in \mathcal{K}_{s',\delta'}^{(0)}$. Dies schließt den Beweis von Behauptung 6.2.4. \square

6.2.3 Beweis von Behauptung 6.2.5

Die größte Schwierigkeit in der Anwendung von Behauptung 6.2.1 besteht darin (6.15), sprich

$$\limsup_{\lambda \rightarrow 0} \|(\Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma)^s (\Lambda_\gamma (D_\gamma^H - \lambda U + M) \Lambda_\gamma)^{-s}\| < \infty \quad (6.29)$$

für $0 \leq U(x) \leq \|rU\|_\infty |x|^{-1}$ und ein $1/2 < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$ (in jedem Drehimpulskanal) nachzuweisen. Wir zeigen zunächst, dass $\Lambda_\gamma (D_\gamma^H - \lambda U + M) \Lambda_\gamma$ für hinreichend kleines $|\lambda|$ invertierbar ist.

Lemma 6.2.12. *Seien $0 < \gamma < 1$, $U \in r^{-1}L^\infty(\mathbb{R}_+)$, $M > 0$ und $\lambda \in \mathbb{R}$ so, dass $|\lambda| < 2/(\pi A_\gamma \|rU\|_\infty)$ (wobei A_γ die Konstante aus (6.18) mit $s = 1/2$ ist). Dann gilt*

$$\inf \text{spec} (\Lambda_\gamma (D_\gamma^H - \lambda U + M) \Lambda_\gamma) > 0. \quad (6.30)$$

Beweis. Aus Katos Ungleichung und Korollar 6.2.9 mit $s = 1/2$ folgt

$$\begin{aligned} \Lambda_\gamma(D_\gamma^H - \lambda U + M)\Lambda_\gamma &\geq \Lambda_\gamma(D_\gamma^H + M)\Lambda_\gamma - |\lambda| \|rU\|_\infty \Lambda_\gamma |x|^{-1} \Lambda_\gamma \\ &\geq \Lambda_\gamma(D_\gamma^H + M)\Lambda_\gamma - \frac{\pi}{2} \|rU\|_\infty |\lambda| \Lambda_\gamma (|p| + M) \Lambda_\gamma \\ &\geq \left(1 - \frac{\pi}{2} \|rU\|_\infty A_\gamma |\lambda|\right) \Lambda_\gamma(D_\gamma^H + M)\Lambda_\gamma \geq \left(1 - \frac{\pi}{2} \|rU\|_\infty A_\gamma |\lambda|\right) M \Lambda_\gamma > 0, \end{aligned}$$

was (6.30) zeigt. \square

Die Abschätzung (6.29) ist äquivalent zu

$$\limsup_{\lambda \rightarrow 0} \|(\Lambda_\gamma(D_\gamma^H + M)\Lambda_\gamma)^s (\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - \lambda U + M)\Lambda_\gamma)^{-s} \varphi\| \leq a_{\gamma,s,M} \|\varphi\|$$

für eine Konstante $a_{\gamma,s,M} > 0$ und alle $\varphi \in \mathfrak{H}_\gamma$. Setzt man $\psi := (\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - \lambda U + M)\Lambda_\gamma)^{-s} \varphi \in \mathfrak{H}_\gamma$, ist dies äquivalent zur Form-Ungleichung

$$(\Lambda_\gamma(D_\gamma^H + M)\Lambda_\gamma)^{2s} \leq a_{\gamma,s,M}^2 (\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - \lambda U + M)\Lambda_\gamma)^{2s} \quad (6.31)$$

für alle λ in einer offenen Umgebung von Null und einer von λ unabhängigen Konstanten $a_{\gamma,s,M}$. Wir zeigen diese Ungleichung im folgenden

Lemma 6.2.13. *Seien $0 < \gamma < 1$, $0 \leq U(r) \in r^{-1}L^\infty$, $1/2 \leq s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$ und $M > |\inf \text{spec}(\Lambda_\gamma D_\gamma^H)| = 0$. Falls $\lambda \in \mathbb{R}$*

$$|\lambda| < \min \left\{ \frac{1}{(2^{4s-1} A_{s,\gamma})^{1/(2s)} \|rU\|_\infty}, \frac{2}{\pi A_{1/2,\gamma} \|rU\|_\infty}, \left(\frac{2}{\pi A_{1/2,\gamma} \|rU\|_\infty} \right)^2, \frac{1}{2^{4-1/s} (1 + M^{-2}) A_{s,\gamma}^{1/s} \left(1 + 4 \left(\gamma + \frac{2}{\pi A_{1/2,\gamma}} \right)^2 \right)}, 1 \right\}$$

erfüllt, wobei $A_{s,\gamma}$ die Konstante aus (6.18) ist, dann gibt es eine Konstante $a_{\gamma,s,M} > 0$, sodass

$$(\Lambda_\gamma(D_\gamma^H + M)\Lambda_\gamma)^{2s} \leq a_{\gamma,s,M} (\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - \lambda U + M)\Lambda_\gamma)^{2s}.$$

Beweis. Wir haben bereits in (6.30) gesehen, dass $\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - \lambda U + M)\Lambda_\gamma > 0$, wenn λ die Bedingung des Lemmas erfüllt. Wir unterscheiden nun zwischen $\lambda < 0$ und $\lambda > 0$ und beginnen mit dem Fall $\lambda > 0$. Aus Operatorkonvexität von $x \mapsto x^{2s}$ mit $s \in [1/2, 1]$ und der Davis–Sherman-Ungleichung (6.17) folgt

$$\begin{aligned} (\Lambda_\gamma(D_\gamma^H + M)\Lambda_\gamma)^{2s} &= (\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - \lambda U + M + \lambda U)\Lambda_\gamma)^{2s} \\ &\leq 2^{2s-1} (\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - \lambda U + M)\Lambda_\gamma)^{2s} + 2^{2s-1} \lambda^{2s} (\Lambda_\gamma U \Lambda_\gamma)^{2s} \\ &\leq 2^{2s-1} (\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - \lambda U + M)\Lambda_\gamma)^{2s} + 2^{2s-1} \lambda^{2s} \Lambda_\gamma U^{2s} \Lambda_\gamma. \end{aligned} \quad (6.32)$$

Da $U(x) \leq \|rU\|_\infty |x|^{-1}$, folgt aus der Hardy-Ungleichung

$$U^2 \leq 4 \|rU\|_\infty^2 (|p| + M)^2.$$

Mit Operatormonotonie von $x \mapsto x^s$ mit $s \in [0, 1]$ und Korollar 6.2.9 erhält man dann

$$\Lambda_\gamma U^{2s} \Lambda_\gamma \leq 4^s \|rU\|_\infty^{2s} \Lambda_\gamma (|p| + M)^{2s} \Lambda_\gamma \leq 4^s \|rU\|_\infty^{2s} A_{s,\gamma} (\Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma)^{2s},$$

wobei $A_{s,\gamma}$ die Konstante aus (6.18) ist. Setzt man diese Abschätzung in (6.32) ein, erhält man

$$(\Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma)^{2s} \leq 2^{2s-1} (1 - 2^{4s-1} A_{s,\gamma} \|rU\|_\infty^{2s} \lambda^{2s})^{-1} (\Lambda_\gamma (D_\gamma^H - \lambda U + M) \Lambda_\gamma)^{2s},$$

was die Aussage für $\lambda > 0$ zeigt.

Falls $\lambda < 0$, definieren wir $\mu := -\lambda > 0$ und $\varepsilon := \sqrt{\mu} \in (0, 1)$. Wegen Operatorkonvexität ist

$$\begin{aligned} & (\Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma)^{2s} \\ &= \left[(1 - \varepsilon) \Lambda_\gamma (D_\gamma^H + \mu U + M) \Lambda_\gamma + \varepsilon \Lambda_\gamma \left(D_\gamma^H - \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \mu U + M \right) \Lambda_\gamma \right]^{2s} \\ &\leq 2^{2s-1} (1 - \varepsilon)^{2s} (\Lambda_\gamma (D_\gamma^H + \mu U + M) \Lambda_\gamma)^{2s} \\ &\quad + 2^{2s-1} \varepsilon^{2s} \left(\Lambda_\gamma \left(D_\gamma^H - \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \mu U + M \right) \Lambda_\gamma \right)^{2s}. \end{aligned} \tag{6.33}$$

Hierbei haben wir verwendet, dass beide Operatoren wegen (6.30) und der Bedingung an $\lambda = -\mu$ (die Kopplungskonstante der Störung im zweiten Summanden ist $\mathcal{O}(\sqrt{\mu})$ für kleine μ) nicht-negativ sind, weshalb wir die Operatorkonvexität verwenden durften. Der erste Summand auf der rechten Seite ist bereits der gewünschte Ausdruck. Im Folgenden schätzen wir den zweiten Summanden durch

$$\varepsilon^{2s} F(\mu) \cdot (\Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma)^{2s}$$

ab und zeigen, dass $F(\mu)$ gleichmäßig in μ beschränkt ist. Die Behauptung folgt dann wie im Fall $\lambda > 0$, indem man diesen Term auf die linke Seite von (6.33) bringt und beide Seiten der Ungleichung durch $(1 - \varepsilon^{2s} \|F\|_\infty)$ teilt (was erlaubt ist, wenn ε klein genug ist). Zunächst ist wegen $\Lambda_\gamma D_\gamma^H = \Lambda_\gamma |D_\gamma^H|$ und (6.17)

$$\left(\Lambda_\gamma \left(D_\gamma^H - \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \mu U + M \right) \Lambda_\gamma \right)^{2s} \leq \Lambda_\gamma \left(|D_\gamma^H| - \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \mu U + M \right)^{2s} \Lambda_\gamma.$$

Mit $(\alpha \cdot p + \beta)^2 = p^2 + 1$, $U(x) \leq \|rU\|_\infty |x|^{-1}$ und der Hardy-Ungleichung schätzen wir dann

$$\begin{aligned} & \left(|D_\gamma^H| - \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \mu U + M \right)^2 \\ &\leq 4 \left(|p|^2 + M^2 + 1 + \left(\gamma + \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \mu \|rU\|_\infty \right)^2 |x|^{-2} \right) \\ &\leq 4(1 + M^{-2}) \left(\left(1 + 4 \left(\gamma + \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \mu \|rU\|_\infty \right)^2 \right) |p|^2 + M^2 \right) \\ &\leq 4(1 + M^{-2}) \left(1 + 4 \left(\gamma + \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \mu \|rU\|_\infty \right)^2 \right) (|p| + M)^2 \end{aligned}$$

ab. Zieht man die s -te Wurzel aus diesem Ausdruck und wendet Korollar 6.2.9 an, erhält man

$$\begin{aligned} F(\mu) &= 2^{4s-1}(1+M^{-2})^s A_{s,\gamma} \left(1 + 4 \left(\gamma + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \mu \|rU\|_\infty \right)^2 \right)^s \\ &\leq 2^{4s-1}(1+M^{-2})^s A_{s,\gamma} \left(1 + 4 \left(\gamma + \frac{2}{\pi A_{1/2,\gamma}} \right)^2 \right)^s, \end{aligned}$$

was den Beweis beschließt. \square

Beweis von Behauptung 6.2.5. Wir wenden Behauptung 6.2.1 mit $s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$,

$$\begin{aligned} A &= \Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m} \quad \text{und} \\ B &= \Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (U \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m} \geq 0 \end{aligned}$$

an. Die Bedingungen an $\Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1) \Lambda_\gamma$ wurden bereits im Beweis von Behauptung 6.2.4 nachgewiesen. Die Tatsache, dass $\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (U \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m}$ relativ Form-beschränkt bezüglich $\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m}$ ist, folgt aus Katos Ungleichung und Korollar 6.2.9 (siehe auch (6.30)) in jedem Kanal (j, ℓ, m) .

Für $M > 0$ ist die Hilbert-Schmidt-Norm

$$\|(\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (U \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{1/2} (\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{-s}\|_2$$

wegen Behauptung 6.2.11 endlich, da $U \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}$.

Schließlich ist auch Annahme (6.15), konkret (6.29) beziehungsweise

$$(\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{2s} \leq A_{\gamma,s,M} (\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H - \lambda U + M) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{2s}$$

für λ in einer offenen Umgebung von Null wegen Lemma 6.2.13 erfüllt, da das Lemma insbesondere in jedem einzelnen Kanal (j, ℓ, m) gilt. \square

6.3 Kontrolle großer Drehimpulse

Um die Notation möglichst einfach zu halten, unterdrücken wir $\otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}$, sofern dies aus dem Kontext ersichtlich ist. Darüberhinaus bezeichnen wir den freien, massiven Dirac-Operator mit $D = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta$ und erinnern an die Notation $\text{Tr}_{j,\ell,m}(A) = \text{Tr}(\Pi_{j,\ell,m} A \Pi_{j,\ell,m})$ für einen Spurklasse-Operator A in $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$.

Die folgende Behauptung wird es uns – wie im letzten Kapitel – erlauben, das Weierstraßsche Majorantenkriterium anzuwenden, um Satz 6.1.4 aus Satz 6.1.3 zu folgern.

Behauptung 6.3.1. *Seien $0 < \gamma < 1$, $0 \leq V(r) \leq \gamma/r$, $\lambda \in \mathbb{R}$, $1/2 < s' < s \leq 3/4$, $\varepsilon \in [0, 2s - 1]$, $\delta \in [0, 2s - 1]$ und $\delta' \in [4(s - s'), 2s' - 1]$. Sei weiterhin $U = U_1 + U_2$ eine reellwertige Funktion auf $(0, \infty)$ mit $U_1 \in r^{-1}L_{\text{comp}}^\infty(\mathbb{R}_+)$ und $U_2 \leq 0$ oder $U_2 \geq 0$, sodass $U_2 \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}$ und $|U_2|^{2s} \in \mathcal{K}_{s',\delta'} \cap \mathcal{K}_{s,\delta}$. Falls $|\lambda|$ die Schranke*

$$\begin{aligned} |\lambda| &< \min \left\{ \frac{3}{10 \|rU_1\|_\infty}, A_{s,s'}^{1/s} \| |U_2|^{2s} \|_{\mathcal{K}_{s',\delta'}}^{-1/(2s)}, \right. \\ &\quad \left. (1 - \gamma) \cdot \left[\|rU_1\|_\infty + A_{s,a_\gamma}^{1/(2s)} \| |U_2|^{2s} \|_{\mathcal{K}_{s,\delta}}^{1/(2s)} \right]^{-1} \right\} \end{aligned} \tag{6.34}$$

erfüllt, wobei $A_{s,s'}$ die universelle Konstante C , welche in Lemma 5.2.4 auftaucht, bezeichnet und A_{s,a_γ} die Konstante in (6.36) bezeichnet, dann gibt es ein $A_{\gamma,s} < \infty$ und ein $L_\gamma \in \mathbb{N}$, sodass für alle $\mathbb{N} \ni \ell \geq L_\gamma$, $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$ und $m \in \{-j, \dots, j\}$ die Abschätzung

$$\begin{aligned} & \text{Tr}_{j,\ell,m}(\Lambda_\gamma(D - V - \lambda U - 1)\Lambda_\gamma)_- - \text{Tr}_{j,\ell,m}(\Lambda_\gamma(D - V - 1)\Lambda_\gamma)_- \\ & \leq A_{\gamma,s}\lambda\|U\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}}(\ell + 1/2)^{-4s-\varepsilon} \end{aligned}$$

gilt.

6.3.1 Beweis von Behauptung 6.3.1

Wir beginnen die zu Behauptung 5.3.10 analogen Spur- und Form-Ungleichungen bezüglich $C_\ell + a(\ell + 1/2)^{-s}\Pi_{j,\ell,m}$ zu formulieren. Wir erinnern daran, dass diese nötig waren, um Funktionen aus den Klassen $\mathcal{K}_{s,\delta}$ kontrollieren zu können. Die folgende Behauptung folgt aus Behauptung 5.4.6 genau wie Behauptung 6.2.10 aus Behauptung 5.3.10 folgte.

Behauptung 6.3.2. *Seien $a > 0$, $\delta \in [0, 2s - 1]$, $s \in (1/2, 3/4]$, $\ell \in \mathbb{N}_0$, $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$ und $0 \leq W \in \mathcal{K}_{s,\delta}$. Dann gilt*

$$\|(\Pi_{j,\ell,m}W\Pi_{j,\ell,m})^{1/2}(C_\ell + a(\ell + 1/2)^{-2}\Pi_{j,\ell,m})^{-s}\|_2^2 \leq A_{s,a}(\ell + 1/2)^{-\delta}\|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}} \quad (6.35)$$

und insbesondere

$$\Pi_{j,\ell,m}W\Pi_{j,\ell,m} \leq A_{s,a}\|W\|_{\mathcal{K}_{s,\delta}}(\ell + 1/2)^{-\delta}(C_\ell + a(\ell + 1/2)^{-2}\Pi_{j,\ell,m})^{2s}. \quad (6.36)$$

Für den Beweis von Behauptung 6.3.1 kontrollieren wir wieder Dirac-Operatoren durch entsprechende skalare Operatoren. Dazu brauchen wir unter anderem

Lemma 6.3.3. *Seien $a > 0$ und $\ell \in \mathbb{N}_0$ so, dass $1 \geq a(\ell + 1/2)^{-2}$. Dann gilt*

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta - 1 + a(\ell + 1/2)^{-2})^2 \geq (\sqrt{p^2 + 1} - 1 + a(\ell + 1/2)^{-2})^2.$$

Beweis. Die Aussage ist äquivalent zur Ungleichung

$$\begin{aligned} & p^2 + 1 + (1 - a(\ell + 1/2)^{-2})^2 - 2(1 - a(\ell + 1/2)^{-2})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta) \\ & \geq p^2 + 1 + (1 - a(\ell + 1/2)^{-2})^2 - 2(1 - a(\ell + 1/2)^{-2})\sqrt{p^2 + 1}. \end{aligned}$$

Da $1 \geq a(\ell + 1/2)^{-2}$ und $\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta \leq |\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta| = \sqrt{p^2 + 1}$, folgt die Behauptung. \square

Für $V \leq \gamma/r$ und geeignete Potentiale U zeigen wir, dass es ein $a_\gamma > 0$ gibt, sodass

$$\inf \text{spec}(\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D - V - \lambda U - 1)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m}) \geq -a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2},$$

falls $|\lambda|$ klein genug ist. Dies folgt im Wesentlichen aus der ℓ -Abhängigkeit der Eigenwerte des Coulomb–Dirac-Operators beziehungsweise dem Verhalten von $|\Pi_{j,\ell,m}D\Pi_{j,\ell,m}|$ für kleine Impulse. Genauer gesagt kann man anhand der exakten Ausdrücke der Eigenwerte [164, 30, 75] sehen, dass es ein $\tilde{a}_\gamma > 0$ gibt, sodass

$$\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m} \geq -\tilde{a}_\gamma(\ell + 1/2)^{-2} \quad (6.37)$$

für alle $\ell \in \mathbb{N}_0$ und $1/2 \leq j \leq \ell \pm 1/2$. Tatsächlich zeigten Handrek und Siedentop in [80, Corollary 1], dass die Abweichung zwischen den Eigenwerten des Dirac- und des Schrödinger-Operators im Kanal (j, ℓ) mit $\ell \in \mathbb{N}$ und $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$ durch eine Konstante mal $\gamma^4/[\ell(n + \ell)^3]$ (mit $n \in \mathbb{N}$) beschränkt ist. Wir erinnern nochmals daran, dass die Eigenwerte des sphärisch symmetrischen Operators unabhängig von $m \in \{-j, \dots, j\}$ sind.

Behauptung 6.3.4. Seien $\ell \in \mathbb{N}_0$, $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$, $0 < \gamma < 1$, $0 \leq V(r) \leq \gamma/r$, $\lambda \in \mathbb{R}$, $s \in (1/2, 3/4]$, $\delta \in [0, 2s - 1]$, $U(r) = U_1 + U_2$ eine reellwertige Funktion auf $(0, \infty)$ mit $U_1 \in r^{-1}L^\infty(\mathbb{R}_+)$ und $|U_2|^{2s} \in \mathcal{K}_{s,\delta}$. Dann gibt es eine Konstante $a_\gamma > \tilde{a}_\gamma$ und ein $L_\gamma \in \mathbb{N}$, sodass für alle $\mathbb{N} \ni \ell \geq L_\gamma$

$$\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D - 1 - V - \lambda U) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m} \geq -a_\gamma (\ell + 1/2)^{-2}$$

gilt, sofern $|\lambda|$ die Schranke

$$|\lambda| < (1 - \gamma) \cdot \left[\|rU_1\|_\infty + A_{s,a_\gamma}^{1/(2s)} \| |U_2|^{2s} \|_{\mathcal{K}_{s,\delta}}^{1/(2s)} \right]^{-1} \quad (6.38)$$

erfüllt, wobei A_{s,a_γ} die Konstante aus (6.36) ist.

Beweis. Zunächst gilt wegen der Schranke (6.37) für den tiefsten Eigenwert des Coulomb-Dirac-Operators im Kanal (j, ℓ) die Abschätzung

$$\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D - V - 1) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m} \geq \Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m} \geq -a_\gamma (\ell + 1/2)^{-2}.$$

Als Nächstes bemerkt man, dass die Hardy-Ungleichung (zunächst in $L^2(\mathbb{R}_+)$ – man erinnere sich auch an die Definition (6.20))

$$\left(g, \frac{(\ell + 1/2)^2}{r^2} g \right) = \int_0^\infty \frac{\ell(\ell + 1) + 1/4}{r^2} |g(r)|^2 dr \leq (g, (p_\ell^{(r)})^2 g)$$

sowie (mit dem Satz von Plancherel ebenfalls zunächst in $L^2(\mathbb{R}_+)$)

$$\begin{aligned} & \| (p_\ell^{(r)} + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2})(C_\ell^{(r)} + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2})^{-1} \| \\ & \leq \frac{\ell + 1/2}{\sqrt{2a_\gamma}} + \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{a_\gamma}}{2\sqrt{2}(\ell + 1/2)} \end{aligned}$$

auch in $\mathfrak{H}_{j,\ell,m}$ gelten. Dies folgt mit denselben Argumenten wie im Beweis von Behauptung 6.2.10 (mit $f(x) = \sum_{\pm} |x|^{-1} f^\pm(|x|) \Phi_{j,\ell,m}^\pm(x/|x|) \in \mathfrak{H}_{j,\ell,m}$ und $a_\ell = a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2}$), denn

$$\begin{aligned} & \langle f, (p_\ell + a_\ell)^{-1} \Pi_{j,\ell,m} |x|^{-2} \Pi_{j,\ell,m} (p_\ell + a_\ell)^{-1} f \rangle_{L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)} \\ & = \langle f^+, (p_\ell^{(r)} + a_\ell)^{-1} r^{-2} (p_\ell^{(r)} + a_\ell)^{-1} f^+ \rangle_{L^2(\mathbb{R}_+)} \\ & \quad + \langle f^-, (p_{2j-\ell}^{(r)} + a_\ell)^{-1} r^{-2} (p_{2j-\ell}^{(r)} + a_\ell)^{-1} f^- \rangle_{L^2(\mathbb{R}_+)} \\ & \leq (\ell + 1/2)^{-2} + (2j - \ell + 1/2)^{-2} \leq 10(\ell + 1/2)^{-2} \end{aligned} \quad (6.39)$$

und

$$\begin{aligned} & \langle f, (C_\ell + a_\ell)^{-1} (p_\ell + a_\ell)^2 (C_\ell + a_\ell)^{-1} f \rangle_{L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)} \\ & = \langle f^+, (C_\ell^{(r)} + a_\ell)^{-1} (p_\ell^{(r)} + a_\ell)^2 (C_\ell^{(r)} + a_\ell)^{-1} f^+ \rangle_{L^2(\mathbb{R}_+)} \\ & \quad + \langle f^-, (C_{2j-\ell}^{(r)} + a_\ell)^{-1} (p_{2j-\ell}^{(r)} + a_\ell)^2 (C_{2j-\ell}^{(r)} + a_\ell)^{-1} f^- \rangle_{L^2(\mathbb{R}_+)} \\ & \leq \left(\frac{\ell + 1/2}{\sqrt{2a_\gamma}} + \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{a_\gamma}}{2\sqrt{2}(\ell + 1/2)} \right)^2. \end{aligned} \quad (6.40)$$

Mit der Dreiecksungleichung, Lemma 6.3.3 (in jedem Kanal (j, ℓ, m) und für alle $\ell \geq L_\gamma \geq \sqrt{a_\gamma} - 1/2$) und den obigen Schranken erhält man für $f = \Pi_{j,\ell,m}f$ (und der Tatsache, dass D_γ^H den Raum $\mathfrak{H}_{j,\ell,m}$ invariant lässt und mit Λ_γ kommutiert),

$$\begin{aligned}
& \|\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1 + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2})\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m}f\| \\
&= \|(D - \gamma/|x| - 1 + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2})\Lambda_\gamma f\| \\
&\geq \|(D - 1 + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2})\Lambda_\gamma f\| - \gamma\| |x|^{-1}\Lambda_\gamma f\| \\
&\geq \left[1 - \gamma\sqrt{10} \left(\frac{1}{\sqrt{2a_\gamma}} + \frac{1}{2\ell + 1} + \sqrt{\frac{a_\gamma}{8}}(\ell + 1/2)^{-2}\right)\right] \|(C_\ell + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2})\Lambda_\gamma f\| \\
&\geq \left[1 - \gamma\sqrt{10} \left(\frac{1}{\sqrt{2a_\gamma}} + \frac{1}{2\ell + 1} + \sqrt{\frac{a_\gamma}{8}}(\ell + 1/2)^{-2}\right)\right] \|\Lambda_\gamma(C_\ell + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2})\Lambda_\gamma f\|.
\end{aligned} \tag{6.41}$$

Die letzte Ungleichung gilt (wegen $\Lambda_\gamma \leq 1$) für alle $\mathbb{N} \ni \ell \geq L_\gamma$, falls a_γ hinreichend groß gewählt wird und $L_\gamma \in \mathbb{N}$ die Ungleichung

$$\sqrt{10} \left((2a_\gamma)^{-\frac{1}{2}} + (2L_\gamma + 1)^{-1} + \sqrt{\frac{a_\gamma}{8}}(L_\gamma + 1/2)^{-2} \right) < 1 \tag{6.42}$$

erfüllt. Damit ist für alle $\ell \geq L_\gamma$

$$\begin{aligned}
& (\Lambda_\gamma(C_\ell + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2}\Pi_{j,\ell,m})\Lambda_\gamma)^2 \\
&\leq (1 - \gamma)^{-2} (\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1 + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2})\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^2.
\end{aligned}$$

Aus dieser Ungleichung, der Positivität von $\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1 + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2})\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m}$ für hinreichend großes a_γ (wegen (6.37)) und der Operatormonotonie der Quadratwurzel folgt

$$\begin{aligned}
& \Lambda_\gamma(C_\ell + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2}\Pi_{j,\ell,m})\Lambda_\gamma \\
&\leq (1 - \gamma)^{-1}\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1 + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2})\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m} \\
&\leq (1 - \gamma)^{-1}\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D - V - 1 + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2})\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m}.
\end{aligned} \tag{6.43}$$

Andererseits folgt aus der Hardy-Ungleichung (6.39) und dem Satz von Plancherel (6.40) die Gültigkeit der Ungleichung

$$\Pi_{j,\ell,m}U_1\Pi_{j,\ell,m} \leq \|rU_1\|_\infty (C_\ell + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2}\Pi_{j,\ell,m})$$

für alle $\mathbb{N} \ni \ell \geq L_\gamma$. Darüberhinaus folgt aus (6.36)

$$|\Pi_{j,\ell,m}U_2\Pi_{j,\ell,m}|^{2s} \leq A_{s,a_\gamma} \| |U_2|^{2s} \|_{\mathcal{K}_{s,\delta}} (\ell + 1/2)^{-\delta} (C_\ell + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2}\Pi_{j,\ell,m})^{2s}.$$

Wegen Operatormonotonie von $x \mapsto x^s$ mit $s \in (0, 1]$ folgt daraus

$$\Pi_{j,\ell,m}U\Pi_{j,\ell,m} \leq \left[\|rU_1\|_\infty + A_{s,a_\gamma}^{1/(2s)} \| |U_2|^{2s} \|_{\mathcal{K}_{s,\delta}}^{1/(2s)} \right] (C_\ell + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2}\Pi_{j,\ell,m}).$$

Kombiniert man diese Schranke mit (6.43) unter der Voraussetzung (6.38) an λ , erhält man schließlich

$$\begin{aligned}
& \Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D - V - 1 + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2})\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m} \\
&\geq (1 - \gamma)\Lambda_\gamma(C_\ell + a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2}\Pi_{j,\ell,m})\Lambda_\gamma \geq \Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma\lambda U\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m},
\end{aligned}$$

was die Behauptung zeigt. \square

Mit diesen Vorbereitungen kommen wir zum

Beweis von Behauptung 6.3.1. Wegen des Variationsprinzips ist (für jedes $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$)

$$\begin{aligned} s_{j,\ell,\lambda} &:= \operatorname{Tr}_{j,\ell,m}(\Lambda_\gamma(D - V - \lambda U - 1)\Lambda_\gamma)_- - \operatorname{Tr}_{j,\ell,m}(\Lambda_\gamma(D - V - 1)\Lambda_\gamma)_- \\ &\leq \lambda \operatorname{Tr}(d_{j,\ell,\lambda}\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma U \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m}), \end{aligned}$$

wobei $d_{j,\ell,\lambda}$ die orthogonale Projektion auf den negativen Spektralbereich von $\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D - V - \lambda U - 1)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m}$ bezeichnet. Wir erinnern nochmals daran, dass die negativen Eigenwerte dieses Operators nicht von m abhängen, weshalb wir keinen Index m schreiben. Definiert man

$$\begin{aligned} A &:= d_{j,\ell,\lambda}(\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D - V - \lambda U - 1 + a_\ell)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^s \\ B &:= (\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D - V - \lambda U - 1 + a_\ell)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^{-s} \Lambda_\gamma(C_\ell + a_\ell\Pi_{j,\ell,m})^s \\ C &:= (C_\ell + a_\ell\Pi_{j,\ell,m})^{-s}\Pi_{j,\ell,m}U\Pi_{j,\ell,m}(C_\ell + a_\ell\Pi_{j,\ell,m})^{-s}, \end{aligned}$$

so gilt

$$s_{j,\ell,\lambda} \leq \lambda \operatorname{Tr} ABCB^*A^*.$$

Wir wählen

$$a_\ell := \frac{a}{(\ell + 1/2)^2}$$

für ein hinreichend großes $a > a_\gamma$ (aus der unteren Schranke in Behauptung 6.3.4) und betonen, dass a zwar von γ abhängen kann, aber unabhängig von ℓ und λ gewählt wird. Weiter bemerken wir, dass wegen Behauptung 6.3.4 $\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D - V - \lambda U - 1 + a_\ell)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m} \geq 0$ ist. Da $d_{j,\ell,\lambda}$ auf den negativen Spektralraum von $\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D - V - \lambda U - 1)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m}$ projiziert, folgt aus Behauptung 6.3.4, dass $\|A\|^2 \leq a^{2s}(\ell + 1/2)^{-4s}$ für alle $\mathbb{N} \ni \ell \geq L_\gamma$ und einem hinreichend großem L_γ , welches (6.42) erfüllt (wobei a_γ durch a ersetzt werden muss). Darüberhinaus ist (wie im Beweis von Behauptung 5.4.3) $\|C\|_1 \leq A_{s,a_\gamma}\|U\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}}(\ell + 1/2)^{-\varepsilon}$, was unmittelbar aus Behauptung 6.3.2 folgt.

Wir widmen uns nun dem Operator B und zeigen, dass $\|B\| \leq A_{s,\gamma}$. Dazu schreiben wir $B = B_1B_2$, wobei

$$\begin{aligned} B_1 &:= (\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D - V - \lambda U - 1 + a_\ell)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^{-s} \\ &\quad (\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D - V - \lambda U_1 - 1 + a_\ell)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^s \\ B_2 &:= (\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D - V - \lambda U_1 - 1 + a_\ell)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^{-s} \Lambda_\gamma(C_\ell + a_\ell\Pi_{j,\ell,m})^s. \end{aligned}$$

Wir schätzen $\|B_2\|$ ab, indem wir zuerst die Form-Ungleichung

$$\Lambda_\gamma(C_\ell + a_\ell\Pi_{j,\ell,m})^2\Lambda_\gamma \leq A_\gamma(\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D - V - \lambda U_1 - 1 + a_\ell)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^2$$

zeigen und im Anschluß die Operatormonotonie von $x \mapsto x^s$ mit $s \in (0, 1]$ sowie die folgende Ungleichung von Frank [63, Formel (2.7)], welche eng mit (6.17) verwandt ist, verwenden. Ist $T \geq 0$ ein linearer Operator mit trivialem Kern, P eine orthogonale Projektion und f eine operatormonotone Funktion, dann gilt

$$Pf(T)P \leq Pf(PTP)P.$$

Falls $f(0) = 0$, vereinfacht sich die rechte Seite zu $f(PTP)$ (siehe auch die Diskussion nach (6.17)). In unserem Fall sind $T = (C_\ell + a_\ell \Pi_{j,\ell,m})^2$, $P = \Lambda_\gamma$, $f(x) = x^s$ und $0 < s \leq 1$. Somit lautet die Ungleichung

$$\begin{aligned} \Lambda_\gamma (C_\ell + a_\ell \Pi_{j,\ell,m})^{2s} \Lambda_\gamma &\leq \Lambda_\gamma (\Lambda_\gamma (C_\ell + a_\ell \Pi_{j,\ell,m})^2 \Lambda_\gamma)^s \Lambda_\gamma \\ &= (\Lambda_\gamma (C_\ell + a_\ell \Pi_{j,\ell,m})^2 \Lambda_\gamma)^s. \end{aligned} \quad (6.44)$$

Mit der Dreiecksungleichung und $\Lambda_\gamma \leq 1$ schätzen wir zunächst für $f = \Pi_{j,\ell,m} f$

$$\begin{aligned} &\|\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D - \gamma/r + \gamma/r - V - \lambda U_1 - 1 + a_\ell) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m} f\| \\ &\geq \|\Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1 + a_\ell) \Lambda_\gamma f\| - (2\gamma + |\lambda| \|rU_1\|_\infty) \| |x|^{-1} \Lambda_\gamma f \| \end{aligned} \quad (6.45)$$

ab. Da Λ_γ mit $D_\gamma^H - 1 + a_\ell$ vertauscht, folgt aus Lemma 6.3.3

$$\begin{aligned} \|\Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1 + a_\ell) \Lambda_\gamma f\| &= \|(D_\gamma^H - 1 + a_\ell) \Lambda_\gamma f\| \\ &\geq \|(D - 1 + a_\ell) \Lambda_\gamma f\| - \gamma \| |x|^{-1} \Lambda_\gamma f \| \\ &\geq \|(C_\ell + a_\ell \Pi_{j,\ell,m}) \Lambda_\gamma f\| - \gamma \| |x|^{-1} \Lambda_\gamma f \| \end{aligned} \quad (6.46)$$

wie im Beweis von (6.41). Kombiniert man (6.45) und (6.46) mit der Hardy-Ungleichung (6.39)

$$\Pi_{j,\ell,m} |x|^{-2} \Pi_{j,\ell,m} \leq 10(\ell + 1/2)^{-2} (p_\ell + a_\ell \Pi_{j,\ell,m})^2$$

sowie dem Satz von Plancherel (6.40)

$$\|(p_\ell + a_\ell \Pi_{j,\ell,m})(C_\ell + a_\ell \Pi_{j,\ell,m})^{-1}\| \leq \frac{1}{\sqrt{2a_\ell}} + \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{a_\ell}}{2\sqrt{2}},$$

erhält man

$$\begin{aligned} &\|\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D - V - \lambda U_1 - 1 + a_\ell) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m} f\| \\ &\geq \left[1 - \sqrt{10}(3\gamma + \lambda \|rU_1\|_\infty) \left(\frac{1}{\sqrt{2a_\ell}} + \frac{1}{2\ell + 1} + \sqrt{\frac{a_\ell}{8}} (\ell + 1/2)^{-2} \right) \right] \|(C_\ell + a_\ell) \Lambda_\gamma f\|. \end{aligned}$$

Wählt man $a > a_\gamma$ hinreichend groß, folgt

$$\|\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D - V - \lambda U_1 - 1 + a_\ell) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m} f\| \geq A_\gamma \|(C_\ell + a_\ell) \Lambda_\gamma f\| \quad (6.47)$$

für alle $\mathbb{N} \ni \ell \geq L_\gamma$, wobei L_γ durch die Ungleichung

$$\frac{33}{\sqrt{10}} \left((2a)^{-\frac{1}{2}} + (2L_\gamma + 1)^{-1} + \sqrt{\frac{a_\ell}{8}} (L_\gamma + 1/2)^{-2} \right) < 1 \quad (6.48)$$

bestimmt ist. Verwendet man (6.47), die Operatormonotonie von $x \mapsto x^s$ mit $s \in (0, 1]$ (wegen Behauptung 6.3.4 ist auch $\Lambda_\gamma (D_{j,\ell} - V - \lambda U_1 - 1 + a_\ell) \Lambda_\gamma$ nicht-negativ) und (6.44), erhält man schließlich

$$\Lambda_\gamma (C_\ell + a_\ell \Pi_{j,\ell,m})^{2s} \Lambda_\gamma \leq A_\gamma (\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D - V - \lambda U_1 - 1 + a_\ell) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{2s}$$

für alle $\ell \geq L_\gamma$ und $\lambda \in \mathbb{R}$, welche (6.34) erfüllen. Dies zeigt $\|B_2\| < \infty$.

Wir schätzen nun $\|B_1\|$ ab. Wegen Lemma 5.2.4 (welches voraussetzt, dass der Operator $\lambda\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma U_2\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m}$ definit ist) gilt

$$\begin{aligned} & (\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D - V - \lambda U_1 - 1 + a_\ell/2 + a_\ell/2)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^{2s} \\ & \leq 2 (\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D - V - \lambda U_1 - 1 + a_\ell/2 - \lambda U_2 + a_\ell/2)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^{2s}, \end{aligned}$$

sofern man zeigen kann, dass

$$\begin{aligned} & \| |\lambda\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma U_2\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m}|^s (\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D - V - \lambda U_1 - 1 + a_\ell/2)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^{-s'} \| \\ & \leq A_{s,s'}(a/2)^{s-s'}(\ell + 1/2)^{2(s'-s)} \end{aligned} \quad (6.49)$$

für ein $1/2 < s' < s$ gilt. Wie in der Abschätzung von $\|B_2\|$ verwenden wir (6.47), Operatormonotonie positiver Wurzeln und (6.44) und erhalten zunächst

$$\| (C_\ell + a_\ell\Pi_{j,\ell,m})^{s'} \Lambda_\gamma (\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D - V - \lambda U_1 - 1 + a_\ell/2)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^{-s'} \| \leq A_{s',\gamma}. \quad (6.50)$$

Wegen (6.17) und (6.36) ist

$$\begin{aligned} |\lambda\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma U_2\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m}|^{2s} & \leq |\lambda|^{2s}\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m}|U_2|^{2s}\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma \\ & \leq A_{s',\gamma}|\lambda|^{2s}(\ell + 1/2)^{-\delta'}\|U_2\|^{2s}\|_{\mathcal{K}_{s',\delta'}}\Lambda_\gamma(C_\ell + a_\ell\Pi_{j,\ell,m})^{2s'}\Lambda_\gamma. \end{aligned}$$

Daher ist die linke Seite von (6.49) durch

$$A_{s',\gamma}^{1/2}|\lambda|^s\sqrt{\|U_2\|^{2s}\|_{\mathcal{K}_{s',\delta'}}}(\ell + 1/2)^{-\delta'/2}$$

beschränkt. Wegen der Bedingung (6.34) an λ und $\delta' \geq 4(s-s')$ ist dies durch den gewünschten Ausdruck $(\ell+1/2)^{2(s'-s)}$ beschränkt. Dies zeigt (6.49) und damit die Abschätzung $\|B\| \leq A_{s,\gamma}$, welche gleichmäßig in λ und ℓ ist.

Kombiniert man die Schranken für $\|A\|^2$, $\|B\|^2$ und $\|C\|_1$, erhält man schließlich

$$s_{j,\ell,\lambda} \leq A_{\gamma,s}\lambda\|U\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}}(\ell + 1/2)^{-4s-\varepsilon} \quad \text{für alle } 1/2 \leq j = \ell \pm 1/2.$$

□

6.3.2 Beweis von Satz 6.1.1 zur Existenz von ρ^H

Die Strategie für den Beweis von Satz 6.1.1 ist sehr ähnlich zu der von Behauptung 6.3.1. Da die Behauptungen 6.2.2 und 6.2.1 (insbesondere Behauptungen 6.2.4 und 6.2.5) bereits die Endlichkeit der Dichten fast überall für alle $\ell \leq L_\gamma$ (mit einem festen $L_\gamma = \mathcal{O}(1)$) zeigen, müssen wir lediglich die großen Drehimpulskanäle kontrollieren.

Bevor wir zum Beweis von Satz 6.1.1 kommen, beginnen wir mit einer Aufwärmübung, welche zeigt, dass die Dichten ρ_ℓ^H und ρ^H punktweise fast überall endlich sind. Wir betonen, dass die Beweise nicht auf der Maschinerie der Behauptungen 6.2.1 und 6.2.2 beruhen.

Behauptung 6.3.5 (Existenz von ρ_ℓ^H und ρ^H). *Seien $\gamma \in (0, 1)$ und $\ell \in \mathbb{N}_0$. Falls $1/2 < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 3/4\}$, $\varepsilon \in [0, 2s - 1]$, $W^{(0)} \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}$ und $W \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}$, dann gibt es Konstanten $A_{s,\gamma,\ell}$ und $A_{s,\gamma} > 0$, sodass*

$$\int_0^\infty \rho_\ell^H(r)W^{(0)}(r) dr \leq A_{s,\gamma,\ell}\|W^{(0)}\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}} \quad \text{und} \quad \int_{\mathbb{R}^3} \rho^H(x)W(|x|) dx \leq A_{s,\gamma}\|W\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}}.$$

Beweis. Es bezeichne $d_{j,\ell}$ die orthogonale Projektion auf den negativen Spektralraum von $\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m}$ mit $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$ und $m \in \{-j, \dots, j\}$. Dann ist

$$\int_0^\infty \rho_{j,\ell}^H(r)W(r) dr = \text{Tr } d_{j,\ell}W = \text{Tr } ABCB^*A^*,$$

wobei nun

$$\begin{aligned} A &:= d_{j,\ell}(\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1 + a_\ell)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^s \\ B &:= (\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1 + a_\ell)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^{-s}\Lambda_\gamma(C_\ell + a_\ell\Pi_{j,\ell,m})^s \\ C &:= (C_\ell + a_\ell\Pi_{j,\ell,m})^{-s}\Pi_{j,\ell,m}W\Pi_{j,\ell,m}(C_\ell + a_\ell\Pi_{j,\ell,m})^{-s} \end{aligned}$$

mit $a_\ell = a_\gamma(\ell + 1/2)^{-2}$ und einem hinreichend großen, von ℓ unabhängigen $a_\gamma > 0$ sind. Zunächst gilt wegen der Abschätzung (6.37) die übliche Schranke $\|A\| \leq a_{s,\gamma}(\ell + 1/2)^{-4s}$. Als Nächstes ist, wie im Beweis von Behauptung 6.3.1, $\|C\|_1 \leq A_{s,a}(\ell + 1/2)^{-\varepsilon}\|W\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}}$. Die gleichmäßige Beschränktheit von $\|B\|$ in ℓ wurde für $\gamma < 1$, hinreichend großes a_γ und alle $\ell \geq L_\gamma$ im Beweis von Behauptung 6.3.1 gezeigt (dort war es $\|B_2\|$). Dabei erfüllte die gestrichelte Zahl $L_\gamma \geq \sqrt{a}-1/2$ die Ungleichungen (6.42) und (6.48). Für $\ell \leq L_\gamma$ spielt die Gleichmäßigkeit der Abschätzung von $\|B\|$ in ℓ keine Rolle, da wir es hier nur mit einer festen und endlichen Zahl von Drehimpulskanälen zu tun haben. In diesem Fall schätzen wir

$$\|B\| \leq \|B_1\| \|B_2\| \|B_3\|$$

ab, wobei

$$\begin{aligned} B_1 &:= (C_\ell + a_\ell\Pi_{j,\ell,m})^s(p_\ell + a_\ell\Pi_{j,\ell,m})^{-s} \\ B_2 &:= (p_\ell + a_\ell\Pi_{j,\ell,m})^s\Lambda_\gamma(\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D_\gamma^H + a_\ell)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^{-s} \\ B_3 &:= (\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D_\gamma^H + a_\ell)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^s(\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1 + a_\ell)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^{-s}. \end{aligned}$$

Mit dem Satz von Plancherel ist zunächst $\|B_1\| \leq A_s$ in jedem Kanal. Wegen Korollar 6.2.9 beziehungsweise (6.23) gilt für festes $\gamma < 1$ und $1/2 < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$ die Schranke $\|B_2\| \leq A_{s,\gamma}$ für alle $\ell \in \mathbb{N}_0$. Schließlich folgt aus (6.37) die Abschätzung

$$\begin{aligned} &\|(\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1 + a_\ell + 1)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})(\Pi_{j,\ell,m}\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1 + a_\ell)\Lambda_\gamma\Pi_{j,\ell,m})^{-1}\| \\ &\leq 1 + A(\ell + 1/2)^2 \leq A_{L_\gamma}. \end{aligned}$$

Aus der Operatormonotonie von $x \mapsto x^s$ mit $s \in (0, 1]$ und der Kombination der Schranken für B_1, B_2 und B_3 folgt schließlich

$$\|B\| \leq A_{s,\gamma}.$$

Aus der Kombination der Schranken für A, B und C folgt somit

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \rho^H(x)W(|x|) dx &= \sum_{\ell=0}^\infty \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \frac{2j+1}{4\pi} \text{Tr } d_{j,\ell}W \\ &\leq A_{\gamma,s} \sum_{\ell=0}^\infty \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} (2j+1)(\ell + 1/2)^{-4s-\varepsilon} \|W\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}} \end{aligned}$$

und die rechte Seite ist summierbar, falls $2s - 1 \geq \varepsilon > 2 - 4s$, sprich $s > 1/2$ und $\varepsilon \geq 0$.

Mit diesen Argumenten kann man auch direkt die Endlichkeit der Dichte ρ_ℓ^H fast überall zeigen. Für $W^{(0)} \in \mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}$ erhält man

$$\int_0^\infty \rho_\ell^H(r) W^{(0)}(r) dr = \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} (2j + 1) \operatorname{Tr} d_{j,\ell} W^{(0)} \leq A_{\gamma,s} (\ell + 1/2)^{1-\varepsilon} \|W^{(0)}\|_{\mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}}$$

was aus den obigen Argumenten mit den Operatoren

$$\begin{aligned} A &:= d_{j,\ell} (\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1 + M) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^s \\ B &:= (\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1 + M) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{-s} \Lambda_\gamma (C_\ell + M \Pi_{j,\ell,m})^s \\ C &:= (C_\ell + M \Pi_{j,\ell,m})^{-s} \Pi_{j,\ell,m} W^{(0)} \Pi_{j,\ell,m} (C_\ell + M \Pi_{j,\ell,m})^{-s} \end{aligned}$$

folgt, wobei $M > 1$ eine Konstante der Ordnung $\mathcal{O}(1)$ ist. \square

Damit kommen wir zum Beweis der punktweisen oberen Schranken für die wasserstoffartigen Dichten.

Beweis von Satz 6.1.1. Wir setzen $U = \delta_r \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}$ (der radialen Delta-Funktion bei $r \in \mathbb{R}_+$) in den obigen Überlegungen und schreiben, wie zuvor,

$$\rho_\ell^H(r) = \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} (2j + 1) \operatorname{Tr} d_{j,\ell} (\delta_r \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}) = \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} (2j + 1) \operatorname{Tr} ABCB^* A^*,$$

wobei

$$\begin{aligned} A &:= d_{j,\ell} (\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1 + a_\ell) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^s \\ B &:= (\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1 + a_\ell) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{-s} \Lambda_\gamma (C_\ell + a_\ell \Pi_{j,\ell,m})^s \\ C &:= \Pi_{j,\ell,m} (C_\ell + a_\ell \Pi_{j,\ell,m})^{-s} (\delta_r \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}) (C_\ell + a_\ell \Pi_{j,\ell,m})^{-s} \Pi_{j,\ell,m} \end{aligned}$$

mit $a_\ell = a_\gamma (\ell + 1/2)^{-2}$ und einem hinreichend großen, von ℓ unabhängigen $a_\gamma > 0$. Zunächst gilt wegen (6.37) die gewöhnliche Schranke $\|A\| \leq a_{s,\gamma} (\ell + 1/2)^{-4s}$. Die Spur von C kann wie in Behauptung 6.2.10 durch $2(C_\ell^{(r)} + a_\ell)^{-2s}(r, r) + 2(C_{2j-\ell}^{(r)} + a_\ell)^{-2s}(r, r)$ abgeschätzt werden. Hier haben wieder verwendet, dass der Kern $(C_\ell^{(r)} + a_\ell)^{-2s}(r, r')$ wegen der Sobolew-Einbettung (mit $2s > d = 1$) eine stetige Funktion in beiden Variablen ist. Die Diagonale wurde bereits in 5.4.5 durch

$$\begin{aligned} (C_\ell^{(r)} + a_\ell)^{-2s}(r, r) &\leq A_{s,a_\gamma} \left[\left(\frac{r}{\ell + \frac{1}{2}} \right)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq \ell + \frac{1}{2}\}} + \left(\frac{r}{\ell + \frac{1}{2}} \right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{\ell + \frac{1}{2} \leq r \leq (\ell + \frac{1}{2})^2\}} \right. \\ &\quad \left. + \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{r \geq (\ell + 1/2)^2\}} \right] \end{aligned}$$

abgeschätzt. Eine analoge Rechnung zeigt, dass, modulo einer ℓ -unabhängigen Konstante, diese Schranke auch für $(C_{2j-\ell}^{(r)} + a_\ell)^{-2s}(r, r)$ gilt, da $2j - \ell = \ell \pm 1$ mit $1/2 \leq j = \ell \pm 1/2$ ist.

Die Endlichkeit von $\|B\|$ wurde im Beweis von Behauptung 6.3.5 gezeigt. Kombiniert man die Schranken für A, B und C , erhält man

$$\begin{aligned} \rho_\ell^H(r) &= \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} (2j+1) \operatorname{Tr} d_{j,\ell} \delta_r \\ &\leq A_{s,\gamma} (\ell + 1/2)^{1-4s} \left[\left(\frac{r}{\ell + \frac{1}{2}} \right)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq \ell + \frac{1}{2}\}} + \left(\frac{r}{\ell + \frac{1}{2}} \right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{\ell + \frac{1}{2} \leq r \leq (\ell + \frac{1}{2})^2\}} \right. \\ &\quad \left. + \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{r \geq (\ell + 1/2)^2\}} \right]. \end{aligned}$$

Insbesondere ist die rechte Seite für $s > 1/2$ summierbar und man erhält

$$r^2 \rho^H(r) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} \rho_\ell^H(r) \leq A_{s,\gamma} (r^{2-4s} + r^{1/2}).$$

□

6.4 Beweis der Konvergenzresultate

Der Beweis von Satz 6.1.4 verläuft völlig analog zu dem von Satz 5.1.3 des letzten Kapitels, weshalb wir ihn hier nicht nochmals wiederholen werden. Die wichtigsten Werkzeuge für den Beweis sind die starke Scott-Vermutung in jedem Drehimpulskanal (Satz 6.1.3) und die Majorante aus Behauptung 6.3.1, welche es erlaubt, die Summierung über $\ell \in \mathbb{N}_0$ mit den Grenzwerten $\lambda \rightarrow 0$ und $Z \rightarrow \infty$ zu vertauschen.

Wir konzentrieren uns von nun an auf den Beweis von Satz 6.1.3, sprich der starken Scott-Vermutung in einem festen Drehimpulskanal.

Wie im letzten Kapitel genügt es (aufgrund der Linearität der Aussage über U), den Satz für nicht-negatives U , welches entweder zu $r^{-1} L_{\text{comp}}^\infty(\mathbb{R}_+)$, oder zu $\mathcal{K}_{s,\varepsilon}^{(0)}$ mit $U^{2s} \in \mathcal{K}_{s',\delta'}^{(0)}$ gehört. Wir erinnern daran, dass die Parameter die Ungleichungen $1/2 < s' < s < \min\{3/2 - \sigma_\gamma, 1\}$, $\varepsilon \in [0, 2s - 1]$ und $\delta' \in [0, 2s' - 1]$ erfüllen. Wir definieren als Erstes den gestörten Coulomb-Dirac-Operator

$$D_{Z,\lambda} := D_Z - \lambda \sum_{\nu=1}^N c^2 U(c|x_\nu|) \Pi_{j_0,\ell_0,\nu} \quad \text{in} \quad \bigwedge_{\nu=1}^N \mathfrak{H}_Z \quad \text{mit} \quad \frac{1}{2} \leq j_0 = \ell_0 \pm \frac{1}{2}.$$

Hierbei wirkt $\Pi_{j_0,\ell_0,\nu}$ als Π_{j_0,ℓ_0} bezüglich des ν -ten Teilchens. Da $U^{2s} \in \mathcal{K}_{s',\delta'}^{(0)}$, ist

$$(\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma U \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{2s} \leq a (\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma (D_\gamma^H + M) \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{2s'}$$

für $1/2 < s' < s$ wegen (6.17), sprich $(\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma U \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m})^{2s} \leq \Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma U^{2s} \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m}$ und (6.27). Siehe dazu auch den Beweis von Behauptung 6.2.4 sowie (6.28). Insbesondere ist U daher infinitesimal Form-beschränkt bezüglich $\Pi_{j,\ell,m} \Lambda_\gamma D_\gamma^H \Lambda_\gamma \Pi_{j,\ell,m}$, weshalb $D_{Z,\lambda}$ im Sinne quadratischer Formen für alle $\lambda \in \mathbb{R}$ definiert werden kann. Ist $U \in r^{-1} L_{\text{comp}}^\infty(\mathbb{R}_+)$, so kann $D_{Z,\lambda}$ mittels Katos Ungleichung und Korollar 6.2.9 für alle λ in einer offenen Umgebung von

Null, welche nicht von Z abhängt, definiert werden (siehe auch (6.30)). Mit der Definition (6.6) von $\rho_{j_0, \ell_0, d}(r)$ ist

$$\lambda(2j_0 + 1) \int_0^\infty c^{-3} \rho_{j_0, \ell_0, d}(c^{-1}r) U(r) dr = c^{-2} \operatorname{Tr}(d(D_Z - D_{Z, \lambda})), \quad (6.51)$$

wobei wir daran erinnern, dass d ein Grundzustand von D_Z in $\bigwedge_{\nu=1}^N \mathfrak{H}_Z$ war. Wir schätzen nun die rechte Seite dieser Gleichung nach oben ab. Für selbstadjungierte Operatoren v in $L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$, die Form-beschränkt bezüglich $|p|$ mit Formschranke $< (C_\gamma \Upsilon_\gamma)^{-1}c$ sind (mit C_γ und Υ_γ aus [132, Formeln (1.2), (1.4)], siehe auch [132, Formel (1.6)], welche gerade $|D_\gamma^H| \geq C_\gamma \Upsilon_\gamma |p|$ besagt), definieren wir

$$D_c(Z/|x| + v) = -ic\alpha \cdot \nabla + c^2\beta - \frac{Z}{|x|} - v \quad \text{in } \mathfrak{H}_Z.$$

Wir erinnern daran, dass ρ_Z^{TF} der eindeutige Minimierer des Thomas–Fermi-Funktional für ein neutrales Atom ist, dessen Grundzustandsenergie mit $E^{\text{TF}}(Z)$ bezeichnet wird. Wir erinnern außerdem an den Radius $R_Z^{\text{TF}}(x)$ des Austauschlochs bei $x \in \mathbb{R}^3$, der durch

$$\int_{|x-y| \leq R_Z^{\text{TF}}(x)} \rho_Z^{\text{TF}}(y) dy = \frac{1}{2}$$

definiert ist und setzen

$$\chi_Z^{\text{TF}}(x) := \int_{|x-y| \geq R_Z^{\text{TF}}(x)} \frac{\rho_Z^{\text{TF}}(y)}{|x-y|} dy.$$

Der Bequemlichkeit halber führen wir $U_c(x) := c^2 U(cx)$ ein und schätzen als Erstes $\operatorname{Tr} dD_{Z, \lambda}$ nach unten durch eine Summe von Einteilchen-Operatoren ab. Wir erinnern daran, dass $\operatorname{Tr}_{j, \ell}(A) = \operatorname{Tr}(\Pi_{j, \ell} A \Pi_{j, \ell})$ für Spurklasse-Operatoren A in $L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$ war.

Lemma 6.4.1. *Für alle λ in einer Umgebung von Null und alle $\mathbb{N} \ni L < Z$ gilt*

$$\begin{aligned} \operatorname{Tr}(D_{Z, \lambda} d) &\geq - \sum_{\ell=0}^{L-1} \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \operatorname{Tr}_{j, \ell} [(\Lambda_Z D_c(\frac{Z}{|x|} + \lambda U_c \Pi_{j_0, \ell_0} + c^2) \Lambda_Z) -] \\ &\quad - \sum_{\ell=L}^Z \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \operatorname{Tr}_{j, \ell} [(\Lambda_Z D_c(\frac{Z}{|x|} - \chi_Z^{\text{TF}} + \lambda U_c \Pi_{j_0, \ell_0} + c^2) \Lambda_Z) -] - D[\rho_Z^{\text{TF}}]. \end{aligned}$$

Beweis. Die Korrelationsungleichung von Mancas u. a. [123] liefert zunächst

$$\sum_{1 \leq \nu < \mu \leq Z} \frac{1}{|x_\nu - x_\mu|} \geq \sum_{\nu=1}^Z \chi_Z^{\text{TF}}(x_\nu) - D[\rho_Z^{\text{TF}}].$$

Wenn $d^{(1)}$ die Einteilchendichtematrix von d in \mathfrak{H}_Z bezeichnet, folgt aus der Nicht-Negativität sowie der sphärischen Symmetrie von $\chi_Z^{\text{TF}}(x)$

$$\begin{aligned} \operatorname{Tr}(D_{Z, \lambda} d) &\geq \sum_{\ell=0}^{L-1} \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \operatorname{Tr}_{j, \ell} [d^{(1)} (\Lambda_Z D_c(\frac{Z}{|x|} + \lambda U_c \Pi_{j_0, \ell_0} + c^2) \Lambda_Z)] \\ &\quad + \sum_{\ell=L}^{\infty} \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \operatorname{Tr}_{j, \ell} [d^{(1)} (\Lambda_Z D_c(\frac{Z}{|x|} - \chi_Z^{\text{TF}} + \lambda U_c \Pi_{j_0, \ell_0} + c^2) \Lambda_Z)] - D[\rho_Z^{\text{TF}}] \end{aligned}$$

für alle $L < Z$. Da der Absolutbetrag der Energie monoton fällt, wenn ℓ wächst (siehe auch Behauptung 6.3.4), kann der letzte Ausdruck weiter nach unten abgeschätzt werden, indem man $d^{(1)}$ durch eine Einteilchendichtematrix ersetzt, die so definiert ist, dass alle Kanäle $\ell < L$ vollständig besetzt sind. Da es ohnehin nie mehr als Z besetzte Drehimpulskanäle gibt, kann die zweite Summe sicherlich bei Z abgeschnitten werden. Anwenden des Variationsprinzips zeigt schließlich die behauptete Schranke. \square

Wir erinnern nun an die Resultate von Handrek und Siedentop [80], welche die asymptotische Entwicklung der Grundzustandsenergie von D_Z in $\bigwedge_{\nu=1}^N \mathfrak{H}_Z$ betreffen. Die Autoren zeigten in [80, Theorem 1]

$$\mathrm{Tr}(D_Z d) = E^{\mathrm{TF}}(Z) + \left(\frac{1}{2} - s(\gamma)\right) Z^2 + \mathcal{O}(Z^{47/24}) \quad \text{für } Z \rightarrow \infty$$

mit der endlichen Spektralverschiebung

$$s(\gamma) = \frac{1}{\gamma^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm 1/2} \left[\mathrm{Tr}_{j,\ell}(\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1)\Lambda_\gamma)_- - (2j+1) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\gamma^2}{2(n+\ell)^2} \right]. \quad (6.52)$$

Lemma 6.4.2. *Es gilt*

$$\mathrm{Tr}(D_Z d) = E^{\mathrm{TF}}(Z) + \left(\frac{1}{2} - s(\gamma)\right) Z^2 + \mathcal{O}(Z^{47/24}). \quad (6.53)$$

Ist darüberhinaus $L = \lfloor Z^{1/9} \rfloor$, dann gilt außerdem

$$\begin{aligned} & - \sum_{\ell=0}^{L-1} \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \mathrm{Tr}_{j,\ell}[(\Lambda_Z D_c(\frac{Z}{|x|} + c^2)\Lambda_Z)_-] \\ & - \sum_{\ell=L}^Z \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \mathrm{Tr}_{j,\ell}[(\Lambda_Z D_c(\frac{Z}{|x|} - \chi_Z^{\mathrm{TF}} + c^2)\Lambda_Z)_-] - D[\rho_Z^{\mathrm{TF}}] \\ & \geq E^{\mathrm{TF}}(Z) + \left(\frac{1}{2} - s(\gamma)\right) Z^2 - \mathrm{konst} Z^{47/24}. \end{aligned} \quad (6.54)$$

Beweis. Die erste Aussage ist gerade [80, Theorem 1]. Sei nun $d_{Z,\chi}$ die Einteilchendichtematrix in \mathfrak{H}_Z , sodass

$$- \sum_{\ell=L}^Z \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \mathrm{Tr}_{j,\ell}[(\Lambda_Z D_c(\frac{Z}{|x|} - \chi_Z^{\mathrm{TF}} + c^2)\Lambda_Z)_-] = \mathrm{Tr}[D_c(\frac{Z}{|x|} - \chi_Z^{\mathrm{TF}} + c^2)d_{Z,\chi}].$$

Sei weiter $\Lambda_{Z,\chi} := \mathbf{1}_{(0,\infty)}(D_Z^H + \chi_Z^{\mathrm{TF}})$, wobei wir bemerken, dass $\Pi_{j,\ell}\Lambda_{Z,\chi} = \Lambda_{Z,\chi}\Pi_{j,\ell}$ wegen der sphärischen Symmetrie von χ_Z^{TF} gilt. Da $\|\chi_Z^{\mathrm{TF}}\| \leq AZ^{4/3}$ und $\mathrm{Tr} d_{Z,\chi} \leq Z$ (wir erinnern, dass die linke Seite von (6.54) eine untere Schranke an $\mathrm{Tr} D_Z d$ ist und $\mathrm{Tr} d = Z$), folgt aus

[80, Lemma 3] und dem Variationsprinzip

$$\begin{aligned} & \text{Tr}[D_c(\frac{Z}{|x|} - \chi_Z^{\text{TF}} + c^2)d_{Z,\chi}] \\ & \geq \text{Tr}[(\Lambda_{Z,\chi}D_c(\frac{Z}{|x|} - \chi_Z^{\text{TF}} + c^2)\Lambda_{Z,\chi})d_{Z,\chi}] - Ac^{2-4}\|\chi_Z^{\text{TF}}\|_\infty^2 \text{Tr} d_{Z,\chi} \\ & \geq -\sum_{\ell=L}^Z \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \text{Tr}_{j,\ell}[(\Lambda_{Z,\chi}D_c(\frac{Z}{|x|} - \chi_Z^{\text{TF}} + c^2)\Lambda_{Z,\chi})_-] - AZ^{5/3}. \end{aligned}$$

Mit dem Min-Max-Prinzip für Operatoren mit Spektrallücken [76] kann die rechte Seite (wie in der Herleitung von [80, Formel (29)]) weiter nach unten durch

$$-\sum_{\ell=L}^Z \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \text{Tr}_{j,\ell}[(\Lambda_0 D_c(\frac{Z}{|x|} - \chi_Z^{\text{TF}} + c^2)\Lambda_0)_-] - AZ^{5/3}$$

abgeschätzt werden. Hierbei bezeichnet $\Lambda_0 = \mathbf{1}_{(0,\infty)}(c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + c^2\beta)$ die Projektion auf das Brown–Ravenhall-Bild. Daher ist die linke Seite von (6.54) durch

$$\begin{aligned} & -\sum_{\ell=0}^{L-1} \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \text{Tr}_{j,\ell}[(\Lambda_Z D_c(\frac{Z}{|x|} + c^2)\Lambda_Z)_-] \\ & -\sum_{\ell=L}^Z \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \text{Tr}_{j,\ell}[(\Lambda_0 D_c(\frac{Z}{|x|} - \chi_Z^{\text{TF}} + c^2)\Lambda_0)_-] - D[\rho_Z^{\text{TF}}] - AZ^{5/3} \end{aligned}$$

nach unten beschränkt (vergleiche auch mit [80, Formel (33)]). Kombiniert man dies mit der nicht-relativistischen Scott-Korrektur [70, Proposition 4.1] (siehe auch [80, Formel (36)]) und (6.52), folgt die zweite Aussage des Lemmas. \square

Kombiniert man (6.53) und (6.54), erhält man mit $L = [Z^{1/9}]$

$$\begin{aligned} \text{Tr} D_Z d & \leq -\sum_{\ell=0}^{L-1} \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \text{Tr}_{j,\ell}[(\Lambda_Z D_c(\frac{Z}{|x|} + c^2)\Lambda_Z)_-] \\ & -\sum_{\ell=L}^Z \sum_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \text{Tr}_{j,\ell}[(\Lambda_Z D_c(\frac{Z}{|x|} - \chi_Z^{\text{TF}} + c^2)\Lambda_Z)_-] - D[\rho_Z^{\text{TF}}] + AZ^{47/24}. \end{aligned}$$

Setzt man dies und die Abschätzung aus Lemma 6.4.1 in (6.51) ein, erhält man

$$\begin{aligned} & \text{Tr}(D_Z - D_{Z,\lambda})d \\ & \leq \left(\text{Tr}_{j_0,\ell_0}[(\Lambda_Z D_c(\frac{Z}{|x|} + \lambda U_c + c^2)\Lambda_Z)_-] - \text{Tr}_{j_0,\ell_0}[(\Lambda_Z D_c(\frac{Z}{|x|} + c^2)\Lambda_Z)_-] \right) \theta(L - \ell_0) \\ & + \left(\text{Tr}_{j_0,\ell_0}[(\Lambda_Z D_c(\frac{Z}{|x|} - \chi_Z^{\text{TF}} + \lambda U_c + c^2)\Lambda_Z)_-] \right. \\ & \quad \left. - \text{Tr}_{j_0,\ell_0}[(\Lambda_Z D_c(\frac{Z}{|x|} - \chi_Z^{\text{TF}} + c^2)\Lambda_Z)_-] \right) \theta(\ell_0 - L) + \text{konst} Z^{47/24}, \end{aligned}$$

wobei $\theta(n) = 1$, falls $n > 0$ und $\theta(n) = 0$, falls $n \leq 0$. Wir bemerken, dass sich die Spuren immer gegenseitig auslöschen, es sei denn sowohl $\ell = \ell_0$ als auch $j = j_0$.

Für hinreichend großes Z ist immer $L = [Z^{1/9}] > \ell_0$. Skaliert man $x \mapsto x/c$, vereinfacht sich der letzte Ausdruck zu

$$\begin{aligned}
& \text{Tr}(D_Z - D_{Z,\lambda})d \\
& \leq \text{Tr}_{j_0,\ell_0}[(\Lambda_Z D_c(\frac{Z}{|x|} + \lambda U_c + c^2)\Lambda_Z)_-] - \text{Tr}_{j_0,\ell_0}[(\Lambda_Z D_c(\frac{Z}{|x|} + c^2)\Lambda_Z)_-] \\
& \quad + \text{konst } Z^{47/24} \\
& = c^2 \left(\text{Tr}_{j_0,\ell_0}[(\Lambda_\gamma D_1(\frac{\gamma}{|x|} + \lambda U + 1)\Lambda_\gamma)_-] - \text{Tr}_{j_0,\ell_0}[(\Lambda_\gamma D_1(\frac{\gamma}{|x|} + 1)\Lambda_\gamma)_-] \right. \\
& \quad \left. + \text{konst } Z^{-1/24} \right) \\
& = c^2(2j_0 + 1) \left(\text{Tr}_{j_0,\ell_0,m_0}(\Lambda_\gamma (D_\gamma^H - \lambda U - 1)\Lambda_\gamma)_- - \text{Tr}_{j_0,\ell_0,m_0}(\Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1)\Lambda_\gamma)_- \right. \\
& \quad \left. + \text{konst } Z^{-1/24} \right)
\end{aligned}$$

für beliebiges $m_0 \in \{-j_0, \dots, j_0\}$. Der Entartungsfaktor $(2j_0 + 1)$ der letzten Ungleichung rührt von der Tatsache, dass die Eigenwerte der Operatoren $\Pi_{j_0,\ell_0,m_0}\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - \lambda U - 1)\Lambda_\gamma\Pi_{j_0,\ell_0,m_0}$ und $\Pi_{j_0,\ell_0,m_0}\Lambda_\gamma(D_\gamma^H - 1)\Lambda_\gamma\Pi_{j_0,\ell_0,m_0}$ nicht von $m \in \{-j_0, \dots, j_0\}$ abhängen. Setzt man diese Schranke in (6.51) ein, teilt durch λ und lässt $Z \rightarrow \infty$ gehen, erhält man

$$\begin{aligned}
& \limsup_{Z \rightarrow \infty} \int_0^\infty c^{-3} \rho_{j_0,\ell_0,d}(c^{-1}r)U(r)dr \\
& \leq \lambda^{-1} \left(\text{Tr}_{j_0,\ell_0,m_0}(\Lambda_\gamma (D_\gamma^H - \lambda U - 1)\Lambda_\gamma)_- - \text{Tr}_{j_0,\ell_0,m_0}(\Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1)\Lambda_\gamma)_- \right),
\end{aligned}$$

falls $\lambda > 0$ und

$$\begin{aligned}
& \liminf_{Z \rightarrow \infty} \int_0^\infty c^{-3} \rho_{j_0,\ell_0,d}(c^{-1}r)U(r)dr \\
& \geq \lambda^{-1} \left(\text{Tr}_{j_0,\ell_0,m_0}(\Lambda_\gamma (D_\gamma^H - \lambda U - 1)\Lambda_\gamma)_- - \text{Tr}_{j_0,\ell_0,m_0}(\Lambda_\gamma (D_\gamma^H - 1)\Lambda_\gamma)_- \right),
\end{aligned}$$

falls $\lambda < 0$. Wir lassen nun $\lambda \rightarrow 0$ gehen. Wegen der Behauptungen 6.2.4 und 6.2.5 konvergieren die rechten Seiten der letzten beiden Ungleichungen gegen $\int_0^\infty \rho_{j_0,\ell_0}^H(r)U(r)dr$. Multiplikation beider Seiten mit $(2j_0 + 1)$ und Summierung über $1/2 \leq j_0 = \ell_0 \pm 1/2$ zeigt, dass $\int_0^\infty c^{-3} \rho_{\ell_0,d}(c^{-1}r)dr$ für $Z \rightarrow \infty$ einen Grenzwert hat und dieser gerade durch den behaupteten Ausdruck gegeben ist. Dies schließt den Beweis von Satz 6.1.3.

Kapitel 7

Äquivalenz von Sobolew-Normen für verallgemeinerte Hardy-Operatoren in L^2

Dieses Kapitel beruht auf der gemeinsamen Arbeit [66] mit Rupert L. Frank und Heinz Siedentop. Die Ergebnisse dieses Kapitels sowie deren Darstellung und Beweise stimmen mit denen, die in [66] erarbeitet wurden, überein. Die Einleitung ist leicht abgewandelt und es wird ein kurzer, ergänzender Überblick über Ergebnisse im Zusammenhang mit Hardy-Operatoren gegeben.

7.1 Einleitung und Hauptresultat

Wir beginnen mit einem kurzen Überblick über einige Ergebnisse, die im Zusammenhang mit Hardy-Operatoren stehen. Im Anschluß beschreiben wir unsere Situation und das Hauptresultat dieses Kapitels. Darüberhinaus geben wir einige unmittelbare Konsequenzen beziehungsweise Anwendungen des Resultats.

Im Folgenden schreiben wir $X \lesssim Y$ für nicht-negative Größen X und Y , wann immer es eine Konstante $A > 0$ gibt, sodass $X \leq A \cdot Y$. Um gegebenenfalls Abhängigkeiten von A von einem Parameter r zu kennzeichnen, schreiben wir $X \lesssim_r Y$. Darüberhinaus meint $X \sim Y$, dass $Y \lesssim X \lesssim Y$. In diesem Fall sagen wir, dass X zu Y *äquivalent* ist. Schließlich verwenden wir die Notation

$$X \wedge Y := \min\{X, Y\} \quad \text{und} \quad X \vee Y := \max\{X, Y\}.$$

7.1.1 Überblick über Hardy-Operatoren

Die klassische Hardy-Ungleichung [82, Formel (4)]

$$\int_a^\infty \left(\frac{F(x)}{x} \right)^\kappa dx \leq \left(\frac{\kappa}{\kappa - 1} \right)^\kappa \int_a^\infty f(x)^\kappa dx$$

mit $F(x) = \int_a^x f(t) dt$ und $\kappa > 1$ ist eine der am längsten bekannte Ungleichung, die die gewichtete L^κ -Norm einer abfallenden Funktion mit ihrem Gradienten in Relation bringt.

Für $\kappa = 2$ ist diese Ungleichung auch als quantenmechanisches Unschärfeprinzip bekannt, siehe beispielsweise [143, p. 169]. In drei Dimensionen besagt sie

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \psi|^2 \geq \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|^2} dx.$$

Als quadratische Form-Ungleichung kann dies als $-\Delta \geq |x|^{-2}/4$ geschrieben werden, wodurch die Verbindung zur (für Physiker) gebräuchlichen Formulierung $\sigma_x^2 \sigma_p^2 \geq 1/4$ offensichtlich wird, wobei σ_x beziehungsweise σ_p die Standardabweichung für den Ort beziehungsweise den Impuls bezeichnen.

Die Ungleichung ist zudem von fundamentaler Wichtigkeit in vielen Fragen der harmonischen Analysis, den partiellen Differentialgleichungen und der Spektraltheorie.

Die Ungleichung wurde von Herbst [87] für den fraktionalen Laplace-Operator verallgemeinert. Für $0 < \alpha < d$ besagt sie

$$\left\| |p|^{\alpha/2} f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 \geq \mathcal{H}_{d,\alpha} \left\| |x|^{-\alpha/2} f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d) \quad (7.1)$$

mit einer positiven Konstanten $\mathcal{H}_{d,\alpha}$. Wir verwenden hier und im Folgenden die Notation

$$|p| = \sqrt{-\Delta}.$$

Die optimale, sprich größt-mögliche, Konstante auf der rechten Seite wurde in [87, Theorem 2.5] zu

$$\mathcal{H}_{d,\alpha} = \frac{2^\alpha \Gamma((d+\alpha)/4)^2}{\Gamma((d-\alpha)/4)^2}$$

bestimmt. Im Spezialfall $\alpha = 2$ war die Konstante natürlich bereits lange vorher bekannt. Auch der andere physikalisch relevante Fall $d = 3$ und $\alpha = 1$ war bekannt. Man spricht dann von Katos Ungleichung [101, Kapitel 5, Gleichung (5.33)]. Für alternative Herleitungen der Ungleichung mit scharfer Konstante verweisen wir auf [108, 184, 64, 68].

Setzt man

$$a_* := -\mathcal{H}_{d,\alpha} = -\frac{2^\alpha \Gamma((d+\alpha)/4)^2}{\Gamma((d-\alpha)/4)^2},$$

so folgt aus der Hardy-Ungleichung mit scharfer Konstanten, dass der Hardy-Operator

$$\mathcal{L}_{a,\alpha} := |p|^\alpha + a|x|^{-\alpha} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^d)$$

nicht-negativ für alle $a \geq a_*$ ist. Genauer gesagt ist $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ als die Friedrichs-Erweiterung der entsprechenden quadratischen Form auf $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ definiert.

Zahlreiche Variationen dieser Ungleichung wurden bereits untersucht. Ekholm und Frank [43] untersuchten beispielsweise Störungen des klassischen Hardy-Operators ($\alpha = 2$) in $d \geq 3$ Dimensionen. Sie zeigten für alle $\gamma > 0$ und $r \geq 0$ die Hardy-Lieb-Thirring-Ungleichung

$$\text{Tr} \left(|D - A|^2 + a_* |x|^{-2} - V \right)_-^\gamma \leq A_{\gamma,d,r} \int_{\mathbb{R}^d} V_+(x)^{\gamma + \frac{d+r}{2}} |x|^r dx.$$

Frank u. a. [64] verallgemeinerten die Idee und betrachteten Störungen von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ mit $0 < \alpha < \min\{2, d\}$ und $d \geq 2$. Sie erhielten eine Schranke an die Zahl der negativen Eigenwerte

unterhalb einer fixierten negativen Schwelle des gestörten Operators, die mit der semiklassisch vorhergesagten Schranke für den ungestörten Hardy-Operator übereinstimmt. Mit dieser Schranke erhielten sie analog

$$\mathrm{Tr} (|D - A|^\alpha + a_* |x|^{-\alpha} - V)_-^\gamma \leq A_{\gamma,d,\alpha} \int_{\mathbb{R}^d} V_+(x)^{\gamma + \frac{d}{\alpha}} dx$$

für alle $\gamma > 0$ und allen magnetischen Vektorpotentialen $A \in L_{\mathrm{loc}}^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{R}^d)$.

Yafaev [184] bestimmte die scharfe Konstante $C_{\alpha,d}$ in Hardy–Rellich-Ungleichungen

$$\int_{\mathbb{R}^d} |x|^{-\alpha} \left| f(x) - \sum_{|\beta| \leq [\frac{\alpha-d}{2}]} (\beta!)^{-1} (\partial^\beta f)(0) x^\beta \right|^2 dx \leq C_{\alpha,d} \int_{\mathbb{R}^d} |\xi|^\alpha |\hat{f}(\xi)|^2 d\xi,$$

wobei \hat{f} die Fourier-Transformation von f bezeichnet.

In einem ganz anderen Zusammenhang, dem Problem der Überschussladung von Atomen, zeigte Lieb [116] in drei Dimensionen die Form-Ungleichung $|p||x| + |x||p| > 0$, indem er das Problem auf die Ungleichung $|p|^2|x| + |x||p|^2 > 0$ zurückführte, welche tatsächlich äquivalent zum quantenmechanischen Unschärfepinzipp ist. Im selben Kontext zeigten Handrek und Siedentop [79] die Positivität von $|p||x| + |x||p|$ in zwei Dimensionen. Chen und Siedentop [21] verallgemeinerten diese Überlegungen und zeigten die Positivität des Jordan-Produkts $\mathfrak{J}_{a,b,d} := \frac{1}{2}(|p|^a|x|^b + |x|^b|p|^a)$. Hierbei sind a und b positive Konstanten. Im Fall $b = d - a$ reduziert sich dies auf die übliche Hardy-Ungleichung für den fraktionalen Laplace-Operator (siehe Gleichung (5)), nämlich

$$\mathfrak{J}_{a,b,d} \geq |x|^{\frac{b}{2}} \left[|p|^a - 2^a \left(\frac{\Gamma(\frac{d+a}{4})}{\Gamma(\frac{d-a}{4})} \right) |x|^{-a} \right] |x|^{\frac{b}{2}}.$$

Da Hardy-Operatoren nur eine einzige Längenskala besitzen, ist es nicht erwartbar, dass die Operatoren für beliebig negative Kopplungskonstanten nach unten beschränkt sind.

Es stellt sich jedoch natürlich die Frage, ob die Operatoren mit beziehungsweise ohne Hardy-Potential in gewissen Sinnen äquivalent zueinander sind.

Im Falle des Schrödinger-Operators auf $L^p(\mathbb{R}^d)$ fanden Killip u. a. [102], dass die Sobolew-Normen, die durch Potenzen von $-\Delta$ beziehungsweise $-\Delta + a|x|^{-2}$ erzeugt werden, unter gewissen Bedingungen an p und die Kopplungskonstante a , tatsächlich äquivalent zueinander sind [102, Theorem 1.2]. Das Ziel dieses Kapitels ist es, diese Äquivalenz auch für die Operatoren $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ in $L^2(\mathbb{R}^d)$ zu zeigen.

7.1.2 Definitionen, Hauptresultat und Anwendungen

Für $a \geq a_*$ und $s > 0$ tauchen die Normen

$$\left\| \mathcal{L}_{a,\alpha}^{s/2} f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}$$

in vielen Anwendungen in natürlicher Art und Weise auf. Da der Operator für allgemeines $s \in (0, 2]$ (insbesondere $s \notin \{1, 2\}$) jedoch nur schwer Hand zu haben ist, ist es unerlässlich, die Verbindung der obigen Normen mit denen des Operators wenn $a = 0$ ist, sprich

$$\left\| |p|^{\alpha s/2} f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^d)},$$

zu verstehen. Beispielsweise hatten wir in den Kapiteln 5 und 6 gesehen, dass gewisse Spur- und Form-Ungleichungen bezüglich Potenzen $s/2$ des Operators $\mathcal{L}_{a,1}$ verifiziert werden mussten, um die verallgemeinerten Feynman–Hellmann-Theoreme anwenden zu dürfen. Insbesondere mussten wir Potenzen $s > 1$ untersuchen, um mögliche Probleme am Ursprung zu kontrollieren.

Mit der Hardy-Ungleichung sieht man leicht ein, dass die Normen für $s \in (0, 1]$ und alle $a \geq a_*$ äquivalent sind, siehe auch Bemerkung 7.1.2. Natürlich folgt durch „Quadrieren der Operatoren“ (siehe Bemerkung 7.1.3) die Äquivalenz auch für $s = 2$ und, wegen Operatormonotonie positiver Wurzeln, auch für alle $s \leq 2$. Allerdings gilt die Äquivalenz dann nur unter der Einschränkung $a > -\mathcal{H}_{d,2\alpha}^{1/2}$. Die natürliche Vermutung ist, dass man zwischen $s = 1$ und $s = 2$ interpolieren können sollte. Damit meinen wir, dass es für alle $a > a_*$ ein $s_{a,d,\alpha}$ gibt, sodass die Normen für alle $0 < s < s_{a,d,\alpha}$ äquivalent sind.

Für $\alpha = 2$ wurde ein solches Ergebnis erst kürzlich von Killip u. a. [102] bewiesen. Tatsächlich behandeln die Autoren das allgemeinere Problem, bei dem die L^2 -Normen durch L^p -Normen ersetzt werden, wobei p in einem von a und d abhängigen Intervall liegt.

Das Hauptresultat dieses Kapitels ist die Verallgemeinerung der Resultate von [102] für den Fall $0 < \alpha < 2 \wedge d$ und $p = 2$. Der Fall $p \neq 2$ gestaltet sich schwieriger und wird im letzten Kapitel diskutiert.

Definitionen und Resultat

Für die exakte Formulierung unseres Hauptresultats verwenden wir für $0 < \alpha < d$ die folgende Parametrisierung der Kopplungskonstante a durch die Potenz des formalen Grundzustands von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$, siehe auch [64, Proposition 4.1] sowie den Beweis dieser Behauptung. Wir definieren

$$\Psi_{\alpha,d}(\sigma) := -2^\alpha \frac{\Gamma(\frac{\sigma+\alpha}{2}) \Gamma(\frac{d-\sigma}{2})}{\Gamma(\frac{d-\sigma-\alpha}{2}) \Gamma(\frac{\sigma}{2})} \quad \text{falls } \sigma \in (-\alpha, (d-\alpha)/2] \setminus \{0\} \quad (7.2)$$

und $\Psi_{\alpha,d}(0) = 0$. Nach [64, Lemma 3.2] und [99, Seite 8] ist die Funktion $\sigma \mapsto \Psi_{\alpha,d}(\sigma)$ stetig und streng monoton fallend auf $(-\alpha, (d-\alpha)/2]$ und es gelten

$$\lim_{\sigma \rightarrow -\alpha} \Psi_{\alpha,d}(\sigma) = \infty \quad \text{und} \quad \Psi_{\alpha,d}\left(\frac{d-\alpha}{2}\right) = a_*.$$

Daraus folgt, dass wir für alle $a \in [a_*, \infty)$

$$\delta := \Psi_{\alpha,d}^{-1}(a) \quad (7.3)$$

definieren können. Wir bemerken an dieser Stelle den Gegensatz zum Fall $\alpha = 2$. Für $\alpha = 2$ ist $\delta_S(a) = (d-2)/2 - [(d-2)^2 + 4a]^{1/2}/2$ (S für Schrödinger), das heißt $\delta_S(a) \rightarrow -\infty$, wenn $a \rightarrow \infty$.

Mit diesen Vorbereitungen können wir das Hauptergebnis dieses Kapitels formulieren.

Satz 7.1.1 (Äquivalenz von Sobolew-Normen). *Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$, $a \in [a_*, \infty)$, δ durch (7.3) definiert und $s \in (0, 2]$.*

1. *Ist $\alpha s/2 + \delta < d/2$, dann gilt*

$$\| |p|^{\alpha \frac{s}{2}} f \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \lesssim_{d,\alpha,a,s} \| \mathcal{L}_{a,\alpha}^{\frac{s}{2}} f \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d). \quad (7.4)$$

2. Ist $\alpha s/2 < d/2$, dann gilt

$$\|\mathcal{L}_{a,\alpha}^{\frac{s}{2}} f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \lesssim_{d,\alpha,a,s} \| |p|^{\alpha \frac{s}{2}} f \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d). \quad (7.5)$$

Wir bemerken, dass das Intervall für s in (7.5) scharf ist, was gesehen werden kann, indem man eine am Ursprung konstante Schwartz-Funktion in die Ungleichung einsetzt. Des Weiteren werden die Schranken an die Parameter für $\alpha = 2$ aus [102] wiederhergestellt.

Bemerkung 7.1.2. Der entscheidende Punkt des Satzes ist, dass er Potenzen $s > 1$ (soweit nicht $a = a_*$ im Falle (7.4)) erlaubt. Für $s \leq 1$ kann das Resultat direkter eingesehen werden. Aus der Hardy-Ungleichung (7.1) folgen für $a > a_*$ die Form-Ungleichungen

$$\left(1 - \frac{a}{a_*}\right) |p|^\alpha \leq \mathcal{L}_{a,\alpha} \leq |p|^\alpha, \quad \text{falls } a < 0, \quad |p|^\alpha \leq \mathcal{L}_{a,\alpha} \leq \left(1 + \frac{a}{a_*}\right) |p|^\alpha, \quad \text{falls } a > 0,$$

und wegen Operatormonotonie positiver Wurzeln auch

$$\left(1 - \frac{a}{a_*}\right)^s |p|^{\alpha s} \leq \mathcal{L}_{a,\alpha}^s \leq |p|^{\alpha s}, \quad \text{falls } a < 0, \quad |p|^{\alpha s} \leq \mathcal{L}_{a,\alpha}^s \leq \left(1 + \frac{a}{a_*}\right)^s |p|^{\alpha s}, \quad \text{falls } a > 0$$

mit $0 < s < 1$. Dies zeigt (7.4) und (7.5) für $0 < s \leq 1$.

Bemerkung 7.1.3. Ein weiterer entscheidender Punkt dieses Satzes ist, dass der volle Bereich $a \geq a_*$ und $\alpha < 2 \wedge d$ abdeckt wird. Tatsächlich gibt es für $s = 2$ und $\alpha < d/2$ einen einfacheren Beweis von (7.5) und, unter einer weiteren Einschränkung an a , einen einfacheren Beweis von (7.4). Mit (7.1) folgt zunächst

$$\|\mathcal{L}_{a,\alpha} f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq \| |p|^\alpha f \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} + |a| \| |x|^\alpha f \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq \left(1 + |a| \mathcal{H}_{d,2\alpha}^{-1/2}\right) \| |p|^\alpha f \|_{L^2(\mathbb{R}^d)},$$

was (7.5) für $\alpha < d/2$ und $s = 2$ zeigt. Aus der Operatormonotonie positiver Wurzeln folgt die Behauptung insbesondere für alle $s \leq 2$ und $\alpha < d/2$.

Um unsere zweite Behauptung präzise zu formulieren, definieren wir $a_{**} := -\mathcal{H}_{d,2\alpha}^{1/2}$ (was für $\alpha < d/2$ wohldefiniert ist). Das zu a_{**} gehörige δ_{**} ist nach (7.3) gerade $\delta_{**} = d/2 - \alpha$, das heißt $a_{**} > a_*$ wegen $\delta_{**} < (d - \alpha)/2$ und der Monotonie der Abbildung (7.2). Wir behaupten, dass für $|a| < |a_{**}|$ die Ungleichung (7.5) für alle $s \leq 2$ gilt. Um dies zu zeigen, genügt es wieder (wegen Operatormonotonie positiver Wurzeln), die Behauptung für $s = 2$ zu zeigen. In diesem Fall folgt aus der Dreiecks- und der Hardy-Ungleichung

$$\|\mathcal{L}_{a,\alpha} f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \geq \| |p|^\alpha f \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} - |a| \| |x|^\alpha f \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \geq \left(1 - |a| \mathcal{H}_{d,2\alpha}^{-1/2}\right) \| |p|^\alpha f \|_{L^2(\mathbb{R}^d)},$$

was behauptet wurde.

Beweisstrategie

Aus (7.4) und der Hardy-Ungleichung (7.1) folgt sofort eine Hardy-Ungleichung für Potenzen von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$.

Behauptung 7.1.4 (Verallgemeinerte Hardy-Ungleichung). *Seien $\alpha \in (0, \min\{2, d\})$, $a \in [a_*, +\infty)$, und δ durch (7.3) definiert. Dann gilt für alle $0 < \alpha s/2 < \min\{(d - 2\delta)/2, d\}$*

$$\| |x|^{-\alpha s/2} f \|_2 \lesssim_{d,\alpha,a,s} \left\| \mathcal{L}_{a,\alpha}^{s/2} f \right\|_2 \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d). \quad (7.6)$$

Falls umgekehrt $0 < \alpha s/2 < \min\{d - 2\delta, d\}$ und obige Abschätzung gilt, dann ist auch $\alpha s/2 < (d - 2\delta)/2$.

Tatsächlich ist die Strategie des Beweises gerade umgekehrt. Wir werden nicht (7.6) aus Satz 7.1.1 folgern. Stattdessen ist (7.6) eine wichtige Zutat für den Beweis von Satz 7.1.1 und wir werden diese daher zuerst zeigen. Eine weitere Zutat für den Beweis des Hauptresultats ist die folgende *umgekehrte Hardy-Ungleichung*. Diese gibt eine *untere* Schranke an die Norm von $|x|^{-\alpha s/2} f$, welche durch die Differenz $\left(\mathcal{L}_{a,\alpha}^{s/2} - |p|^{\alpha s/2}\right) f$ ausgedrückt wird. Solche Ungleichungen scheinen – selbst für $\alpha = 2$ – bisher unbekannt gewesen zu sein. Für $\alpha = 2$ könnten sie vermutlich ebenfalls mit unserer Beweisstrategie für die punktweisen Abschätzungen der Differenz der Wärmeleitungskerne der Hardy-Operatoren gewonnen werden.

Behauptung 7.1.5 (Umgekehrte Hardy-Ungleichung für Differenzen). *Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$ und $a \in [a_*, +\infty)$. Dann gilt für alle $s \in (0, 2]$*

$$\left\| \left(\mathcal{L}_{a,\alpha}^{s/2} - |p|^{\alpha s/2} \right) f \right\|_2 \lesssim_{d,\alpha,a,s} \left\| |x|^{-\alpha s/2} f \right\|_2 \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d).$$

Bevor wir fortfahren, zeigen wir, dass Satz 7.1.1 eine unmittelbare Konsequenz der Behauptungen 7.1.4 und 7.1.5 ist.

Beweis von Satz 7.1.1. Falls $\alpha s/2 < (d - 2\delta)/2$, erhalten wir mit Hilfe der Behauptungen 7.1.5 und 7.1.4

$$\begin{aligned} \left\| |p|^{\alpha \frac{s}{2}} f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} &\leq \left\| \mathcal{L}_{a,\alpha}^{\frac{s}{2}} f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} + \left\| \left(\mathcal{L}_{a,\alpha}^{s/2} - |p|^{\alpha s/2} \right) f \right\|_2 \\ &\lesssim \left\| \mathcal{L}_{a,\alpha}^{\frac{s}{2}} f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} + \left\| |x|^{-\alpha s/2} f \right\|_2 \\ &\lesssim \left\| \mathcal{L}_{a,\alpha}^{\frac{s}{2}} f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}. \end{aligned}$$

Dies zeigt (1) des Satzes. Wir bemerken, dass die Annahme $\alpha s/2 < d$ in Behauptung 7.1.4 automatisch aus $s \leq 2$ und $\alpha < d$ folgt.

Falls $\alpha s/2 < d/2$, argumentieren wir ähnlich, verwenden dieses mal aber die Hardy-Ungleichung (7.1) (mit αs , anstatt α) anstatt Behauptung 7.1.4. Dies zeigt (2) des Satzes. \square

Wir haben damit den Beweis von Satz 7.1.1 auf den der Behauptungen 7.1.4 und 7.1.5 zurückgeführt. Wir illustrieren nun ihre Beweise. Sie beruhen – wie die im Fall $\alpha = 2$ in [102] – sehr stark auf beidseitigen punktweisen Schranken für den Wärmeleitungskern von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$. Diese wurden erst kürzlich von Bogdan u. a. [15] für $0 > a \geq a_*$ und Jakubowski und Wang [99] sowie Cho u. a. [24] für $a > 0$ bewiesen.

Im ersten Schritt verwenden wir die Schranken an $e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}$, um punktweise Schranken an den Riesz-Kern $\mathcal{L}_{a,\alpha}^{-s/2}$ herzuleiten.

Satz 7.1.6 (Riesz-Kerne der verallgemeinerten Hardy-Operatoren). *Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$, $a \in [a_*, \infty)$ und δ durch (7.3) definiert. Sei ferner $0 < \alpha s/2 < \min\{d, d - 2\delta\}$. Dann gilt*

$$\mathcal{L}_{a,\alpha}^{-s/2}(x, y) \sim_{d,\alpha,a,s} |x - y|^{\alpha \frac{s}{2} - d} \left(1 \wedge \frac{|x|}{|x - y|} \wedge \frac{|y|}{|x - y|} \right)^{-\delta}. \quad (7.7)$$

Eine Anwendung dieses Satzes ist beispielsweise der Beweis von Behauptung 7.1.4.

Beweis von Behauptung 7.1.4. Offensichtlich ist (7.6) äquivalent zur L^2 -Beschränktheit des Operators $|x|^{-\alpha s/2} \mathcal{L}_{a,\alpha}^{-s/2}$. Mittels der oberen Schranke aus Satz 7.1.6 folgt dies aus der L^2 -Beschränktheit des Operators mit dem Integralkern

$$|x|^{-\alpha \frac{s}{2}} |x - y|^{\alpha \frac{s}{2} - d} \left(1 \wedge \frac{|x|}{|x - y|} \wedge \frac{|y|}{|x - y|} \right)^{-\delta}.$$

Diese wiederum folgt unmittelbar mittels eines Schur-Tests. Da dasselbe Argument bereits in [102, Proposition 3.2] (mit s anstatt $\alpha s/2$ und σ anstatt δ) durchgeführt wurde und wir ähnliche Schur-Tests später nochmals durchführen werden, unterlassen wir hier die Details.

Die Tatsache, dass die Ungleichung (7.6) für $\alpha s/2 \geq (d - 2\delta)/2$ im Allgemeinen falsch ist, folgt aus der unteren Schranke aus Satz 7.1.6 mit demselben Gegenbeispiel wie in [102, Proposition 3.2]. \square

Diese Schranken reduzieren den Beweis von Behauptung 7.1.4 auf den von Satz 7.1.6, welchen wir in Abschnitt 7.2 geben.

Wir fahren nun mit der Strategie des Beweises fort. Während die Beweise von Behauptung 7.1.4 und Satz 7.1.6 die punktweisen Schranken von $e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}}$ verwenden, benötigen wir gute punktweise Schranken an die *Differenz der Wärmeleitungskerne* von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ und $|p|^\alpha$, um den Beweis von Behauptung 7.1.5 zu schließen. Diese Schranken werden in Abschnitt 7.3 und insbesondere in Lemma 7.3.1 diskutiert. Wir betonen an dieser Stelle, dass die Wärmeleitungskerne für $\alpha < 2$ *keinen* außerdiagonalen Gaußschen Abfall haben (wie im Fall $\alpha = 2$). Tatsächlich fallen die Kerne lediglich algebraisch ab, was die Herleitung der punktweisen Schranken an den Riesz-Kern und die Differenz der Wärmeleitungskerne erheblich erschwert.

Anwendungen

Wir schließen die Einleitung mit einigen Anwendungen des Hauptresultats, Satz 7.1.1. Die unmittelbarste Anwendung ist der Beweis einer Sobolew-Ungleichung für den Operator $\mathcal{L}_{a,\alpha}$. Diese folgt sofort aus Satz 7.1.1 und der üblichen Sobolew-Ungleichung.

Korollar 7.1.7. *Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$, $a \in [a_*, \infty)$ und sei δ durch (7.3) definiert. Dann gilt für alle $s \in (0, 2]$ mit $\alpha s/2 < \min\{(d - 2\delta)/2, d/2\}$*

$$\|f\|_{L^{\frac{2d}{d-\alpha s}}(\mathbb{R}^d)} \lesssim_{d,\alpha,a,s} \left\| \mathcal{L}_{a,\alpha}^{\frac{s}{2}} f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d). \quad (7.8)$$

Für weitere Sobolew-Ungleichungen, die $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ involvieren, verweisen wir auf Anhang D.3.

In [65] zeigten Frank u. a. die erstaunliche Tatsache, dass Cwikel–Lieb–Rosenbljum- und Lieb–Thirring-Ungleichungen aus Sobolew-Ungleichungen hergeleitet werden können. Die Herleitung der schwierigeren Hardy–Lieb–Thirring-Ungleichungen würde daher (zumindest für subkritische Kopplungskonstanten) aus ihrer Arbeit und Satz 7.1.1 folgen.

Als Nächstes verallgemeinern wir das Hauptresultat auch auf den masselosen Coulomb–Dirac-Operator

$$D^\nu := -i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - \frac{\nu}{|x|} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$$

mit $0 \leq \nu \leq 1$ in der Nenciu- [135] beziehungsweise Esteban–Loss-Realisierung [47] (siehe auch die Diskussion in Abschnitt 1.3.2 über die erlaubten Kopplungskonstanten und ihr Verhältnis mit selbstadjungierten Realisierungen). Der fundamentale Unterschied zum Herbst-Operator

ist, dass D^ν nicht von unten beschränkt ist. Nichtsdestotrotz können wir, auf den Ergebnissen von Morozov und Müller [132] aufbauend, analoge Schranken für $|D^\nu|$ wie in Satz 7.1.1 herleiten.

Korollar 7.1.8. *Seien $\nu \in (0, 1]$ und $s \in (0, 2]$.*

1. *Falls zusätzlich $s < 1 + 2\sqrt{1 - \nu^2}$, dann gilt*

$$\| |p|^{\frac{s}{2}} f \|_{L^2} \lesssim_{\nu, s} \| |D^\nu|^{\frac{s}{2}} f \|_{L^2} \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4). \quad (7.9)$$

2. *Es gilt*

$$\| |D^\nu|^{\frac{s}{2}} f \|_{L^2} \lesssim_{\nu, s} \| |p|^{\frac{s}{2}} f \|_{L^2} \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4). \quad (7.10)$$

Beweis. Wir beginnen mit dem Beweis des einfacheren zweiten Teils, welcher auch ohne unser Hauptresultat bewiesen werden kann. Die Idee ist die Gleiche wie in Bemerkung 7.1.3. Wir erinnern zunächst an die Gleichheit $(-i\alpha \cdot \nabla)^2 = -\Delta \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}$. Mittels der Cauchy-Schwarz- und der Hardy-Ungleichung (7.1) mit $d = 3$ und $\alpha = 2$ ist

$$(D^\nu)^2 \leq A_\nu (-\Delta) \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}.$$

Wegen Operatormonotonie der Wurzel erhalten wir (wie in Bemerkung 7.1.2) für alle $0 < t \leq 1$

$$|D^\nu|^{2t} \leq A_\nu^t |p|^{2t} \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}.$$

Dies zeigt (7.10) mit $s = 2t$.

Wir kommen nun zum schwierigeren Teil des Beweises des Korollars. In [132] zeigten Morozov und Müller

$$(D^\nu)^2 \geq A_\nu (\mathcal{L}_{a,1})^2 \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}$$

mit

$$a = -\sqrt{1 - \nu^2} \cot\left(\frac{\pi}{2} \sqrt{1 - \nu^2}\right), \quad \text{falls } \nu < 1, \quad a = -\frac{\pi}{2}, \quad \text{falls } \nu = 1,$$

siehe auch [132, Lemma II.5, Lemma III.1 und Abschnitt IV]. Obwohl die Autoren die Schranke nicht explizit formulieren, kann sie direkt aus ihren Resultaten gefolgert werden. Die auf den nullten Drehimpulskanal eingeschränkte Schranke ist zu ihrem Lemma IV.4 äquivalent, wohingegen ihr Lemma IV.5 besagt, dass $(D^\nu)^2$ auf dem orthogonalen Komplement dieses Kanals tatsächlich durch eine Konstante mal $-\Delta \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}$ nach unten abgeschätzt werden kann. Wie zuvor, kann $-\Delta \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}$ mit der Hardy-Ungleichung weiter nach unten durch $(\mathcal{L}_{a,1})^2 \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}$ abgeschätzt werden. Mit der Operatormonotonie positiver Wurzeln erhalten wir daher für alle $0 < t < 1$

$$|D^\nu|^{2t} \geq A_\nu^t \mathcal{L}_{a,1}^{2t} \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4}.$$

Die Beobachtung $a = \Psi_{1,3}(1 - \sqrt{1 - \nu^2})$ und Satz 7.1.1 mit $s = 2t$ implizieren dann (7.9). \square

Die hauptsächliche Motivation für Satz 7.1.1 ist natürlich der Beweis der starken Scott-Vermutung für den Chandrasekhar- und den Furry-Operator, siehe Kapitel 5 und 6. Hier müssen wir gewisse Form- und Spur-Ungleichungen bezüglich des Chandrasekhar- beziehungsweise des Furry-Operators zeigen. Diese lassen sich mit unserem Resultat sofort auf die entsprechenden Ungleichungen bezüglich $\sqrt{-\Delta}$ zurückführen, welche deutlich leichter zu beweisen sind.

7.2 Wärmeleitungs- und Riesz-Kerne

Wir beweisen in diesem Abschnitt Satz 7.1.6. Dazu erinnern wir an die kürzlich von Bogdan u. a. [15] (für $a < 0$) und Jakubowski und Wang [99] sowie Cho u. a. [24] (für $a > 0$) bewiesenen beidseitigen punktweisen Schranken für den Wärmeleitungskern von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ für $a \geq a_*$. Für $a = 0$ wurden die Schranken bereits von Blumenthal und Gettoor [12] gezeigt. Im Spezialfall $a = 0$ und $\alpha = 1$ zeigt eine explizite Rechnung, dass der Wärmeleitungskern gerade der Poisson-Kern ist, siehe auch [170, Theorem 1.14].

Satz 7.2.1 (Wärmeleitungskerne verallgemeinerter Hardy-Operatoren). *Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$, $a \geq a_*$ und sei δ durch (7.3) definiert. Dann erfüllt der Wärmeleitungskern von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ für alle $x, y \in \mathbb{R}^d$ und $t > 0$ die beidseitigen Schranken*

$$e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, y) \sim \left(1 \vee \frac{t^{1/\alpha}}{|x|}\right)^\delta \left(1 \vee \frac{t^{1/\alpha}}{|y|}\right)^\delta t^{-d/\alpha} \left(1 \wedge \frac{t^{1+d/\alpha}}{|x-y|^{d+\alpha}}\right). \quad (7.11)$$

Für $a > 0$ kann man auch das Maximumprinzip der Wärmeleitungsgleichung beziehungsweise die Trotter-Formel verwenden, um die folgende, simplere Schranke zu erhalten. Diese ist interessanterweise ausreichend, um die Differenz der gestörten und ungestörten Wärmeleitungskerne abzuschätzen (Lemma 7.3.1) und damit die umgekehrte Hardy-Ungleichung (Behauptung 7.1.5) zu zeigen.

Lemma 7.2.2. *Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$ und $a \in (0, \infty)$. Dann erfüllt der Wärmeleitungskern von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ für alle $x, y \in \mathbb{R}^d$ und $t > 0$ die Schranke*

$$0 \leq e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, y) \leq e^{-t|p|^\alpha}(x, y). \quad (7.12)$$

Alternativ folgt das Lemma auch aus der Duhamel-Formel (siehe später auch (7.16))

$$e^{-|p|^\alpha} - e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}} = a \int_0^1 e^{-(1-s)|p|^\alpha} |x|^{-\alpha} e^{-s\mathcal{L}_{a,\alpha}} ds$$

und der Positivität der Wärmeleitungskerne (welche für $e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}}$ ebenfalls auch direkt aus der Trotter-Formel folgt).

Kombiniert man diese Schranke mit der aus Satz 7.2.1 für $a = 0$, erhält man

$$0 \leq e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, y) \lesssim t^{-d/\alpha} \left(1 \wedge \frac{t^{1+d/\alpha}}{|x-y|^{d+\alpha}}\right).$$

Aus den Schranken an den Wärmeleitungskern können wir sofort die behaupteten Schranken an den Riesz-Kern herleiten.

Beweis von Satz 7.1.6. Mit dem Spektralsatz kann der Riesz-Kern durch

$$\mathcal{L}_{a,\alpha}^{-s/2}(x, y) = \frac{1}{\Gamma(s/2)} \int_0^\infty e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, y) t^{s/2} \frac{dt}{t} \quad (7.13)$$

dargestellt werden. Setzt man die beidseitigen Schranken für $e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}$ aus Satz 7.2.1 ein und skaliert $t \mapsto |x-y|^\alpha t$, sieht man, dass die rechte Seite von (7.13) zu

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty t^{-\frac{d}{\alpha} + \frac{s}{2}} \left(1 \vee \frac{t^{1/\alpha}}{|x|}\right)^\delta \left(1 \vee \frac{t^{1/\alpha}}{|y|}\right)^\delta \left(1 \wedge \frac{t^{1+d/\alpha}}{|x-y|^{d+\alpha}}\right) \frac{dt}{t} \\ & = |x-y|^{\alpha\frac{s}{2}-d} \int_0^\infty dt t^{\frac{s}{2}} \left(1 \wedge t^{-\frac{d}{\alpha}-1}\right) \left(1 \vee \frac{|x-y|t^{\frac{1}{\alpha}}}{|x|}\right)^\delta \left(1 \vee \frac{|x-y|t^{\frac{1}{\alpha}}}{|y|}\right)^\delta \end{aligned} \quad (7.14)$$

äquivalent ist. Da $\mathcal{L}_{a,\alpha}^{-s/2}(x,y)$ symmetrisch in x und y ist, können wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit $|x| \leq |y|$ annehmen. Daher müssen wir nur noch zeigen, dass das Integral auf der rechten Seite von (7.14) für $|x| \leq |y|$ zu

$$\left(1 \wedge \frac{|x|}{|x-y|}\right)^{-\delta}$$

äquivalent ist. Dazu unterscheiden wir zwischen den Fällen $|x-y| \leq 4|x|$ und $|x-y| \geq 4|x|$.

Fall $|x-y| \leq 4|x|$. In diesem Fall ist $|y| \leq |x| + |x-y| \leq 5|x|$ und daher

$$|x-y| \lesssim |x| \sim |y|.$$

Daher ist das Integral in (7.14) zu

$$\int_0^\infty dt t^{\frac{s}{2}} \left(1 \wedge t^{-\frac{d}{\alpha}-1}\right) \left(1 \vee \lambda^{-1} t^{\frac{1}{\alpha}}\right)^{2\delta}$$

äquivalent, wobei $\lambda := |x|/|x-y| \geq 1/4$. Wir müssen nun zeigen, dass dieses zu 1 äquivalent ist. Wir haben

$$\int_0^{\lambda^\alpha} dt t^{\frac{s}{2}} \left(1 \wedge t^{-\frac{d}{\alpha}-1}\right) \left(1 \vee \lambda^{-1} t^{\frac{1}{\alpha}}\right)^{2\delta} = \int_0^{\lambda^\alpha} dt t^{\frac{s}{2}} \left(1 \wedge t^{-\frac{d}{\alpha}-1}\right) \sim 1,$$

da $\lambda \geq 1/4$ und da das Integral wegen der Annahme $s/2 < d/\alpha$ konvergiert. Andererseits gilt wieder wegen $\lambda \geq 1/4$ und $\alpha s/2 < d$

$$\begin{aligned} \int_{\lambda^\alpha}^\infty dt t^{\frac{s}{2}} \left(1 \wedge t^{-\frac{d}{\alpha}-1}\right) \left(1 \vee \lambda^{-1} t^{\frac{1}{\alpha}}\right)^{2\delta} &= \int_{\lambda^\alpha}^\infty dt t^{\frac{s}{2}} \left(1 \wedge t^{-\frac{d}{\alpha}-1}\right) \lambda^{-2\delta} t^{\frac{2\delta}{\alpha}} \\ &\lesssim \int_{\lambda^\alpha}^\infty dt t^{\frac{s}{2} - \frac{d}{\alpha} - 1} \lambda^{-2\delta} t^{\frac{2\delta}{\alpha}} \sim \lambda^{\frac{\alpha s}{2} - d} \lesssim 1. \end{aligned}$$

Das Integral konvergierte wegen der Annahme $s/2 + 2\delta/\alpha < d/\alpha$. Dies zeigt die behauptete obere Schranke. Da das Integral von λ^α bis Unendlich nicht-negativ ist, folgt die behauptete untere Schranke auch aus dem vorigen Integral von Null bis λ^α , welches echt positiv ist.

Fall $|x-y| \geq 4|x|$. In diesem Fall ist sowohl $|x-y| \leq |x| + |y| \leq 2|y|$, als auch $|y| \leq |x| + |x-y| \leq \frac{5}{4}|x-y|$, weshalb auch

$$|x| \leq |y| \sim |x-y|.$$

Daher ist das Integral in (7.14) zu

$$\int_0^\infty dt t^{\frac{s}{2}} \left(1 \wedge t^{-\frac{d}{\alpha}-1}\right) \left(1 \vee \lambda^{-1} t^{\frac{1}{\alpha}}\right)^\delta \left(1 \vee t^{\frac{1}{\alpha}}\right)^\delta$$

äquivalent, wobei $\lambda := |x|/|x - y| \leq 1/4$. Wir zeigen nun, dass dieses zu $\lambda^{-\delta}$ äquivalent ist. Wegen $\lambda \leq 1/4$ und $\delta > -\alpha$ ist

$$\int_{\lambda^\alpha}^1 dt t^{\frac{s}{2}} \left(1 \wedge t^{-\frac{d}{\alpha}-1}\right) \left(1 \vee \lambda^{-1} t^{\frac{1}{\alpha}}\right)^\delta \left(1 \vee t^{\frac{1}{\alpha}}\right)^\delta = \int_{\lambda^\alpha}^1 dt t^{\frac{s}{2}} \lambda^{-\delta} t^{\frac{\delta}{\alpha}} \sim \lambda^{-\delta}$$

und unter Verwendung von $s/2 + 2\delta/\alpha < d/\alpha$ ist

$$\int_1^\infty dt t^{\frac{s}{2}} \left(1 \wedge t^{-\frac{d}{\alpha}-1}\right) \left(1 \vee \lambda^{-1} t^{\frac{1}{\alpha}}\right)^\delta \left(1 \vee t^{\frac{1}{\alpha}}\right)^\delta = \int_1^\infty dt t^{\frac{s}{2}-\frac{d}{\alpha}-1} \lambda^{-\delta} t^{\frac{\delta}{\alpha}} \sim \lambda^{-\delta}.$$

Andererseits ist (mit $\delta > -\alpha$, was insbesondere $\alpha s/2 + \alpha + \delta \geq 0$ zur Folge hat)

$$\int_0^{\lambda^\alpha} dt t^{\frac{s}{2}} \left(1 \wedge t^{-\frac{d}{\alpha}-1}\right) \left(1 \vee \lambda^{-1} t^{\frac{1}{\alpha}}\right)^\delta \left(1 \vee t^{\frac{1}{\alpha}}\right)^\delta = \int_0^{\lambda^\alpha} dt t^{\frac{s}{2}} \sim \lambda^{\frac{s\alpha}{2}+\alpha} \lesssim \lambda^{-\delta}.$$

Dies zeigt die behauptete obere Schranke. Da außerdem das letzte Integral nicht-negativ ist, erhalten wir auch die behauptete untere Schranke. Damit ist der Satz bewiesen. \square

7.3 Differenz der Wärmeleitungskerne

In diesem Abschnitt beweisen wir Behauptung 7.1.5. Der Schlüssel hierfür sind möglichst gute Schranken an die Differenz der Wärmeleitungskerne von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ und $|p|^\alpha$, das heißt

$$K_t^\alpha(x, y) := e^{-t|p|^\alpha}(x, y) - e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, y).$$

Die Schranken an die individuellen Wärmeleitungskerne $e^{-t|p|^\alpha}(x, y)$ und $e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, y)$ wurden im letzten Abschnitt diskutiert. Das folgende Lemma besagt, dass es bei der Differenz der Kerne effektive Auslöschungen in den Regionen $(|x| \vee |y|)^\alpha \geq t$ und $|x| \sim |y|$ gibt. Es ist interessant zu beobachten, dass die beidseitigen Schranken für $e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}$ nur für $a < 0$ benötigt werden. Für $a \geq 0$ reicht das Maximumprinzip (Lemma 7.2.2) für die Zwecke dieses Abschnitts aus.

Wir formulieren die Differenz der Kerne mit Hilfe der Funktionen

$$L_t^{\alpha,\delta}(x, y) := \mathbf{1}_{\{(|x| \vee |y|)^\alpha \leq t\}} t^{-\frac{d}{\alpha}} \left(\frac{t^{2/\alpha}}{|x||y|} \right)^\delta + \mathbf{1}_{\{(|x| \vee |y|)^\alpha \geq t\}} \frac{t}{(|x| \vee |y|)^{d+\alpha}} \left(1 \vee \frac{t^{1/\alpha}}{|x| \wedge |y|} \right)^\delta$$

und

$$M_t^\alpha(x, y) := \mathbf{1}_{\{(|x| \vee |y|)^\alpha \geq t\}} \mathbf{1}_{\{\frac{1}{2}|x| \leq |y| \leq 2|x|\}} \frac{t^{1-\frac{d}{\alpha}}}{(|x| \wedge |y|)^\alpha} \left(1 \wedge \frac{t^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|x-y|^{d+\alpha}} \right).$$

Mit dem Positiv-Teil $\delta_+ := \max\{\delta, 0\}$ (sprich $\delta_+ = 0$, wenn $a \geq 0$ und $\delta_+ = \delta$, wenn $a < 0$) zeigen wir

Lemma 7.3.1 (Differenz der Kerne). *Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$, $a \in [a_*, \infty)$ und sei δ durch (7.3) definiert. Dann gilt für alle $x, y \in \mathbb{R}^d$ und $t > 0$*

$$|K_t^\alpha(x, y)| \lesssim L_t^{\alpha,\delta_+}(x, y) + M_t^\alpha(x, y). \quad (7.15)$$

Beweis. Wegen der Symmetrie in x und y genügt es $|x| \leq |y|$ zu betrachten. Durch Skalieren sieht man weiter ein, dass es genügt, $t = 1$ zu untersuchen, weshalb wir von nun an den Index t bei den Funktionen K_t^α , $L_t^{\alpha, \delta}$ und M_t^α vernachlässigen.

Falls $a \geq 0$ (sprich $\delta \leq 0$), kombinieren wir das Maximumprinzip (Lemma 7.2.2) und die Schranke aus Satz 7.2.1 für $a = 0$ und erhalten

$$0 \leq K^\alpha(x, y) \leq e^{-|p|^\alpha}(x, y) \sim 1 \wedge |x - y|^{-d-\alpha}.$$

Dies zeigt die Schranke $K^\alpha(x, y) \lesssim L^{\alpha, 0}(x, y)$, falls $|y| \leq 1$ (durch Beschränken des Minimums durch 1), oder, im Fall $|y| \geq 1$ und $|x| \leq |y|/2$ (durch Beschränken des Minimums durch $|x - y|^{-d-\alpha} \lesssim |y|^{-d-\alpha}$).

Falls $a < 0$ (sprich $\delta > 0$), kombinieren wir wieder das Maximumprinzip und Satz 7.2.1. Dann folgt

$$0 \leq -K^\alpha(x, y) \leq e^{-\mathcal{L}_{a, \alpha}}(x, y) \lesssim (1 \vee |x|^{-\delta}) (1 \vee |y|^{-\delta}) (1 \wedge |x - y|^{-d-\alpha}).$$

Dies zeigt die Schranke $-K^\alpha(x, y) \lesssim L^{\alpha, \delta}(x, y)$, falls $|y| \leq 1$ (da dann das Produkt der ersten beiden Faktoren auf der rechten Seite kleiner oder gleich $(|x||y|)^{-\delta}$ ist), oder, falls $|y| \leq 1$ und $|x| \leq |y|/2$ (da dann der kleinere der ersten beiden Faktoren gleich 1 ist und der dritte Faktor, also $1 \wedge |x - y|^{-d-\alpha}$, durch $|y|^{-d-\alpha}$ abgeschätzt werden kann).

Wir können daher von nun annehmen, dass $|y| \geq 1$ und $|x|/2 \leq |y| \leq 2|x|$. Mit der Duhamel-Formel ist

$$\begin{aligned} & a \int_0^1 ds e^{-(1-s)|p|^\alpha} |x|^{-\alpha} e^{-s\mathcal{L}_{a, \alpha}} \\ &= e^{-|p|^\alpha} \int_0^1 ds e^{s|p|^\alpha} (|p|^\alpha + a|x|^{-\alpha}) e^{-s\mathcal{L}_{a, \alpha}} - e^{-|p|^\alpha} \int_0^1 ds e^{s|p|^\alpha} |p|^\alpha e^{-s\mathcal{L}_{a, \alpha}} \\ &= -e^{-|p|^\alpha} \int_0^1 ds e^{s|p|^\alpha} \partial_s e^{-s\mathcal{L}_{a, \alpha}} - e^{-|p|^\alpha} \int_0^1 ds \partial_s e^{s|p|^\alpha} e^{-s\mathcal{L}_{a, \alpha}} \\ &= -e^{-|p|^\alpha} (e^{|p|^\alpha} e^{-\mathcal{L}_{a, \alpha}} - 1) = e^{-|p|^\alpha} - e^{-\mathcal{L}_{a, \alpha}}. \end{aligned} \tag{7.16}$$

Falls $a \geq 0$, verwenden wir Lemma 7.2.2 und Satz 7.2.1 (mit $a = 0$) und schließen, dass

$$0 \leq K^\alpha(x, y) \lesssim \int_0^1 ds \int_{\mathbb{R}^d} dz |z|^{-\alpha} s^{-\frac{d}{\alpha}} (1-s)^{-\frac{d}{\alpha}} \left(1 \wedge \frac{(1-s)^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|x-z|^{d+\alpha}} \right) \left(1 \wedge \frac{s^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|y-z|^{d+\alpha}} \right).$$

Falls $a < 0$, verwenden wir Satz 7.2.1 und schließen, dass

$$\begin{aligned} 0 \leq -K^\alpha(x, y) &\lesssim \int_0^1 ds \int_{\mathbb{R}^d} dz s^{-\frac{d}{\alpha}} (1-s)^{-\frac{d}{\alpha}} |z|^{-\alpha} \left(1 \wedge \frac{(1-s)^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|x-z|^{d+\alpha}} \right) \\ &\quad \times \left(1 + \frac{s^{\frac{\delta}{\alpha}}}{|y|^\delta} \right) \left(1 + \frac{s^{\frac{\delta}{\alpha}}}{|z|^\delta} \right) \left(1 \wedge \frac{s^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|y-z|^{d+\alpha}} \right) \\ &\lesssim \int_0^1 ds \int_{\mathbb{R}^d} dz s^{-\frac{d}{\alpha}} (1-s)^{-\frac{d}{\alpha}} |z|^{-\alpha} \left(1 \wedge \frac{(1-s)^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|x-z|^{d+\alpha}} \right) \\ &\quad \times \left(1 + \frac{s^{\frac{\delta}{\alpha}}}{|z|^\delta} \right) \left(1 \wedge \frac{s^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|y-z|^{d+\alpha}} \right). \end{aligned}$$

Die zweite Ungleichung rührt von der Tatsache her, dass $s^{1/\alpha} \leq 1 \leq |y|$.

Es verbleibt somit

$$\int_0^1 ds \int_{\mathbb{R}^d} dz s^{-\frac{d}{\alpha}} (1-s)^{-\frac{d}{\alpha}} |z|^{-\alpha} \left(1 \wedge \frac{(1-s)^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|x-z|^{d+\alpha}} \right) \left(1 + \frac{s^{\frac{\delta_{\pm}}{\alpha}}}{|z|^{\delta_{\pm}}} \right) \left(1 \wedge \frac{s^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|y-z|^{d+\alpha}} \right) \quad (7.17)$$

zu beschränken. Dazu zerlegen wir die z -Integration in zwei Teile und beginnen mit der Region $|z| \geq |x|/2$. In diesem Fall schätzen wir

$$|z|^{-\alpha} \lesssim |x|^{-\alpha} \quad \text{und} \quad s^{\frac{1}{\alpha}} \leq 1 \leq |y| \lesssim |x| \lesssim |z|$$

ab. Wir schätzen (7.17) in dieser Region ab, indem wir diese Schranken anwenden und die z -Integration auf ganz \mathbb{R}^d fortsetzen. Das Integral ist dann durch eine Konstante mal

$$\begin{aligned} & \frac{1}{|x|^\alpha} \int_0^1 ds \int_{\mathbb{R}^d} dz s^{-\frac{d}{\alpha}} (1-s)^{-\frac{d}{\alpha}} \left(1 \wedge \frac{(1-s)^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|x-z|^{d+\alpha}} \right) \left(1 \wedge \frac{s^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|y-z|^{d+\alpha}} \right) \\ & \lesssim \frac{1}{|x|^\alpha} \int_0^1 ds \int_{\mathbb{R}^d} dz e^{-(1-s)|p|^\alpha}(x, z) e^{-s|p|^\alpha}(z, y) \\ & = \frac{1}{|x|^\alpha} \int_0^1 ds e^{-|p|^\alpha}(x, y) \\ & \lesssim \frac{1}{|x|^\alpha} \left(1 \wedge |x-y|^{-d-\alpha} \right) = M^\alpha(x, y) \end{aligned}$$

beschränkt. Hierbei haben wir zum einen Satz 7.2.1 zwei mal (mit $a = 0$) und zum anderen die Halbgruppen-Eigenschaft verwendet.

Schließlich müssen wir noch (7.17) in der Region $|z| \leq |x|/2$ abschätzen. Wir beschränken

$$\begin{aligned} & \int_{|z| \leq \frac{1}{2}|x|} dz |z|^{-\alpha} \frac{1}{|x-z|^{d+\alpha}} \left(1 + \frac{s^{\frac{\delta_{\pm}}{\alpha}}}{|z|^{\delta_{\pm}}} \right) \frac{1}{|y-z|^{d+\alpha}} \\ & \lesssim \frac{1}{|x|^{d+\alpha} |y|^{d+\alpha}} \int_{|z| \leq \frac{1}{2}|x|} dz |z|^{-\alpha} \left(1 + \frac{s^{\frac{\delta_{\pm}}{\alpha}}}{|z|^{\delta_{\pm}}} \right) \\ & \sim \frac{1}{|x|^{d+\alpha} |y|^{d+\alpha}} \left(|x|^{d-\alpha} + s^{\frac{\delta_{\pm}}{\alpha}} |x|^{d-\alpha-\delta_{\pm}} \right) \\ & \sim \frac{1}{|x|^{d+\alpha} |y|^{d+\alpha}} |x|^{d-\alpha}, \end{aligned}$$

wobei wir im vorletzten Schritt $\alpha + \delta_{\pm} < d$ (was aus $\delta \leq (d-\alpha)/2$ und $\alpha < d$ folgt) und im letzten Schritt wieder $s^{1/\alpha} \leq 1 \leq |y| \lesssim |x|$ verwendet haben. Setzt man dieses Ergebnis in (7.17) ein, erhalten wir

$$\begin{aligned} & \int_0^1 ds s^{-\frac{d}{\alpha}} (1-s)^{-\frac{d}{\alpha}} \int_{|z| \leq \frac{1}{2}|x|} dz |z|^{-\alpha} \left(1 \wedge \frac{(1-s)^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|x-z|^{d+\alpha}} \right) \left(1 + \frac{s^{\frac{\delta_{\pm}}{\alpha}}}{|z|^{\delta_{\pm}}} \right) \left(1 \wedge \frac{s^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|y-z|^{d+\alpha}} \right) \\ & \lesssim \frac{|x|^{d-\alpha}}{|x|^{d+\alpha} |y|^{d+\alpha}} \int_0^1 ds s(1-s) \sim \frac{|x|^{d-\alpha}}{|x|^{d+\alpha} |y|^{d+\alpha}} \lesssim \frac{1}{|y|^{d+\alpha}} \leq L^{\alpha, \delta_{\pm}}(x, y), \end{aligned}$$

wobei wir im vorletzten Schritt wieder $1 \leq |y| \lesssim |x|$ verwendet haben. Dies zeigt die behauptete Schranke an die Differenz der Wärmeleitungskerne. \square

Wir verwenden diese Schranken, um den Beweis des Hauptresultats zu schließen, denn es verbleibt nur noch die umgekehrte Hardy-Ungleichung (Behauptung 7.1.5) zu zeigen. Dazu verwenden wir (siehe beispielsweise [72] und [161, Theorem 0.3.1])

Lemma 7.3.2 ((Gewichteter) Schur-Test). *Seien $(X, d\mu)$ und $(Y, d\nu)$ messbare Räume und sei $w(x, y)$ eine auf $X \times Y$ messbare Funktion. Angenommen, $K(x, y) : X \times Y \rightarrow \mathbb{C}$ erfüllt*

$$\sup_{x \in X} \int_Y w(x, y)^{\frac{1}{p}} |K(x, y)| d\nu(y) \equiv A_1 < \infty$$

und

$$\sup_{y \in Y} \int_X w(x, y)^{-\frac{1}{p'}} |K(x, y)| d\mu(x) \equiv A_2 < \infty$$

für ein $1 < p < \infty$ beziehungsweise $1 \leq p \leq \infty$, falls $w(x, y) \equiv 1$. Dann ist der durch

$$(Tf)(x) := \int_Y K(x, y) f(y) d\nu(y)$$

definierte Operator von $L^p(Y, d\nu)$ nach $L^p(X, d\mu)$ beschränkt. Insbesondere gilt

$$\|Tf\|_{L^p(X, d\mu)} \leq A_1^{\frac{1}{p}} A_2^{\frac{1}{p'}} \|f\|_{L^p(Y, d\nu)}.$$

Damit kommen wir zum

Beweis von Behauptung 7.1.5. Für $s = 2$ ist die Behauptung trivial, weshalb wir von nun an $0 < s < 2$ voraussetzen. Wegen der Gleichheit

$$\int_0^\infty \frac{dt}{t} t^{-s/2} (e^{-t} - 1) = \Gamma(-s/2)$$

erhalten wir durch Anwenden des Spektralsatzes und Skalieren

$$\begin{aligned} \left(\mathcal{L}_{a,\alpha}^{s/2} - |p|^{\alpha s/2} \right) f &= -\frac{1}{\Gamma(-s/2)} \int_0^\infty \frac{dt}{t} t^{-s/2} \left(\left(e^{-t|p|^\alpha} - 1 \right) f - \left(e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}} - 1 \right) f \right) \\ &= -\frac{1}{\Gamma(-s/2)} \int_0^\infty \frac{dt}{t} t^{-s/2} \left(e^{-t|p|^\alpha} - e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}} \right) f \\ &= -\frac{1}{\Gamma(-s/2)} \int_0^\infty \frac{dt}{t} t^{-s/2} \int_{\mathbb{R}^d} dy K_t^\alpha(\cdot, y) f(y). \end{aligned}$$

Mit Hilfe von Lemma 7.3.1 schätzen wir

$$\begin{aligned} \left\| \left(\mathcal{L}_{a,\alpha}^{s/2} - |p|^{\alpha s/2} \right) f \right\|_2 &\lesssim \left\| \int_{\mathbb{R}^d} dy \int_0^\infty \frac{dt}{t} t^{-\frac{s}{2}} L_t^{\alpha, \delta_+}(x, y) |y|^{\alpha \frac{s}{2}} g(y) \right\|_2 \\ &\quad + \left\| \int_{\mathbb{R}^d} dy \int_0^\infty \frac{dt}{t} t^{-\frac{s}{2}} M_t^\alpha(x, y) |y|^{\alpha \frac{s}{2}} g(y) \right\|_2 \end{aligned} \quad (7.18)$$

ab, wobei wir die Abkürzung $g(y) := |y|^{-\alpha s/2} |f(y)|$ verwendet haben. Das Ziel ist es, beide Terme auf der rechten Seite von (7.18) durch eine Konstante mal $\|g\|_2$ zu beschränken.

Wir beginnen mit dem ersten Term und berechnen

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{dt}{t} t^{-\frac{s}{2}} L_t^{\alpha, \delta_+}(x, y) &= (|x||y|)^{-\delta_+} \int_{t \geq (|x| \vee |y|)^\alpha} \frac{dt}{t} t^{-\frac{s}{2} - \frac{d-2\delta_+}{\alpha}} \\ &\quad + \int_{t \leq (|x| \vee |y|)^\alpha} \frac{dt}{t} t^{-\frac{s}{2}} \frac{t}{(|x| \vee |y|)^{d+\alpha}} \left(1 \vee \frac{t^{1/\alpha}}{|x| \wedge |y|}\right)^{\delta_+} \\ &\sim \frac{1}{(|x| \vee |y|)^{\frac{s\alpha}{2} + d}} \left(\frac{|x| \vee |y|}{|x| \wedge |y|}\right)^{\delta_+}. \end{aligned}$$

Hierbei haben wir $s/2 + (d - 2\delta_+)/\alpha > 0$ (was aus $\delta \leq (d - \alpha)/2$ folgt) verwendet. Daher ist

$$\left\| \int_{\mathbb{R}^d} dy \int_0^\infty \frac{dt}{t} t^{-\frac{s}{2}} L_t^{\alpha, \delta_+}(x, y) |y|^{\alpha \frac{s}{2}} g(y) \right\|_2 \lesssim \left\| \int_{\mathbb{R}^d} dy \frac{1}{(|x| \vee |y|)^d} \left(\frac{|x| \vee |y|}{|x| \wedge |y|}\right)^{\delta_+} g(y) \right\|_2.$$

Für alle $\delta_+ < \beta < d - \delta_+$ (so ein β existiert, da $\delta \leq (d - \alpha)/2 < d/2$) ist

$$\sup_{y \in \mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} dx \left(\frac{|y|}{|x|}\right)^\beta \frac{1}{(|x| \vee |y|)^d} \left(\frac{|x| \vee |y|}{|x| \wedge |y|}\right)^{\delta_+} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{dz}{|z|^\beta (|z| \vee 1)^d} \left(\frac{|z| \vee 1}{|z| \wedge 1}\right)^{\delta_+} < \infty.$$

Mit einem gewichteten Schur-Test (Lemma 7.3.2) können wir daher schließen, dass

$$\left\| \int_{\mathbb{R}^d} dy \frac{1}{(|x| \vee |y|)^d} \left(\frac{|x| \vee |y|}{|x| \wedge |y|}\right)^{\delta_+} g(y) \right\|_2 \lesssim \|g\|_2.$$

Dies zeigt, dass der erste Term in (7.18) die behauptete Schranke erfüllt.

Wir betrachten nun den zweiten Term in (7.18). Da auf dem Träger des Kerns $|x| \sim |y|$ ist, haben wir

$$\left\| \int_{\mathbb{R}^d} dy \int_0^\infty \frac{dt}{t} t^{-\frac{s}{2}} M_t^\alpha(x, y) |y|^{\frac{\alpha s}{2}} g(y) \right\| \lesssim \left\| \int_{\mathbb{R}^d} dy \int_0^\infty \frac{dt}{t} t^{-\frac{s}{2}} M_t^\alpha(x, y) (|x||y|)^{\frac{\alpha s}{4}} g(y) \right\|.$$

Dies ersetzt den ursprünglichen Kern durch einen symmetrischen Kern, weshalb nur ein einziger (statt zwei) Schur-Test durchgeführt werden muss. Wir erhalten

$$\begin{aligned} &\sup_{y \in \mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} dx \int_0^\infty \frac{dt}{t} t^{-\frac{s}{2}} M_t^\alpha(x, y) (|x||y|)^{\frac{\alpha s}{4}} \\ &= \sup_{y \in \mathbb{R}^d} \int_{\frac{1}{2}|y| \leq |x| \leq 2|y|} dx \int_{t \leq (|x| \vee |y|)^\alpha} \frac{dt}{t} t^{-\frac{s}{2}} \frac{t^{1-\frac{d}{\alpha}}}{(|x| \wedge |y|)^\alpha} \left(1 \wedge \frac{t^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|x-y|^{d+\alpha}}\right) (|x||y|)^{\frac{\alpha s}{4}} \\ &\lesssim \sup_{y \in \mathbb{R}^d} |y|^{\frac{\alpha s}{2} - \alpha} \int_{\frac{1}{2}|y| \leq |x| \leq 2|y|} dx \int_{t \leq (2|y|)^\alpha} \frac{dt}{t} t^{-\frac{s}{2} + 1 - \frac{d}{\alpha}} \left(1 \wedge \frac{t^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|x-y|^{d+\alpha}}\right). \end{aligned}$$

Nun vertauschen wir die Reihenfolge der Integrationen und führen zunächst das x -Integral aus. Wir beschränken

$$\int_{\frac{1}{2}|y| \leq |x| \leq 2|y|} dx \left(1 \wedge \frac{t^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|x-y|^{d+\alpha}}\right) \leq \int_{\mathbb{R}^d} dx \left(1 \wedge \frac{t^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|x-y|^{d+\alpha}}\right) \sim t^{\frac{d}{\alpha}}.$$

Daher ist das obige Supremum durch eine Konstante mal

$$\sup_{y \in \mathbb{R}^d} |y|^{\frac{\alpha s}{2} - \alpha} \int_{t \leq (2|y|)^\alpha} \frac{dt}{t} t^{-\frac{s}{2} + 1} \sim 1 \quad (7.19)$$

beschränkt. Daher zeigt der Schur-Test, dass

$$\left\| \int_{\mathbb{R}^d} dy \int_0^\infty \frac{dt}{t} t^{-\frac{s}{2}} M_t^\alpha(x, y) (|x||y|)^{\frac{\alpha s}{4}} g(y) \right\| \lesssim \|g\|_2,$$

womit die Behauptung gezeigt ist. \square

7.4 Eine Verallgemeinerung

Wir schließen das Kapitel mit einer leichten Verallgemeinerung des Hauptresultats, welche beim Beweis der starken Scott-Vermutung eine wichtige Rolle spielt. Es stellt sich heraus, dass das Resultat auch für Operatoren $|p|^\alpha + V$ gilt, wobei V eine Funktion auf \mathbb{R}^d ist, die

$$\frac{a}{|x|^\alpha} \leq V(x) \leq \frac{\tilde{a}}{|x|^\alpha} \quad (7.20)$$

erfüllt. Hierbei ist $a_* \leq a \leq \tilde{a} < \infty$. Wir zeigen

Satz 7.4.1. *Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$, $a_* \leq a \leq \tilde{a} < \infty$ und sei $\delta = \delta(a)$ durch (7.3) definiert. Sei $s \in (0, 2]$.*

1. *Falls $\alpha s/2 + \delta < d/2$, dann gilt für alle V , die (7.20) erfüllen*

$$\| |p|^{\alpha s/2} f \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \lesssim_{d, \alpha, a, s} \| (|p|^\alpha + V)^{s/2} f \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d). \quad (7.21)$$

2. *Falls $\alpha s/2 < d/2$, dann gilt für alle V , die (7.20) erfüllen*

$$\| (|p|^\alpha + V)^{s/2} f \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \lesssim_{d, \alpha, a, s} \| |p|^{\alpha s/2} f \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d). \quad (7.22)$$

Wir betonen, dass δ bezüglich a und nicht bezüglich \tilde{a} definiert ist. Interessanterweise hängen die Konstanten in Satz 7.4.1 nicht von \tilde{a} ab. Mit einem Approximationsargument ließe sich daher die Klasse der erlaubten Potentiale V vermutlich noch vergrößern.

Der Beweis von Satz 7.4.1 folgt unmittelbar aus den folgenden beiden Behauptungen in demselben Stil, wie Satz 7.1.1 aus den Behauptungen 7.1.4 und 7.1.5 folgte.

Behauptung 7.4.2. *Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$, $a_* \leq a \leq \tilde{a} < \infty$ und δ durch (7.3) definiert. Dann gilt für alle $0 < \alpha s/2 < \min\{(d - 2\delta)/2, d\}$ und alle V , die (7.20) erfüllen*

$$\| |x|^{-\alpha s/2} f \|_2 \lesssim_{d, \alpha, a, s} \| (|p|^\alpha + V)^{s/2} f \|_2 \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d).$$

Beweis. Wegen des Maximumprinzips gilt für alle $x, y \in \mathbb{R}^d$ und $t > 0$

$$0 \leq e^{-t(|p|^\alpha + V)}(x, y) \leq e^{-t\mathcal{L}_{a, \alpha}}(x, y) \quad (7.23)$$

und daher, mit dem Analogon von (7.13), auch

$$(|p|^\alpha + V)^{-s/2}(x, y) \leq \mathcal{L}_{a, \alpha}^{-s/2}(x, y).$$

Dies zeigt, dass die oberen Schranken in Satz 7.1.6 auch für den Operator $(|p|^\alpha + V)^{-s/2}$ gültig sind. Die Behauptung folgt nun im gleichen Stil wie Behauptung 7.1.4. \square

Behauptung 7.4.3. *Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$, $a_* \leq a \leq \tilde{a} < \infty$ und $s \in (0, 2]$. Dann gilt für alle V , die (7.20) erfüllen*

$$\left\| \left((|p|^\alpha + V)^{s/2} - |p|^{\alpha s/2} \right) f \right\|_2 \lesssim_{d,\alpha,a,s} \left\| |x|^{-\alpha s/2} f \right\|_2 \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d).$$

Beweis. Für $s = 2$ ist die Aussage trivial, weshalb wir von nun an $s \in (0, 2)$ annehmen. Sei

$$\tilde{K}_t^\alpha(x, y) := e^{-t|p|^\alpha}(x, y) - e^{-t(|p|^\alpha + V)}(x, y).$$

Wegen des Maximumprinzips gilt für alle $x, y \in \mathbb{R}^d$ und $t > 0$

$$e^{-t|p|^\alpha}(x, y) - e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, y) \leq \tilde{K}_t^\alpha(x, y) \leq e^{-t|p|^\alpha}(x, y) - e^{-t\mathcal{L}_{\tilde{a},\alpha}}(x, y).$$

Da $\tilde{\delta} = \Psi_{\alpha,d}^{-1}(\tilde{a}) \leq \delta$, folgt aus Lemma 7.3.1 mit a und \tilde{a} die Abschätzung

$$|\tilde{K}_t^\alpha(x, y)| \lesssim L_t^{\alpha,\tilde{\delta}+}(x, y) + L_t^{\alpha,\delta+}(x, y) + M_t^\alpha(x, y) \lesssim L_t^{\alpha,\delta+}(x, y) + M_t^\alpha(x, y).$$

Mit dieser Schranke folgt die Behauptung mit den gleichen Schritten wie im Beweis von Behauptung 7.1.5. \square

Kapitel 8

Äquivalenz von Sobolew-Normen für verallgemeinerte Hardy-Operatoren in L^p

8.1 Einleitung und Hauptresultat

Das Ziel dieses Kapitels ist die Verallgemeinerung des Hauptresultats über die Äquivalenz von Sobolew-Normen verallgemeinerter Hardy-Operatoren $\mathcal{L}_{a,\alpha} = |p|^\alpha + a|x|^{-\alpha}$ von $L^2(\mathbb{R}^d)$ (Satz 7.1.1) auf $L^p(\mathbb{R}^d)$. Hierbei liegt p in einem Intervall, welches von a, α und d abhängt. Einerseits ist diese Verallgemeinerung von reinem mathematischen Interesse motiviert. Andererseits könnte die gewonnene Äquivalenz der Sobolew-Normen (sowie andere Werkzeuge, die im Zusammenhang mit harmonischer Analysis stehen und in diesem Kapitel erarbeitet werden) für die Untersuchung nicht-linearer partieller Differentialgleichungen, die $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ involvieren, hilfreich sein, um Probleme auf den Operator $|p|^\alpha$ ohne Potential zu reduzieren. Für $\alpha = 2$ wurde das entsprechende Ergebnis beispielsweise von Killip u. a. [104, 103] verwendet, um die Wohlgestelltheit der energiekritischen, nicht-linearen Schrödinger-Gleichung in $d = 3$ mit Hardy-Potential

$$(i\partial_t - \mathcal{L}_{a,2})u = |u|^4u$$

oder die Schwelle zwischen Streuung und Explosion nach endlicher Zeit der fokussierenden, kubischen, nicht-linearen Schrödinger-Gleichung mit Hardy-Potential

$$(i\partial_t - \mathcal{L}_{a,2})u = -|u|^2u$$

zu untersuchen.

Um unsere Resultate präzise zu formulieren, definieren wir für $0 < \alpha < 2 \wedge d$ wieder

$$\Psi_{\alpha,d}(\sigma) := -2^\alpha \frac{\Gamma(\frac{\sigma+\alpha}{2}) \Gamma(\frac{d-\sigma}{2})}{\Gamma(\frac{d-\sigma-\alpha}{2}) \Gamma(\frac{\sigma}{2})} \quad \text{falls } \sigma \in (-\alpha, (d-\alpha)/2] \setminus \{0\}$$

und $\Psi_{\alpha,d}(0) = 0$. Nach [64, Lemma 3.2] und [99, Seite 8] ist die Funktion $\sigma \mapsto \Psi_{\alpha,d}(\sigma)$ stetig und streng monoton fallend in $(-\alpha, (d-\alpha)/2]$ und es gelten

$$\lim_{\sigma \rightarrow -\alpha} \Psi_{\alpha,d}(\sigma) = \infty \quad \text{und} \quad \Psi_{\alpha,d}\left(\frac{d-\alpha}{2}\right) = a_*$$

mit der kritischen Kopplungskonstanten

$$a_* := -\frac{2^\alpha \Gamma((d + \alpha)/4)^2}{\Gamma((d - \alpha)/4)^2}.$$

Konsequenterweise definieren wir wieder für alle $a \in [a_*, \infty)$

$$\delta := \Psi_{\alpha, d}^{-1}(a). \quad (8.1)$$

Unser Hauptresultat basiert auf der Annahme, dass man wenigstens ein Mikhlin-Multiplikator-Theorem für $\mathcal{L}_{a, \alpha}$ beweisen kann, siehe Satz 8.2.1. Anschaulich gesprochen sind Spektralmultiplikator-Theoreme, wie Mikhlin- oder Hörmander-Multiplikator-Theoreme, die Analoga zum Spektralsatz im Hilbertraum L^2 . Bekanntermaßen folgt aus dem Spektralsatz insbesondere, dass messbare und beschränkte Funktionen selbstadjungierter Operatoren L^2 -beschränkt sind. Die entsprechende Aussage in L^p , sprich, dass Funktionen selbstadjungierter Operatoren, welche zuvor auf L^2 definiert sind, auch L^p -beschränkt (mit $1 < p < \infty$) sind, benötigt im Allgemeinen deutlich stärkere Regularitätsbedingungen an die Funktion (auch Multiplikator genannt). Im Falle eines *Mikhlin-Multiplikator-Satzes* [127] verlangt man, dass der Multiplikator m mindestens s mal stetig differenzierbar ist und die Mikhlin-Bedingung

$$|\lambda^j \partial_\lambda^j m(\lambda)| \lesssim_j 1 \quad \text{für alle } j = 0, \dots, s$$

erfüllt. Bei einem *Hörmander-Multiplikator-Theorem* [90] muss der Multiplikator F dagegen gleichmäßig in lokalen Sobolew-Räumen liegen. Damit meinen wir, dass $F \in H_{\text{loc}}^s(\mathbb{R})$ für ein hinreichend großes $s > 0$ sein muss und für ein $0 \neq \varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ die Hörmander-Bedingung

$$\sup_{t > 0} \|\varphi(\cdot) F(t \cdot)\|_{H^s} < \infty$$

erfüllt sein muss. Die Verbindung zur Mikhlin-Bedingung wird offenbar, wenn man in der Hörmander-Bedingung eine Variablensubstitution durchführt, was darauf führt, dass wenigstens

$$\sum_{0 \leq j \leq [s]} \sup_{t > 0} t^{-1} \|t^j \partial^j \varphi(\cdot/t) F(\cdot)\|_2^2 < \infty$$

erfüllt ist. Insbesondere folgt daraus, dass Funktionen, die die Mikhlin-Bedingung erfüllen, auch die Hörmander-Bedingung erfüllen. Sowohl für Mikhlin- als auch für Hörmander-Multiplikator-Theoreme ist $s > d/2$ eine hinreichende Bedingung für die L^p -Beschränktheit von Fouriermultiplikatoren für $1 < p < \infty$, siehe auch [166, Kapitel IV, §3, Theorem 3] und [90].

In diesem Kapitel und in Anhang D untersuchen wir die L^p -Beschränktheit von Spektralmultiplikatoren von $\mathcal{L}_{a, \alpha}$, welche in Satz 8.2.1 für Mikhlin-Multiplikatoren und in Satz D.2.1 für Hörmander-Multiplikatoren behandelt werden. Obwohl es für unsere Anwendung keine direkte Rolle spielt (da wir $\alpha < d$ voraussetzen), bemerken wir außerdem, dass Hebisch [85, Theorem 3.8] bereits ein Hörmander-Multiplikator-Theorem für $|p|^\alpha + V$ mit nicht-negativem Potential V zeigte, wenn $d = 1$ und $\alpha > d = 1$. Dieses wird in Satz D.1.2 wiederholt und im Anschluß ein etwas gestraffter Beweis gegeben. Die neue Beobachtung ist, dass der Beweis tatsächlich ein Multiplikator-Theorem für alle $d \in \mathbb{N}$ und $\alpha \in (0, 2)$ liefert, wenn die Funktion zusätzlich kompakt getragen und hinreichend regulär ist (Behauptung D.1.9). Wir erläutern in diesem Zusammenhang außerdem, woher die Einschränkungen an d und α kommen und weshalb die Argumente wahrscheinlich nicht für $|p|^\alpha + V$ verwendet werden können, wenn V

einen Negativ-Teil hat. Wir bemerken schließlich, dass vor Kurzem Chen u. a. [22, Abschnitt 5.3] (siehe auch ihr Theorem 3.1 und Corollary 3.2) mit völlig unterschiedlichen Techniken das gleiche Resultat zeigten. Zudem zeigen die Autoren Hörmander-Multiplikator-Theoreme unter sehr viel allgemeineren Bedingungen an den zugrunde liegenden Operator. Ihre Argumente basieren dabei nicht auf Abschätzungen, die den Wärmeleitungskern involvieren. Ihr Ergebnis für $|p|^\alpha + V$ ist dabei lediglich eins von vielen Korollaren.

Die Argumente für die Beweise der Spektralmultiplikator-Sätze sind durch die von Killip u. a. [102] für $a < 0$ beziehungsweise Hebisch [84, 83, 85] für $a \geq 0$ inspiriert. Im Folgenden meinen gestrichene Indizes immer die dualen Hölder-Indizes, sprich $p^{-1} + p'^{-1} = 1$. Der Beweis des Mikhlin-Multiplikator-Theorems für $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ mit $a < 0$ beruht auf folgender technischen Annahme, die im Wesentlichen den Wellenpropagator $\cos(\tau\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}})$ betrifft, wie wir später sehen werden.

Annahme 8.1.1. *Seien $d \in \mathbb{N}$, $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$, $a \in [a_*, 0)$, δ durch (8.1) definiert und $q \in (d/(d - \delta), 2)$. Dann gilt folgende Behauptung:*

Sei $f \in L^q(\mathbb{R}^d)$ und $\mathbb{R}^d = F \cup \Omega$ eine Calderón-Zygmund-Zerlegung bezüglich $|f|^q \in L^1(\mathbb{R}^d)$ auf der Höhe h^q ; das heißt $F \cap \Omega = \emptyset$ und $\Omega = \bigcup_k Q_k$, wobei $\{Q_k\}_k$ eine Familie dyadischer Würfel mit Durchmesser $2r_k$ ist, deren Innere disjunkt sind und die Ungleichungen

$$|Q_k| \leq \frac{1}{h^q} \int_{Q_k} |f(x)|^q dx \leq 2^d |Q_k| \quad \text{und} \quad |f(x)| \leq h \text{ fast überall auf } \left(\bigcup_k Q_k\right)^c$$

erfüllen. Sei $f = g + b$, wobei g auf jedem Würfel Q_k konstant ist, $|g(x)| \lesssim h$ für fast alle $x \in \mathbb{R}^d$, $b(x) = \sum_k b_k = \sum_k f(x)\chi_{Q_k}(x)$ und $\int_{Q_k} b_k(x) dx = 0$. Seien ferner

$$j_0 := 3 \left(\left\lceil \frac{4}{\alpha} \right\rceil + \left\lceil \frac{d}{2\alpha} \right\rceil \right) \quad \text{und} \quad \mu := j_0/3.$$

Angenommen, $m : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{C}$ ist beschränkt und messbar und erfüllt

$$|\partial^j m(\lambda)| \lesssim_j \lambda^{-j} \quad \text{für alle } j \in \{0, 1, \dots, j_0\}.$$

Seien $a(\lambda) := m(\lambda) (1 - \exp(-r_k^\alpha \lambda^2))^\mu$, $2^{\mathbb{Z}} \ni R > r_k$ und $\varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ so, dass $\text{supp}(\varphi) \subseteq [-1/2^{\alpha/2}, 1/2^{\alpha/2}]$, $\varphi(\tau) = 1$ für $|\tau| < 1/4^{\alpha/2}$ und

$$\check{\varphi}_R(\lambda) := R^{\alpha/2} \check{\varphi}(R^{\alpha/2} \lambda) = \frac{1}{2\pi} \int e^{i\lambda\tau} \varphi\left(\frac{\tau}{R^{\alpha/2}}\right) d\tau.$$

Definiert man

$$a_1(\lambda) := (a * \check{\varphi}_R)(\lambda) = \pi^{-1} \int_0^\infty \cos(\lambda\tau) \hat{a}(\tau) \varphi\left(\frac{\tau}{R^{\alpha/2}}\right) d\tau,$$

dann gibt es ein $\beta > 0$, sodass

$$\|a_1 b_k\|_{L^1(R < d(x, Q_k) < 2R)} \lesssim \left(\frac{r_k}{R}\right)^\beta r_k^{d/q'} \|b_k\|_q$$

gilt.

◇

Bislang konnten wir ein Multiplikator-Theorem für $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ nur für

- den Wärmeleitungskern $e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}}$ und alle $a \geq a_*$ (Lemma 8.3.2) und
- $a \geq 0$ (Satz D.2.1 und Behauptung D.2.3 für ein Hörmander-Multiplikator-Theorem)

zeigen. Die Gültigkeit unseres Hauptresultats hängt entscheidend von Abschätzungen an Littlewood–Paley-Funktionen (kurz (LP)-Funktionen, auch „square functions“), Satz 8.3.4 ab. Diese beruhen allerdings darauf, dass der Multiplikator

$$m_\varepsilon(\lambda) := \sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} \varepsilon_N \cdot (\lambda/N^{\alpha/2})^{-s} e^{-k(\lambda/N^{\alpha/2})^2} \left(1 - e^{-(2^\alpha-1)(\lambda/N^{\alpha/2})^2}\right)^k$$

für $2\mathbb{N} \ni 2k > s > 0$ und eine Folge $\{\varepsilon_N\}$ mit Rademacher-Verteilung, L^p -beschränkt ist. Dies ist – im Rahmen dieses Kapitels – der Hauptgrund für die Wichtigkeit der Spektralmultiplikator-Sätze.

Mit dieser Einführung formulieren wir nun unser Hauptresultat über die Äquivalenz der L^p -Sobolew-Normen des verallgemeinerten Hardy-Operators $\mathcal{L}_{a,\alpha}$.

Satz 8.1.2 (Äquivalenz von Sobolew-Normen in $L^p(\mathbb{R}^d)$). *Seien $d \in \mathbb{N}$, $0 < \alpha < 2 \wedge d$, $a \geq a_*$, δ durch (8.1) definiert und $s \in (0, 2]$. Sei außerdem Annahme 8.1.1 wahr, falls $s \in (0, 2)$.*

1. Falls $1 < p < \infty$ die Ungleichungen $\alpha s/2 + \delta < d/p < \min\{d, d - \delta\}$ erfüllt, gilt

$$\| |p|^{\alpha \frac{s}{2}} f \|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \lesssim_{d,p,\alpha,s} \| \mathcal{L}_{a,\alpha}^{\frac{s}{2}} f \|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d).$$

2. Falls $\max\{\alpha s/2, \delta\} < d/p < \min\{d, d - \delta\}$ (was bereits $1 < p < \infty$ sicherstellt), gilt

$$\| \mathcal{L}_{a,\alpha}^{\frac{s}{2}} f \|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \lesssim_{d,p,\alpha,s} \| |p|^{\alpha \frac{s}{2}} f \|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d).$$

Der Grund, weshalb wir für $s = 2$ auf die Annahme 8.1.1 verzichten können, ist dass wir in diesem Fall keine Littlewood–Paley-Theorie und damit auch kein Spektralmultiplikator-Theorem benötigen. Stattdessen können wir direkt die gewöhnliche und die verallgemeinerte Hardy-Ungleichung (Lemma 8.1.3 und Behauptung 8.1.4) wie im Beweis von Satz 7.1.1 des letzten Kapitels verwenden.

Für $s < 2$ verläuft der Beweis ähnlich zu dem in $L^2(\mathbb{R}^d)$ des vorigen Kapitels. Dort war es entscheidend, dass man eine verallgemeinerte Hardy-Ungleichung und umgekehrte Hardy-Ungleichungen für die Differenz $\mathcal{L}_{a,\alpha}^{s/2} - |p|^{\alpha s/2}$ zeigen konnte. In diesem Kapitel verallgemeinern wir diese beiden Ungleichungen auf L^p . Wir erinnern an die Standard Hardy-Ungleichung in L^p (siehe beispielsweise Herbst [87, Theorem 2.5] auch für die optimale Konstante in der Ungleichung).

Lemma 8.1.3 (Hardy-Ungleichung). *Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$ und $p \in (1, \infty)$. Dann gilt für alle $s > 0$ mit $\alpha s/2 < d/p$*

$$\| |x|^{-\alpha s/2} f \|_p \leq 2^{-\alpha s/2} \frac{\Gamma((d/p - \alpha s/2)/2) \Gamma(d/(2p'))}{\Gamma((d/p' + \alpha s/2)/2) \Gamma(d/(2p))} \| |p|^{\alpha s/2} f \|_p \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d).$$

Wir formulieren nun die verallgemeinerte Hardy-Ungleichung in L^p , welche wie im vorigen Kapitel mit Hilfe des Riesz-Kerns von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ hergeleitet werden kann.

Behauptung 8.1.4 (Verallgemeinerte Hardy-Ungleichung). *Seien $1 < p < \infty$, $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$, $a \in [a_*, +\infty)$, δ durch (8.1) definiert und $\alpha s/2 \in (0, d)$. Dann gilt für alle $s > 0$ mit $\alpha s/2 + \delta < d/p < d - \delta$*

$$\||x|^{-\alpha s/2} f\|_p \lesssim_{d,\alpha,a,s,p} \|\mathcal{L}_{a,\alpha}^{s/2} f\|_p \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d). \quad (8.2)$$

Falls umgekehrt $\alpha s/2 \in (0, \min\{d, d - 2\delta\})$ und obige Abschätzung wahr ist, dann ist auch $\alpha s/2 + \delta < d/p < d - \delta$.

Beweis. Die Aussage ist äquivalent zur L^p -Beschränktheit des Operators $|x|^{-\alpha s/2} \mathcal{L}_{a,\alpha}^{-s/2}$. Wir erinnern an die punktweisen Schranken an den Riesz-Kern von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ (Satz 7.1.6), sprich

$$\mathcal{L}_{a,\alpha}^{-s/2}(x, y) \sim_{d,\alpha,a,s} |x - y|^{\alpha \frac{s}{2} - d} \left(1 \wedge \frac{|x|}{|x - y|} \wedge \frac{|y|}{|x - y|} \right)^{-\delta}.$$

Die Aussage folgt also aus der L^p -Beschränktheit des Operators mit dem Integralkern, der durch obigen Kern, multipliziert mit $|x|^{-\alpha s/2}$, gegeben ist. Dies wird mit Hilfe eines Schur-Tests bewiesen. Da dasselbe Argument bereits in [102, Proposition 3.2] (mit s anstatt $\alpha s/2$ und σ anstatt δ) ausgeführt wurde und wir ähnliche Schur-Tests bereits im vorigen Kapitel durchgeführt haben und später nochmals durchführen werden, unterlassen wir hier die Details.

Die Tatsache, dass (8.2) für $d/p \leq \alpha s/2 + \delta$ oder $d/p \geq d - \delta$ im Allgemeinen falsch ist, folgt aus der unteren Schranke an den Riesz-Kern mit Hilfe derselben Gegenbeispiele wie in [102, Proposition 3.2]. \square

Wir bemerken wieder, dass, obwohl diese Ungleichung eine entscheidende Zutat für den Beweis von Satz 8.1.2 ist, diese auch direkt aus ihm folgt (wenn Annahme 8.1.1 verifiziert werden kann).

Da wir in L^p keinen Spektralsatz für $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ haben, werden wir Funktionen (in unserem Fall die Funktion $t \mapsto t^s$) von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ mit Hilfe von Satz 8.3.4 durch (LP)-Funktionen ausdrücken. Neben den üblichen Littlewood–Paley-Projektionen, die im Wesentlichen Test-Funktionen (umgangssprachlich „Buckel-Funktionen“) sind, werden wir weitere Projektionen mit Hilfe der Wärmeleitungskerne definieren. Der Grund hierfür ist offensichtlich – wir haben gute punktweise Schranken an den Kern selbst sowie die Differenz zwischen den gestörten und ungestörten Kernen, siehe Lemma 7.3.1. Die Konstruktion von auf Halbgruppen basierenden Littlewood–Paley-Theorien wird beispielsweise ausführlich in Stein [167] behandelt.

Trotz der guten Schranken an diese Differenz ist a priori nicht klar, ob die Projektionen selbst und die Differenz L^p -beschränkt sind. Hinreichend hierfür wäre die Gültigkeit eines Multiplikator-Satzes für $\mathcal{L}_{a,\alpha}$. Wie wir eingangs bereits bemerkt haben, ist ein solcher Satz nur unter gewissen Voraussetzungen an den Multiplikator verifizierbar. Bislang waren wir nur in der Lage die L^p -Beschränktheit des Wärmeleitungskerns für alle $a \geq a_*$ (siehe Lemma 8.3.2) sowie ein Hörmander-Multiplikator-Theorem für alle $a \geq 0$ (siehe Satz D.2.1 und Behauptung D.2.3) zu zeigen. Für $a < 0$ genügt dies allerdings (im Gegensatz zu $a \geq 0$) noch nicht, um Abschätzungen an die (LP)-Funktionen, Satz 8.3.4, zu beweisen. Nichtsdestotrotz können wir immerhin Bernstein-Abschätzungen (Lemma 8.3.2), und Entwicklungen von L^p -Funktionen (Lemma 8.3.3) zeigen, wenn die Littlewood–Paley-Projektionen durch den Wärmeleitungskern ausgedrückt werden. Diese Werkzeuge sind beispielsweise in der Untersuchung partieller Differentialgleichungen unverzichtbar, da sie es erlauben, Probleme auf bestimmten Längenskalen separat zu untersuchen, um anschließend alles wieder zusammensetzen.

Mit dieser Motivation für Littlewood–Paley-Theorie formulieren wir die durch (LP)-Funktionen ausgedrückte, umgekehrte Hardy-Ungleichung.

Behauptung 8.1.5 (Umgekehrte Hardy-Ungleichung in L^p). Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$, $a \geq a_*$, δ durch (8.1) definiert, $p \in (1, \infty)$, wenn $a \geq 0$ und $p \in (d/(d-\delta), d/\delta)$, wenn $a < 0$. Seien weiter $s \in (0, 2)$ und

$$P_N^{a,\alpha} := e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}/N^\alpha} - e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}/(N^\alpha/2^\alpha)}, \quad P_N^\alpha := P_N^{0,\alpha} \quad \text{für } N \in 2^{\mathbb{Z}}.$$

Dann gilt

$$\left\| \left(\sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} |N^{\alpha s/2} P_N^\alpha f|^2 \right)^{1/2} - \left(\sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} |N^{\alpha s/2} P_N^{a,\alpha} f|^2 \right)^{1/2} \right\|_p \lesssim_{d,\alpha,a,s} \| |x|^{-\alpha s/2} f \|_p$$

für alle $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$.

Bevor wir zur Formulierung des Mikhlin-Multiplikator-Satzes kommen, erinnern wir nochmals an die beidseitigen punktweisen Schranken an den Wärmeleitungskern von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ von Bogdan u. a. [15] für $a < 0$ und Cho u. a. [24] oder Jakubowski und Wang [99] für $a > 0$.

Satz 8.1.6 (Wärmeleitungskerne verallgemeinerter Hardy-Operatoren). Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$, $a \geq a_*$ und δ durch (8.1) definiert. Dann erfüllt der Wärmeleitungskern von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ für alle $x, y \in \mathbb{R}^d$ und $t > 0$ die beidseitigen Schranken

$$e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, y) \sim \left(1 \vee \frac{t^{1/\alpha}}{|x|} \right)^\delta \left(1 \vee \frac{t^{1/\alpha}}{|y|} \right)^\delta t^{-d/\alpha} \left(1 \wedge \frac{t^{1+d/\alpha}}{|x-y|^{d+\alpha}} \right).$$

Für $a > 0$ folgt aus dem Maximumprinzip für die Wärmeleitungsgleichung und der Schranke aus Satz 8.1.6 für $a = 0$ wieder die simple Schranke

$$0 \leq e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, y) \lesssim t^{-d/\alpha} \left(1 \wedge \frac{t^{1+d/\alpha}}{|x-y|^{d+\alpha}} \right)$$

für $t > 0$ und $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$.

8.2 Ein Mikhlin-Multiplikator-Theorem für $\mathcal{L}_{a,\alpha}$

Das Ziel dieses Abschnitts ist es, ein Mikhlin-Multiplikator-Theorem für $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ zu zeigen. Dies ist die entscheidende Zutat für den Beweis der L^p -Beschränktheit von Littlewood–Paley-Projektionen und von Abschätzungen an (LP)-Funktionen, um damit das Hauptresultat dieses Kapitels zu zeigen.

Der Beweis verläuft sehr ähnlich zu dem von Killip u. a. [102, Theorem 4.1] (siehe auch [105], [166, Kapitel II, §2-3] und [39]).

Der Hauptunterschied (und auch die größte Schwierigkeit) zwischen den Beweisen der Sätze für $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ und für $-\Delta + a|x|^{-2}$ ist, dass der Wellenpropagator $\cos(\tau\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}})$ keinen kompakten distributionellen Träger hat, wenn $\alpha \neq 2$. Damit meinen wir, dass

$$\bigcup_{\tau \leq R^{\alpha/2}} \text{supp}(\cos(\tau\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}})\delta_y) \subseteq B_y(cR) \quad \text{für alle } y \in \mathbb{R}^d \text{ und ein } c > 0$$

im Allgemeinen *falsch* ist. Der Grund hierfür ist, dass der zugehörige Wärmeleitungskern *keine* Davies–Gaffney-Abschätzungen

$$|(e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}} f_1, f_2)| \lesssim e^{-r^2/t} \|f_1\|_2 \|f_2\|_2 \quad \text{für alle } t > 0$$

erfüllt. Hierbei sind f_1 und f_2 kompakt getragen und r der kleinste Abstand zwischen ihren Trägern. Wir verweisen auf Coulhon und Sikora [27, Theorem 3.4] für eine detailliertere Abhandlung über diesen Zusammenhang.

Bevor wir zur Formulierung des Satzes kommen, bemerken wir, dass Multiplikator-Sätze für eine große Bandbreite abstrakter Operatoren auf abstrakten Räumen bewiesen wurden. Allerdings beruhen diese meistens auf der Annahme, dass der zugehörige Wärmeleitungskern punktweise Gaußsche Schranken [84, 41, 23] oder sogenannte verallgemeinerte Gaußsche Abschätzungen [13] erfüllt. Der Kern kann sogar lokale Singularitäten besitzen, wie beispielsweise der von $-\Delta + a|x|^{-2}$. Für einen Überblick über Multiplikator-Sätze verweisen auf Duong u. a. [40] und die dort enthaltenen Referenzen.

Satz 8.2.1. *Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$, $0 < c < \alpha$,*

$$j_0 := \max \left\{ 3 \left(\left\lceil \frac{4}{\alpha} \right\rceil + \left\lceil \frac{d}{2\alpha} \right\rceil \right), 2^{\lceil d/(2c) \rceil} \left[\frac{d}{2} \left(1 + \frac{1}{c} \right) + 1 \right] + 1 \right\},$$

$a \geq a_$ sowie $m : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{C}$ eine beschränkte und messbare Funktion, die*

$$|\partial^j m(\lambda)| \lesssim_j \lambda^{-j} \quad \text{für alle } j \in \{0, 1, \dots, j_0\}$$

erfüllt. Falls Annahme 8.1.1 wahr ist, lässt sich $m(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}})$, zunächst über den Spektralsatz in L^2 definiert, eindeutig von einem $L^p(\mathbb{R}^d) \cap L^2(\mathbb{R}^d)$ zu einem L^p -beschränkten Operator für alle $1 < p < \infty$, falls $a \geq 0$ beziehungsweise für alle $r_0 < p < r'_0 := d/\delta$, falls $a < 0$, fortsetzen.

Wir erinnern daran, dass $r_0^{-1} + r'_0{}^{-1} = 1$. Nach dem Beweis stellen wir ein Beispiel vor, welches die Optimalität des Intervalls $r_0 < p < r'_0$ für $a < 0$ zeigt. Insbesondere ist der Wärmeleitungskern $e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}}$ auf L^p unbeschränkt für alle p , die nicht in diesem Intervall enthalten sind. Wir bemerken außerdem, dass die Zahl der hier verlangten Ableitungen sehr wahrscheinlich nicht optimal ist, doch dies spielt hier nicht die Hauptrolle.

Beweis. Falls $a \geq 0$, folgt die Aussage aus dem Hörmander-Multiplikator-Satz D.2.1 beziehungsweise Behauptung D.2.3. Wir betrachten daher im Folgenden nur noch den Fall $a < 0$.

Wegen des Spektralsatzes in L^2 ist der Operator $T := m(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}})$ auf $L^2(\mathbb{R}^d)$ beschränkt. Wegen der Dualität der L^p -Räume und dem Marcinkiewicz-Interpolationssatz (siehe beispielsweise [166, Anhang B]) genügt es zu zeigen, dass T schwach $L^q(\mathbb{R}^d)$ beschränkt ist für alle $r_0 < q < 2$, das heißt

$$|\{x : |Tf(x)| > h\}| \lesssim h^{-q} \|f\|_q^q \quad \text{für alle } h > 0. \quad (8.3)$$

Neben der Tschebyscheff-Ungleichung ist die entscheidende Idee eine Calderón–Zygmund-Zerlegung [166, Kapitel I, §3, Theorem 4] von $|f|^q \in L^1$ auf der Höhe h^q . Dies liefert eine Zerlegung $\mathbb{R}^d = F \cup \Omega$, wobei $F \cap \Omega = \emptyset$, $\Omega = \bigcup_{k=1}^{\infty} Q_k$ und $\{Q_k\}_k$ eine Familie dyadischer Würfel mit Durchmesser $2r_k$ ist, deren Innere disjunkt sind. Weiter ist per Konstruktion

$$|Q_k| \leq \frac{1}{h^q} \int_{Q_k} |f(x)|^q dx \leq 2^d |Q_k| \quad \text{und} \quad |f(x)| \leq h \quad \text{fast überall auf } \left(\bigcup_k Q_k \right)^c. \quad (8.4)$$

Daraus ergeben sich die Abschätzungen

$$\int_{Q_k} |f(x)| dx \lesssim \|f\|_{L^q(Q_k)} |Q_k|^{\frac{1}{q'}} \lesssim h |Q_k| \lesssim h^{1-q} \int_{Q_k} |f(x)|^q dx, \quad (8.5)$$

wobei wir in der ersten Abschätzung die Hölder-Ungleichung und in den letzten beiden Abschätzungen die definierende Eigenschaft der dyadischen Würfel, sprich (8.4), verwendet haben.

Wir zerlegen nun $f = g + b$ und definieren

$$g(x) = \begin{cases} f(x), & \text{für } x \in (\bigcup_k Q_k)^c \\ |Q_k|^{-1} \int_{Q_k} f(x) dx, & \text{für } x \in Q_k \end{cases}, \quad (8.6)$$

das heißt g ist auf jedem Würfel Q_k konstant. Insbesondere ist $|g(x)| \lesssim h$ für fast alle $x \in \mathbb{R}^d$ wegen (8.4) und (8.5). Mit dieser Wahl ist

$$b(x) = \sum_k b_k(x) = \sum_k f(x) \chi_{Q_k}(x) \quad \text{und} \\ \int_{Q_k} b_k(x) dx = 0 \quad \text{für jeden Würfel } Q_k.$$

In unserer Situation ist es natürlich, die Oszillationen der b_k durch die Halbgruppe $e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}$ auszudrücken. Dazu definiert man $\mu := j_0/3 = [4/\alpha] + [d/(2\alpha)]$ und zerlegt weiter $b_k = g_k + \tilde{b}_k$, wobei

$$\tilde{b}_k := (1 - e^{-r_k^\alpha \mathcal{L}_{a,\alpha}})^\mu b_k \quad (8.7a)$$

und

$$g_k := [1 - (1 - e^{-r_k^\alpha \mathcal{L}_{a,\alpha}})^\mu] b_k = \sum_{\nu=1}^{\mu} c_\nu e^{-\nu r_k^\alpha \mathcal{L}_{a,\alpha}} b_k. \quad (8.7b)$$

Die Zahl μ wird nur bei den Abschätzungen, die \tilde{b}_k betreffen, eine Rolle spielen.

Da $f = g + \sum_k g_k + \sum_k \tilde{b}_k$, kann die linke Seite von (8.3) durch

$$|\{x : |Tf(x)| > h\}| \lesssim |\{|Tg| > h/3\}| + |\{|T \sum_k g_k| > h/3\}| + |\{|T \sum_k \tilde{b}_k| > h/3\}|$$

abgeschätzt werden. Mit der Tschebyscheff-Ungleichung, der L^2 -Beschränktheit von T , (8.6) zusammen mit $q < 2$ und $|g(x)| \lesssim h$ ist der Beitrag von g akzeptabel, denn

$$|\{|Tg| > h/3\}| \lesssim h^{-2} \|Tg\|_2^2 \lesssim h^{-2} \|g\|_2^2 \lesssim h^{-q} \|g\|_q^q \leq h^{-q} \|f\|_q^q.$$

Als Nächstes bestimmen wir den Beitrag, der von den g_k kommt. Verwendet man wieder die Tschebyscheff-Ungleichung und die L^2 -Beschränktheit von T , kann man zunächst

$$|\{|T \sum_k g_k| > h/3\}| \lesssim h^{-2} \|T \sum_k g_k\|_2^2 \lesssim h^{-2} \|\sum_k g_k\|_2^2 \quad (8.8)$$

abschätzen. Mit Hilfe der Schranken an den Wärmeleitungskern aus Satz 8.1.6 kann die rechte Seite weiter durch

$$\begin{aligned} \left\| \sum_k g_k \right\|_2^2 &= \sum_{\nu, \nu'} \sum_{k, \ell} (b_k, e^{-(\nu r_k^\alpha + \nu' r_\ell^\alpha) \mathcal{L}_{a,\alpha}} b_\ell) \\ &\lesssim_\mu \sum_{r_k \geq r_\ell} r_k^{-d} \int_{Q_k} dx |b_k(x)| \left(1 \vee \frac{r_k}{|x|}\right)^\delta \\ &\quad \times \int_{Q_\ell} dy \left(1 \vee \frac{r_k}{|y|}\right)^\delta \left(1 \wedge \frac{r_k^{d+\alpha}}{|x-y|^{d+\alpha}}\right) |b_\ell(y)| \end{aligned} \quad (8.9)$$

abgeschätzt werden. Hierbei haben wir die Symmetrie in k und ℓ verwendet, weshalb man nur die Doppelsumme $\sum_{r_k \geq r_\ell}$ betrachten muss. Zusätzlich haben wir das Maximumprinzip verwendet, um den $-\nu' r_\ell^\alpha$ -Term zu vernachlässigen. Aus diesem Grund reicht es auch aus nur den $\nu = 1$ -Term des Wärmeleitungskerns zu betrachten. Darüberhinaus haben wir die endlichen Summen über ν und ν' ausgeführt. Um fortzufahren, fixieren wir zunächst k und $x \in Q_k$ und betrachten zwei Fälle für die Summe über r_ℓ . Im ersten Fall betrachten wir nur die Würfel Q_ℓ , deren Schnitt mit einer am Ursprung zentrierten Kugel mit Radius r_k nicht leer ist, das heißt $Q_\ell \cap B_0(r_k) \neq \emptyset$. Dies impliziert insbesondere $Q_\ell \subseteq B_0(2r_k)$, da $r_\ell \leq r_k$ und die Würfel dyadisch sind. In diesem Fall müssen wir uns nur um

$$\sum_{\ell: Q_\ell \subseteq B_0(2r_k)} \int_{Q_\ell} dy \frac{r_k^\delta}{|y|^\delta} |b_\ell(y)|$$

kümmern. Um diesen Beitrag zu kontrollieren, wenden wir zunächst die Hölder-Ungleichung (sowohl in ℓ als auch in y) an und verwenden dann (8.4), um

$$\begin{aligned} &\sum_{\ell: Q_\ell \subseteq B_0(2r_k)} \int_{Q_\ell} dy \frac{r_k^\delta}{|y|^\delta} |b_\ell(y)| \\ &\lesssim \left[\sum_{\ell: Q_\ell \subseteq B_0(2r_k)} \int_{Q_\ell} dy \frac{r_k^{q'\delta}}{|y|^{q'\delta}} \right]^{1/q'} \left[\sum_{\ell: Q_\ell \subseteq B_0(2r_k)} \int_{Q_\ell} dy |b_\ell(y)|^q \right]^{1/q} \\ &\lesssim r_k^{\frac{d}{q'}} \left[\sum_{\ell: Q_\ell \subseteq B_0(2r_k)} h^q |Q_\ell| \right]^{1/q} \lesssim r_k^{\frac{d}{q'}} r_k^{\frac{d}{q}} \cdot h = h r_k^d \end{aligned} \quad (8.10)$$

zu erhalten, wobei wir $y \mapsto r_k y$ skaliert haben. Hier war es entscheidend, dass $q' < d/\delta$.

Für die Würfel Q_ℓ , deren Schnitt mit der am Ursprung zentrierten Kugel mit Radius r_k schon leer ist, brauchen wir nur

$$\begin{aligned} &\sum_{\ell: Q_\ell \cap B_0(r_k) = \emptyset} \int_{Q_\ell} dy \left(1 \wedge \frac{r_k^{d+\alpha}}{|x-y|^{d+\alpha}}\right) |b_\ell(y)| \\ &\leq \sum_{\ell: r_\ell \leq r_k} \int_{Q_\ell} dy \left(1 \wedge \frac{r_k^{d+\alpha}}{|x-y|^{d+\alpha}}\right) |b_\ell(y)| \end{aligned}$$

zu kontrollieren. Setzt man $1 = |Q_\ell|^{-1} \int_{Q_\ell} dy'$ ein und verwendet die Dreiecksungleichung, um

$$|x - y'|^2 \leq (|x - y| + |y - y'|)^2 \leq 2(|x - y|^2 + 4r_k^2) \quad \text{für alle } y, y' \in Q_\ell$$

abzuschätzen und führt dann das Integral über y aus, so kann dieser Term weiter durch

$$\sum_{\ell: r_\ell \leq r_k} \frac{\|b_\ell\|_1}{|Q_\ell|} \int_{Q_\ell} dy' \left(1 \wedge \frac{r_k^{d+\alpha}}{\left(\frac{1}{2}|x - y'|^2 - 4r_k^2\right)^{\frac{d+\alpha}{2}}} \right) \lesssim hr_k^d \quad (8.11)$$

kontrolliert werden. Hierbei haben wir wieder (8.5) verwendet, um $|Q_\ell|^{-1} \|b_\ell\|_1 \leq h$ zu beschränken. Darüberhinaus haben wir das Integral über Q_ℓ durch eine Konstante mal r_ℓ^d abgeschätzt und die Summe $\sum_{\ell: r_\ell \leq r_k} r_\ell^d$ nach oben durch r_k^d beschränkt.

Setzt man (8.10) und (8.11) zurück in (8.9) ein, folgt

$$\begin{aligned} \left\| \sum_k g_k \right\|_2^2 &\lesssim h \sum_k \int_{Q_k} \left(1 \vee \frac{r_k}{|x|} \right)^\delta |b_k(x)| dx \\ &\lesssim h \left[\sum_k \int_{Q_k} \left(1 \vee \frac{r_k}{|x|} \right)^{\delta q'} dx \right]^{1/q'} \left[\sum_k \int_{Q_k} |b_k(x)|^q dx \right]^{1/q} \\ &\lesssim h \left[\sum_k |Q_k| \right]^{1/q'} \|f\|_q \lesssim h^{2-q} \|f\|_q^q, \end{aligned}$$

wobei wir wieder zuerst die Hölder-Ungleichung und dann (8.4) (wie in Abschätzung (8.10)) verwendet haben, zusammen mit $q/q' + 1 = q$ und $1 - q/q' = 2 - q$. Blickt man auf die Abschätzungen (8.8) zurück, zeigt dies, dass der Beitrag der g_k akzeptabel ist.

Schließlich fokussieren wir uns auf den „schlechten“ Teil \tilde{b}_k . Sei Q_k^* der $2\sqrt{d}$ skalierte Würfel von Q_k , das heißt der kleinste konzentrische Würfel, der eine Kugel mit Radius $2r_k$ beinhaltet. Wegen

$$\left\{ \left| T \sum_k \tilde{b}_k \right| > \frac{h}{3} \right\} \subseteq \bigcup_j Q_j^* \cup \left\{ x \in \mathbb{R}^d \setminus \bigcup_j Q_j^* : \left| T \sum_k \tilde{b}_k \right| > \frac{h}{3} \right\}$$

folgt aus der Tschebyscheff-Ungleichung und (8.4) die Abschätzung

$$\begin{aligned} \left| \left\{ \left| T \sum_k \tilde{b}_k \right| > \frac{h}{3} \right\} \right| &\lesssim \sum_j |Q_j^*| + h^{-1} \sum_k \|T\tilde{b}_k\|_{L^1(\mathbb{R}^d \setminus Q_k^*)} \\ &\lesssim h^{-q} \|f\|_q^q + h^{-1} \sum_k \|T\tilde{b}_k\|_{L^1(\mathbb{R}^d \setminus Q_k^*)}. \end{aligned}$$

Um den Beweis zu schließen, genügt es

$$\|T\tilde{b}_k\|_{L^1(\mathbb{R}^d \setminus Q_k^*)} \lesssim h^{1-q} \|b_k\|_q^q \quad (8.12)$$

zu zeigen. Dazu unterteilen wir $\mathbb{R}^d \setminus Q_k^*$ weiter in dyadische Anuli der Form $R < d(x, Q_k) < 2R$, wobei $r_k \leq R \in 2^{\mathbb{Z}}$. Wir zeigen dann die folgende entscheidende Abschätzung (vergleiche auch mit [102, Formel (4.11)])

$$\left\| T\tilde{b}_k \right\|_{L^2(d(x, Q_k) > R)} \lesssim \left(\frac{r_k}{R} \right)^{\alpha\mu} R^{-d\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{q'}\right)} \|b_k\|_q. \quad (8.13)$$

Aus dieser Abschätzung und (8.5) schließen wir (8.12), da

$$\begin{aligned} \left\| T\tilde{b}_k \right\|_{L^1(\mathbb{R}^d \setminus Q_k^*)} &= \sum_{R \geq r_k} \left\| T\tilde{b}_k \right\|_{L^1(R < d(x, Q_k) \leq 2R)} \\ &\lesssim \sum_{R \geq r_k} R^{\frac{d}{2}} \left\| T\tilde{b}_k \right\|_{L^2(d(x, Q_k) > R)} \\ &\lesssim \sum_{R \geq r_k} R^{\frac{d}{2}} \left(\frac{r_k}{R} \right)^{\alpha\mu} R^{-d\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{q'}\right)} \|b_k\|_q \lesssim r_k^{\frac{d}{q'}} \|b_k\|_q \lesssim h^{1-q} \|b_k\|_q^q. \end{aligned} \quad (8.14)$$

Die letzte Summe konvergiert, da $\alpha\mu > d/q' \in (\delta, d/2)$, was wahr ist, da $\alpha\mu > 4 + d/2 - 2\alpha$ und $\alpha < 2 \wedge d$.

Um (8.13) zu zeigen, schreiben wir

$$(T\tilde{b}_k)(x) = \int_{Q_k} \left[m(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}})(1 - e^{-r_k^\alpha \mathcal{L}_{a,\alpha}})^\mu \right] (x, y) b_k(y) dy.$$

Sei nun $a(\lambda) := m(\lambda)(1 - e^{-r_k^\alpha \lambda^2})^\mu$ (wobei wir λ^2 mit $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ identifizieren), welche wir auf ganz \mathbb{R} als gerade Funktion fortsetzen. Die Abfall-Bedingungen an $\partial^j m(\lambda)$ implizieren

$$|\partial^j a(\lambda)| \lesssim |\lambda|^{-j} (1 \wedge r_k^{\alpha/2} |\lambda|)^{2\mu} \quad \text{für alle } 0 \leq j \leq j_0. \quad (8.15)$$

Sei nun $\varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ so, dass $\text{supp}(\varphi) \subseteq [-1/2^{\alpha/2}, 1/2^{\alpha/2}]$, $\varphi(\tau) = 1$ für $|\tau| < 1/4^{\alpha/2}$ und

$$\check{\varphi}_R(\lambda) := R^{\alpha/2} \check{\varphi}(R^{\alpha/2} \lambda) = \frac{1}{2\pi} \int e^{i\lambda\tau} \varphi\left(\frac{\tau}{R^{\alpha/2}}\right) d\tau.$$

Da sowohl a , als auch φ gerade Funktionen sind, ist

$$a_1(\lambda) := (a * \check{\varphi}_R)(\lambda) = \pi^{-1} \int_0^\infty \cos(\lambda\tau) \hat{a}(\tau) \varphi\left(\frac{\tau}{R^{\alpha/2}}\right) d\tau.$$

Im Gegensatz zum klassischen Hardy-Operator (sprich $\alpha = 2$), hat der Wellenpropagator $\cos(\tau\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}})$ von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ keinen kompakten distributionellen Träger, da der Wärmeleitungskern keine Davies–Gaffney-Abschätzung erfüllt (Coulhon und Sikora [27, Theorem 3.4]). Wäre das der Fall, dann wäre

$$\text{supp}(a_1(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}})\delta_y) \subseteq \bigcup_{\tau \leq (R/2)^{\alpha/2}} \text{supp}(\cos(\sqrt{\tau^2 \mathcal{L}_{a,\alpha}})\delta_y) \subseteq \{z \in \mathbb{R}^d : |y - z| \leq R/2\},$$

da $\varphi(\tau/R^{\alpha/2})$ auf $\{\tau : |\tau| \leq (R/2)^{\alpha/2}\}$ getragen ist. Das bedeutet aber

$$\|a_1(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}})\tilde{b}_k\|_{L^1(\mathbb{R}^d \setminus Q_k^*)} = 0$$

und die linke Seite von (8.12) würde verschwinden. Da der Wellenpropagator jedoch keinen kompakten distributionellen Träger hat, muss zudem

$$\|a_1 b_k\|_{L^1(R < d(x, Q_k) < 2R)} \lesssim \left(\frac{r_k}{R}\right)^\beta r_k^{d/q'} \|b_k\|_q \quad (8.16)$$

für ein $\beta > 0$ erfüllt sein. Dies ist gerade die Aussage von Annahme 8.1.1.

Für den Rest des Beweises konzentrieren wir uns auf den verbleibenden Teil des Multiplikators a , nämlich

$$a_2(\lambda) := a_1(\lambda) - a(\lambda) = \int [a(\theta) - a(\lambda)] \check{\varphi}_R(\lambda - \theta) d\theta.$$

Falls $|\lambda| \leq R^{-\alpha/2}$, verwenden wir (8.15) und den schnellen Abfall von $\check{\varphi}$ und erhalten

$$\left| \int a(\lambda) \check{\varphi}_R(\lambda - \theta) d\theta \right| \lesssim (1 \wedge r_k^{\alpha/2} |\lambda|)^{2\mu} \lesssim (1 \wedge r_k^{\alpha/2} |\lambda|)^{2\mu} (|\lambda| R^{\alpha/2})^{-2\mu}$$

sowie

$$\left| \int a(\theta) \check{\varphi}_R(\lambda - \theta) d\theta \right| \lesssim (1 \wedge r_k^{\alpha/2} |\lambda|)^{2\mu} (|\lambda| R^{\alpha/2})^{-2\mu}. \quad (8.17)$$

Daher ist

$$|a_2(\lambda)| \lesssim (1 \wedge r_k^{\alpha/2} |\lambda|)^{2\mu} (|\lambda| R^{\alpha/2})^{-2\mu}, \quad \text{falls } |\lambda| \leq R^{-\alpha/2}. \quad (8.18)$$

Für $|\lambda| \geq R^{-\alpha/2}$ entwickeln wir $a(\theta)$ in einer Taylor-Reihe bis zur Ordnung $j_0 - 1$ und definieren

$$a(\theta) - a(\lambda) = P_{j_0}(\theta) + \mathcal{E}(\theta), \quad \text{wobei } P_{j_0}(\theta) = \sum_{\ell=1}^{j_0-1} \frac{a^{(\ell)}(\lambda)}{\ell!} (\theta - \lambda)^\ell$$

und \mathcal{E} den Fehler bezeichnet, welchen wir mittels (8.15) durch

$$|\mathcal{E}(\theta)| \leq |a(\theta)| + |a(\lambda)| + |P_{j_0}(\theta)| \lesssim (1 \wedge r_k^{\alpha/2} |\lambda|)^{2\mu} \left| \frac{\theta - \lambda}{\lambda} \right|^{j_0}, \quad \text{falls } |\theta - \lambda| > \frac{\lambda}{2}$$

(mit $2\mu \leq j_0$), beziehungsweise

$$|\mathcal{E}(\theta)| \leq \left\| a^{(j_0)} \right\|_{L^\infty\left(\left[\frac{\lambda}{2}, \frac{3\lambda}{2}\right]\right)} |\theta - \lambda|^{j_0} \lesssim (1 \wedge r_k^{\alpha/2} |\lambda|)^{2\mu} \left| \frac{\theta - \lambda}{\lambda} \right|^{j_0}, \quad \text{falls } |\theta - \lambda| \leq \frac{\lambda}{2}$$

abschätzen.

Für alle $\ell \geq 1$ gilt

$$\int (\theta - \lambda)^\ell \check{\varphi}_R(\theta - \lambda) d\theta = \left(\partial^\ell \varphi_R \right) (0) = 0.$$

Daher trägt $P_{j_0}(\theta)$ nicht zur $a_2(\lambda)$ definierenden Faltung bei, weshalb

$$|a_2(\lambda)| \lesssim \int |\mathcal{E}(\theta)| |\check{\varphi}_R(\lambda - \theta)| d\theta \lesssim (1 \wedge r_k^{\alpha/2} |\lambda|)^{2\mu} (|\lambda| R^{\alpha/2})^{-j_0} \quad \text{für } |\lambda| \geq R^{-\alpha/2}. \quad (8.19)$$

Kombiniert man (8.18) und (8.19) mit $R > r_k$, schließen wir, dass

$$\begin{aligned} |a_2(\lambda)| &\lesssim \left(\frac{1 \wedge r_k^{\alpha/2} |\lambda|}{|\lambda| R^{\alpha/2}} \right)^{2\mu} (1 + R^\alpha \lambda^2)^{\frac{2\mu - j_0}{2}} \\ &\lesssim \left(\frac{r_k}{R} \right)^{\alpha\mu} \int_0^\infty \left(\frac{t}{R^\alpha} \right)^{\frac{j_0 - 2\mu}{2}} e^{-t/R^\alpha} e^{-t\lambda^2} \frac{dt}{t}, \end{aligned}$$

wobei wir $(1+x)^{-s} = \int_0^\infty t^{s-1} e^{-t(1+x)} dt$ für $s > 0$ verwendet haben. Damit und mit dem Spektralsatz sowie anschließender Anwendung der Minkowski-Ungleichung, erhalten wir

$$\|a_2(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}})b_k\|_2 \lesssim \left(\frac{r_k}{R} \right)^{\alpha\mu} \int_0^\infty \left(\frac{t}{R^\alpha} \right)^{\frac{j_0 - 2\mu}{2}} e^{-t/R^\alpha} \|e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}} b_k\|_2 \frac{dt}{t}. \quad (8.20)$$

Um (8.13) zu zeigen, beweisen wir

$$\|e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}} b_k\|_2 \lesssim t^{-\frac{d}{2\alpha}} (t + r_k^\alpha)^{\frac{d}{\alpha q'}} \|b_k\|_q. \quad (8.21)$$

Mit dieser Abschätzung können wir (8.20) weiter durch

$$\begin{aligned} &\|a_2(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}})b_k\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \\ &\lesssim \left(\frac{r_k}{R} \right)^{\alpha\mu} R^{-d\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{q'}\right)} \|b_k\|_{L^q} \int_0^\infty \left(\frac{t}{R^\alpha} \right)^{\frac{j_0 - 2\mu}{2} - \frac{d}{2\alpha}} \left(1 + \frac{t}{R^\alpha} \right)^{\frac{d}{\alpha q'}} e^{-t/R^\alpha} \frac{dt}{t} \\ &\lesssim \left(\frac{r_k}{R} \right)^{\alpha\mu} R^{-d\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{q'}\right)} \|b_k\|_{L^q} \end{aligned}$$

für alle $R \geq r_k$ beschränken. Hierbei haben wir $(j_0 - 2\mu)/2 - d/(2\alpha) > 0$ verwendet. Abgesehen vom Beweis von (8.21) schließt das den Beweis von (8.13) und damit auch den Beweis des Satzes.

Mit Hilfe der Schranken an den Wärmeleitungskern aus Satz 8.1.6 reduziert sich der Beweis von (8.21) darauf, die Abschätzung

$$t^{-\frac{d}{\alpha}} \left\| \int_{\mathbb{R}^d} \left(1 \vee \frac{t^{\frac{1}{\alpha}}}{|x|} \right)^\delta \left(1 \vee \frac{t^{\frac{1}{\alpha}}}{|y|} \right)^\delta \left(1 \wedge \frac{t^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|x-y|^{d+\alpha}} \right) b_k(y) \right\|_2 \lesssim t^{-\frac{d}{2\alpha}} (t + r_k^\alpha)^{\frac{d}{\alpha q'}} \|b_k\|_q \quad (8.22)$$

zu zeigen. Um diese Schranke zu beweisen, unterscheiden wir die vier Fälle

- $|x|, |y| \leq t^{1/\alpha}$,
- $|x| \leq t^{1/\alpha}, |y| > t^{1/\alpha}$,
- $|x| > t^{1/\alpha}, |y| \leq t^{1/\alpha}$ und
- $|x|, |y| \geq t^{1/\alpha}$.

Die Schranken in den ersten drei Fällen werden später im Beweis der Bernstein-Ungleichungen in größerer Allgemeinheit bewiesen werden, siehe (8.24). Die Schranke ist durch (man ersetze N^α durch t^{-1} , q durch 2 und p durch q)

$$t^{-\frac{d}{\alpha}\left(\frac{1}{q} - \frac{1}{2}\right)} \|b_k\|_q = t^{-\frac{d}{2\alpha} + \frac{d}{\alpha q'}} \|b_k\|_q$$

gegeben. Der letzte Fall, sprich $|x|, |y| \geq t^{1/\alpha}$, führt auf die behauptete r_k -Abhängigkeit. Mit der Minkowski- und der Hölder-Ungleichung erhält man

$$\begin{aligned} \left\| \int_{|y| \geq t^{\frac{1}{\alpha}}} \left(1 \wedge \frac{t^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|x-y|^{d+\alpha}} \right) b_k(y) dy \right\|_2 &\lesssim \int_{\mathbb{R}^d} |b_k(y)| \left\| \left(1 \wedge \frac{t^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|x|^{d+\alpha}} \right) \right\|_2 \\ &\lesssim t^{\frac{d}{2\alpha}} \|b_k\|_1 \lesssim t^{\frac{d}{2\alpha}} r_k^{\frac{d}{q'}} \|b_k\|_q. \end{aligned}$$

Dies schließt den Beweis des Mikhlin-Multiplikator-Theorems für $\mathcal{L}_{a,\alpha}$. \square

Bemerkung 8.2.2. (1) Wir schließen den Beweis mit der Bemerkung, dass das Intervall der erlaubten p tatsächlich optimal ist, selbst, wenn man $|\partial^j m(\lambda)| \lesssim_j |\lambda|^{-j}$ für alle $j \geq 0$ annimmt. Wegen Selbstadjungiertheit und Dualität genügt es, das Fehlschlagen für $p \geq d/\delta$ mit $\delta > 0$ zu zeigen. Sei dazu beispielsweise $m(\lambda) := e^{-\lambda^2}$ und $\varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ in der Einheitskugel $B_0(1)$ getragen, sodass $\varphi(x) = 1$ für $|x| \leq 1/2$. Aus der unteren Schranke an den Wärmeleitungskern folgt dann für $|x| \leq 1$

$$[m(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}})\varphi](x) = [e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}}\varphi](x) \gtrsim |x|^{-\delta} \int_{|y| \leq 1/2} dy |y|^{-\delta} \left(1 \wedge \frac{1}{|x-y|^{d+\alpha}} \right) \gtrsim |x|^{-\delta}$$

ist, wobei wir die untere Schranke des Wärmeleitungskerns aus Satz 8.1.6 verwendet haben. Somit ist $m(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}})\varphi \notin L^p(\mathbb{R}^d)$ für alle $p \geq d/\delta$.

(2) Neben der L^2 -Beschränktheit, die im Wesentlichen aus Bedingungen der Art

$$\sup_x \int_{\mathbb{R}^d} dy |K(x, y)| \lesssim 1$$

folgt, ist eine Glattheitsbedingung der Form

$$\sup_{y, z \in \mathbb{R}^d} \int_{|x-y| > 2|y-z|} |K(x-y) - K(x-z)| dx < \infty, \quad (8.23)$$

welche für die schwache L^q -Beschränktheit benötigt wird, um mit Interpolation die L^p -Beschränktheit singulärer Integraloperatoren zu folgern, entscheidend (siehe beispielsweise [56, 166, 186, 84, 39]). Wir bemerken, dass diese Bedingung beispielsweise erfüllt ist, wenn K außerhalb des Ursprungs stetig differenzierbar ist und $|\nabla K(x)| \lesssim |x|^{-n-1}$ gilt. Der wesentliche Inhalt dieser Aussage ist, dass $K * \psi$ in L^1 außerhalb des Trägers von ψ ist, wobei ψ eine beliebige kompakt getragene Funktion ist, deren Mittelwert Null ist. Insbesondere ist (vergleiche mit (8.12))

$$\int_{d(x, \text{supp } \psi) \geq 2 \text{diam}(\text{supp } \psi)} |(K * \psi)(x)| dx < \infty.$$

Die Glattheitsbedingung (8.23) entspricht dann der Wahl $\psi(w) = \delta(w-y) - \delta(w-z)$.

Im Beweis haben wir gesehen, dass die größte Schwierigkeit darin besteht, den „schlechten Teil“ b_k der Calderón–Zygmund-Zerlegung zu kontrollieren. Obwohl b_k im Vergleich zur fixierten Höhe h beliebig groß sein kann, oszilliert die Funktion, ihr Träger ist vergleichsweise klein und besitzt eine konkrete Struktur. Mit dieser Struktur meinen wir Ungleichungen wie

(8.4) und (8.5), die von der Höhe der Calderón–Zygmund-Zerlegung abhängen. Fefferman [56, Theorem 2' und 3] beobachtete bereits, dass es sinnvoll ist, b_k an den in Frage stehenden Kern anzupassen. Im euklidischen Fall wäre beispielsweise

$$\psi = (1 - \exp(-r^\alpha |p|^\alpha)) \delta_y$$

eine kanonische Wahl, da ψ „moralisch“ auf der Kugel $\{|x - y| \leq r\}$ getragen ist und verschwindenden Mittelwert hat, sprich $\int \psi = 0$. Natürlich ist diese Aussage über den Träger sehr vage, selbst, wenn $\alpha = 2$. In jedem Fall motivieren diese Überlegungen die Wahl der b_k , sprich (8.7a).

(3) Die Idee, Schranken des Wärmeleitungskerns zu verwenden, um Multiplikator-Sätze für Schrödinger-Operatoren $-\Delta + V$ herzuleiten, geht zumindest auf Hebisch [84] zurück. Er bewies einen Hörmander-Multiplikator-Satz für beliebige Potentiale $V \geq 0$ unter Verwendung des Maximumprinzips und der expliziten Schranken des Wärmeleitungskerns von $-\Delta$. Hier ist es entscheidend, dass der Kern exponentiell schnell abfällt.

Später gelang es ihm Multiplikator-Sätze für Operatoren zu zeigen, deren Wärmeleitungskerne nicht mehr exponentiell abfallen, aber eine gewisse Hölder-Bedingung erfüllen.

Konkret bewies er folgende Aussage. Ist A ein nicht-negativer, selbstadjungierter Operator und es existieren positive Zahlen c, b, m , sodass für alle $t > 0$ die Schranken

$$\begin{aligned} \sup_{y \in \mathbb{R}^d} \int |e^{-tA}(x, y)| (1 + t^{-1/m} |x - y|)^c dx &< \infty, \\ \sup_{y \in \mathbb{R}^d} t^{d/m} \int |e^{-tA}(x, y)|^2 dx &< \infty \quad \text{und} \\ \int_{\mathbb{R}^d} |e^{-tA}(x, y) - e^{-tA}(x, z)| dx &\lesssim t^{-b/m} |y - z|^b \quad \text{für alle } y, z \in \mathbb{R}^d \end{aligned}$$

wahr sind, dann erfüllt A ein Hörmander-Multiplikator-Theorem [85, Theorem 3.1]. Das heißt für $F \in H_{\text{loc}}^s(\mathbb{R})$ mit

$$s > 2^{\lfloor d/(2c) \rfloor} \left[\frac{d}{2} \left(1 + \frac{1}{c} \right) + 1 \right] + \frac{1}{2}$$

und einem $0 \neq \varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$, sodass $\sup_{t>0} \|\varphi F(t)\|_{H^s} < \infty$, ist $F(A)$ schwach L^1 -beschränkt und L^p -beschränkt für alle $p \in (1, \infty)$. In Anhang D.2 zeigen wir, aufbauend auf diesem Satz, wie man einen Hörmander-Multiplikator-Satz (siehe Satz D.2.1 und Behauptung D.2.3) für $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ mit $a \geq 0$ zeigen kann. Dazu zeigen wir zuerst, dass $|p|^\alpha$ in \mathbb{R}^d mit $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$ die obigen drei Bedingungen erfüllt. Im Anschluß verwenden wir Störungstheorie in Form der Duhamel-Formel (7.16), um den Fall $a > 0$ zu behandeln. Die punktweisen Schranken für $\exp(-\mathcal{L}_{a,\alpha})(x, y)$ mit $a > 0$ sind entscheidend, um den Beweis zu schließen.

In Lemma 8.3.2 des nächsten Abschnitts zeigen wir die L^p -Beschränktheit des Wärmeleitungskerns für alle $a \geq a_*$ ohne auf ein abstraktes Multiplikator-Theorem zurückgreifen zu müssen. Diese folgt im Wesentlichen direkt aus den Schranken des Kerns $\exp(-t\mathcal{L}_{a,\alpha})(x, y)$.

8.3 Littlewood–Paley–Theorie

In diesem Abschnitt definieren wir zwei Familien von Littlewood–Paley-Projektionen und verwenden den Spektralmultiplikator-Satz, um ihre L^p -Beschränktheit zu folgern. Darüberhinaus

beweisen wir Bernstein-Abschätzungen, eine durch Eigenfunktionen von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ ausgedrückte Zerlegung der Eins in $L^p(\mathbb{R}^d)$ sowie die entscheidenden Abschätzungen an (LP)-Funktionen. Letztere ersetzen den im letzten Kapitel oft verwendeten Spektralsatz, um die L^p -Normen von $|p|^{\alpha s/2} f$ und $\mathcal{L}_{a,\alpha}^{s/2} f$ auszudrücken und miteinander vergleichen zu können. Im Allgemeinen sind (LP)-Funktionen nützlich, um beispielsweise die Orthogonalität von Fouriertransformationen – beziehungsweise hier Entwicklungen von Funktionen durch Eigenfunktionen von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ – in L^p oder anderen Funktionenräumen auszudrücken und zu quantifizieren.

Definition 8.3.1 (Littlewood–Paley-Projektionen). Sei $\Phi : [0, \infty) \rightarrow [0, 1]$ eine glatte, kompakt getragene Funktion, sodass

$$\Phi(\lambda) = 1 \text{ für } 0 \leq \lambda \leq 1 \quad \text{und} \quad \Phi(\lambda) = 0 \text{ für } \lambda \geq 2.$$

Für dyadische Zahlen $N \in 2^{\mathbb{Z}}$ definieren wir

$$\Phi_N(\lambda) = \Phi(\lambda/N^{\alpha/2}) \quad \text{und} \quad \Psi_N(\lambda) = \Phi_N(\lambda) - \Phi_{N/2}(\lambda) \in C_c^\infty(\mathbb{R}_+).$$

Offenbar bildet $\{\Psi_N(\lambda)\}_{N \in 2^{\mathbb{Z}}}$ eine Zerlegung der Eins für $\lambda \in \mathbb{R}_+$. Wir definieren die gewöhnlichen Littlewood–Paley-Projektionen durch

$$\tilde{P}_N^{a,\alpha} := \Psi_N(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}}) \quad \text{und} \quad \tilde{P}_N^\alpha := \tilde{P}_N^{0,\alpha}.$$

Daneben definieren wir eine weitere Familie von Littlewood–Paley-Projektionen durch den Wärmeleitungskern, nämlich

$$P_N^{a,\alpha} := e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}/N^\alpha} - e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}/(N^\alpha/2^\alpha)} \quad \text{und} \quad P_N^\alpha := P_N^{0,\alpha}.$$

Als Nächstes leiten wir Bernstein-Ungleichungen für diese Projektionen her. Diese sind besonders nützlich, wenn der Spektralparameter λ lokalisiert ist, da niedrige Lebesgue-Integrierbarkeit auf Kosten gewisser Potenzen von N zu hoher Lebesgue-Integrierbarkeit verbessert werden kann. Für kleine Energien sind diese „Kosten“ tatsächlich nützlich und verbessern die Ungleichung.

Lemma 8.3.2 (Bernstein-Abschätzungen). Sei $1 < p \leq q < \infty$, wenn $a \geq 0$ beziehungsweise $d/(d-\delta) < p \leq q < d/\delta$, falls $0 > a \geq a_*$. Dann gelten die folgenden Aussagen.

(1) Die Projektionen $P_N^{a,\alpha}$ und, wenn Annahme 8.1.1 erfüllt ist, $\tilde{P}_N^{a,\alpha}$ sind auf $L^p(\mathbb{R}^d)$ beschränkt.

(2) Falls Annahme 8.1.1 erfüllt ist, gilt $\|(\mathcal{L}_{a,\alpha}/N^\alpha)^{\frac{s}{2}} \tilde{P}_N^{a,\alpha} f\|_p \sim \|\tilde{P}_N^{a,\alpha} f\|_p$, das heißt

$$N^{\alpha s/2} \|\tilde{P}_N^{a,\alpha} f\|_p \sim \|\mathcal{L}_{a,\alpha}^{\frac{s}{2}} \tilde{P}_N^{a,\alpha} f\|_p$$

für alle $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ und alle $s \in \mathbb{R}$.

(3) Die Projektionen $P_N^{a,\alpha}$ und, wenn Annahme 8.1.1 erfüllt ist, $\tilde{P}_N^{a,\alpha}$ sind von L^p nach L^q beschränkt mit Norm $\mathcal{O}(N^{d(\frac{1}{p}-\frac{1}{q})})$.

Beweis. Die erste Behauptung für $\tilde{P}_N^{a,\alpha}$ folgt aus Satz 8.2.1. Für $P_N^{a,\alpha}$ folgt sie auch direkt aus der dritten Behauptung mit $p = q$. Die zweite Behauptung folgt ebenfalls unmittelbar aus Satz 8.2.1.

Wir zeigen nun die dritte Behauptung. Man bemerkt zunächst, dass $\tilde{P}_N^{a,\alpha}$ mit Satz 8.2.1 als Produkt von L^p -beschränkten Multiplikatoren geschrieben werden kann. Für $r \in (p, q)$ ist in der Tat

$$\begin{aligned} \|\tilde{P}_N^{a,\alpha} f\|_{L^q} &\leq \|e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}/N^\alpha}\|_{L^r \rightarrow L^q} \|e^{\mathcal{L}_{a,\alpha}/N^\alpha} \tilde{P}_N^{a,\alpha} e^{\mathcal{L}_{a,\alpha}/N^\alpha}\|_{L^r \rightarrow L^r} \|e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}/N^\alpha}\|_{L^p \rightarrow L^r} \|f\|_{L^p} \\ &\lesssim N^{d(1/p-1/r+1/r-1/q)} \|f\|_{L^p}. \end{aligned}$$

Daher genügt es, die Behauptung für $e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}/N^\alpha}$ zu zeigen. Für $a \geq 0$ genügt es wegen des Maximumprinzips, die $L^p \rightarrow L^q$ -Norm von $e^{-|p|^\alpha/N^\alpha}$ zu bestimmen. Mit der der Substitution $x \mapsto N^{-1}x$ und der Youngschen Ungleichung mit $r = (1 + 1/q - 1/p)^{-1} \geq 1$ gilt

$$\|e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}/N^\alpha} f\|_q \lesssim N^d \|1 \wedge \frac{N^{-\alpha-d}}{|x|^{d+\alpha}}\|_r \|f\|_p \lesssim N^{d(\frac{1}{p}-\frac{1}{q})} \|f\|_p.$$

Für $0 > a \geq a_*$ verwenden wir die Schranken an $e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}}$ aus Satz 8.1.6 und schätzen

$$\begin{aligned} &\left\| e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}/N^\alpha} f \right\|_q \\ &\lesssim N^d \left\| \left(1 \vee \frac{N^{-1}}{|x|} \right)^\delta \int_{\mathbb{R}^d} \left(1 \vee \frac{N^{-1}}{|y|} \right)^\delta \left(1 \wedge \frac{N^{-\alpha-d}}{|x-y|^{d+\alpha}} \right) |f(y)| \, dy \right\|_q \end{aligned} \quad (8.24)$$

ab. Um die rechte Seite weiter zu beschränken, unterscheiden wir zwischen vier Fällen.

Fall 1: $|x| \leq N^{-1}$, $|y| \leq N^{-1}$.

Mit der Hölder-Ungleichung, $d/(d-\delta) < p \leq q < d/\delta$ sowie $\delta \leq (d-\alpha)/2$, kann die rechte Seite von (8.24) durch

$$\begin{aligned} &N^{d-2\delta} \left\| |x|^{-\delta} \int_{|y| \leq N^{-1}} |y|^{-\delta} |f(y)| \, dy \right\|_{L^q(|x| \leq N^{-1})} \\ &\lesssim N^{d-2\delta} \left\| |x|^{-\delta} \right\|_{L^q(|x| \leq N^{-1})} \left\| |y|^{-\delta} \right\|_{L^{p'}(|y| \leq N^{-1})} \|f\|_p \lesssim N^{d(\frac{1}{p}-\frac{1}{q})} \|f\|_p \end{aligned} \quad (8.25a)$$

abgeschätzt werden, wobei wir $(x, y) \mapsto (N^{-1}x, N^{-1}y)$ skaliert haben.

Fall 2: $|x| \leq N^{-1}$, $|y| > N^{-1}$.

Die rechte Seite von (8.24) kann wieder mit der Hölder-Ungleichung durch

$$\begin{aligned} &N^{d-\delta} \left\| |x|^{-\delta} \int_{\mathbb{R}^d} \left(1 \wedge \frac{N^{-\alpha-d}}{|x-y|^{d+\alpha}} \right) |f(y)| \, dy \right\|_{L^q(|x| \leq N^{-1})} \\ &\lesssim N^{d-\delta} \left\| |x|^{-\delta} \right\|_{L^q(|x| \leq N^{-1})} \left\| \left(1 \wedge \frac{N^{-\alpha-d}}{|y|^{d+\alpha}} \right) \right\|_{L^{p'}} \|f\|_p \lesssim N^{d(\frac{1}{p}-\frac{1}{q})} \|f\|_p \end{aligned} \quad (8.25b)$$

abgeschätzt werden.

Fall 3: $|x| > N^{-1}$, $|y| \leq N^{-1}$.

Mit der Minkowski- und der Hölder-Ungleichung kann (8.24) durch

$$\begin{aligned} & N^{d-\delta} \left\| \int_{|y| \leq N^{-1}} |y|^{-\delta} \left(1 \wedge \frac{N^{-\alpha-d}}{|x-y|^{d+\alpha}} \right) |f(y)| dy \right\|_q \\ & \lesssim N^{d-\delta} \left\| \left(1 \wedge \frac{N^{-\alpha-d}}{|x|^{d+\alpha}} \right) \right\|_q \left\| |y|^{-\delta} \right\|_{L^{p'}(|y| \leq N^{-1})} \|f\|_p \lesssim N^{d\left(\frac{1}{p}-\frac{1}{q}\right)} \|f\|_p \end{aligned} \quad (8.25c)$$

beschränkt werden.

Fall 4: $|x| > N^{-1}$, $|y| > N^{-1}$.

Wie im Fall $a \geq 0$ verwenden wir die Young-Ungleichung, um den letzten Beitrag auf der rechten Seite von (8.24) durch

$$\begin{aligned} & N^d \left\| \int_{\mathbb{R}^d} \left(1 \wedge \frac{N^{-\alpha-d}}{|x-y|^{d+\alpha}} \right) |f(y)| dy \right\|_q \\ & \lesssim N^d \left\| \left(1 \wedge \frac{N^{-\alpha-d}}{|x|^{d+\alpha}} \right) \right\|_r \|f\|_p \lesssim N^{d\left(\frac{1}{p}-\frac{1}{q}\right)} \|f\|_p \end{aligned} \quad (8.25d)$$

abzuschätzen, wobei wir $1 + 1/q = 1/r + 1/p$ verwendet haben. \square

Aus der L^p -Beschränktheit der (LP)-Projektionen folgt unmittelbar die folgende Entwicklung von L^p -Funktionen.

Lemma 8.3.3 (Entwicklung der Identität). *Sei $1 < p < \infty$, falls $a \geq 0$ und $d/(d-\delta) < p < d/\delta$, falls $a \in [a_*, 0)$. Dann gilt für alle $f \in L^p(\mathbb{R}^d)$*

$$f(x) = \sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} [P_N^{a,\alpha} f](x)$$

und, falls Annahme 8.1.1 erfüllt ist, außerdem

$$f(x) = \sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} [\tilde{P}_N^{a,\alpha} f](x)$$

als Elemente aus $L^p(\mathbb{R}^d)$. Insbesondere konvergieren die Summen in $L^p(\mathbb{R}^d)$.

Beweis. Die Konvergenz in L^2 folgt aus dem Spektralsatz und der Tatsache, dass Null kein Eigenwert von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ ist (siehe auch [64, Proposition 4.1]) und ist aus der Gleichheit

$$\|f - \sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} P_N^{a,\alpha} f\|_2^2 = \int \left(1 - \sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} P_N^{a,\alpha}(\lambda) \right)^2 d(f, E_{\mathcal{L}_{a,\alpha}} f)(\lambda)$$

ersichtlich. Hierbei bezeichnet $dE_{\mathcal{L}_{a,\alpha}}$ das Spektralmaß von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$. Wäre Null ein Eigenwert mit zugehöriger Eigenfunktion f , wäre die rechte Seite der Gleichheit in der Aussage des Lemmas

Null (was aus den Definitionen von $P_N^{a,\alpha}$ und $\tilde{P}_N^{a,\alpha}$ ersichtlich ist), wohingegen die linke Seite von Null verschieden ist.

Für $p \neq 2$ garantieren Lemma 8.3.2 beziehungsweise Satz 8.2.1, dass Partialsummen für alle p in der Behauptung L^p -beschränkt sind. Wegen Dichtheit von C_c^∞ in L^p , genügt es daher die Konvergenz für $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ zu zeigen. Für solche f folgt die Konvergenz in L^p aus der Konvergenz in L^2 und der Beschränktheit in L^p für alle erlaubten p mit der Hölder-Ungleichung. \square

Satz 8.3.4 (Abschätzungen der (LP)-Funktionen). *Fixiere $s > 0$ und sei $1 < p < \infty$, falls $a \geq 0$ und $d/(d - \delta) < p < d/\delta$, falls $a \in [a_*, 0)$. Sei $k \in \mathbb{N}$ so, dass $2k > s$. Falls Annahme 8.1.1 erfüllt ist, gilt*

$$\left\| \left(\sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} |N^{\alpha s/2} \tilde{P}_N^{a,\alpha} f|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right\|_p \sim \left\| \mathcal{L}_{a,\alpha}^{\frac{s}{2}} f \right\|_p \sim \left\| \left(\sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} |N^{\alpha s/2} (P_N^{a,\alpha})^k f|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right\|_p$$

für alle $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$.

Wir bemerken, dass die Funktion $\lambda \mapsto e^{-\lambda^2/N^\alpha} - e^{-\lambda^2/(N^\alpha/2^\alpha)}$ (welche $P_N^{a,\alpha}$ definiert) nur zur zweiten Ordnung bei $\lambda = 0$ verschwindet. Die Einschränkung $2k > s$ garantiert, dass $N^{\alpha s/2} \mathcal{L}_{a,\alpha}^{-s/2} (P_N^{a,\alpha})^k$ tatsächlich ein Mikhlin-Multiplikator ist. Da wir die Abschätzungen jedoch nur für $s \in (0, 2)$ benötigen, können wir später ohne Beschränkung $k = 1$ wählen.

Der Beweis verläuft mit Hilfe des Mikhlin-Multiplikator-Satzes für $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ wie in [166, Kapitel IV, §5] im euklidischen Fall mit nur geringfügigen Modifikationen, siehe auch [105, Theorem 4.3].

Beweis. Für $g = \mathcal{L}_{a,\alpha}^{s/2} f$ genügt es

$$\|g\|_p \sim \|\tilde{S}(g)\|_p, \quad \text{wobei } \tilde{S}(g) := \left(\sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} |N^{\alpha s/2} \tilde{P}_N^{a,\alpha} \mathcal{L}_{a,\alpha}^{-s/2} g|^2 \right)^{1/2}$$

beziehungsweise

$$\|g\|_p \sim \|S(g)\|_p, \quad \text{wobei } S(g) := \left(\sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} |N^{\alpha s/2} (P_N^{a,\alpha})^k \mathcal{L}_{a,\alpha}^{-s/2} g|^2 \right)^{1/2}$$

zu zeigen. Wir bemerken zunächst, dass g tatsächlich in L^p ist. Um dies zu sehen, führen wir

$$\tilde{P}_{\leq N}^{a,\alpha} := \Phi_N(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}}) \quad \text{und} \quad \tilde{P}_{> N}^{a,\alpha} := 1 - \tilde{P}_{\leq N}^{a,\alpha}$$

ein und bemerken, dass diese Operatoren wegen Satz 8.2.1 L^p -beschränkt sind. Schreibt man dann

$$g = \mathcal{L}_{a,\alpha}^{s/2} \tilde{P}_{\leq 1}^{a,\alpha} f + \mathcal{L}_{a,\alpha}^{s/2-k} \tilde{P}_{> 1}^{a,\alpha} \left(\mathcal{L}_{a,\alpha}^k f \right)$$

und verwendet nochmals Satz 8.2.1, sieht man, dass $g \in L^p(\mathbb{R}^d)$.

Wir zeigen nun $\|S(g)\|_p \lesssim \|g\|_p$. Dazu beobachten wir zuerst, dass

$$N^{\alpha s/2} (P_N^{a,\alpha})^k \mathcal{L}_{a,\alpha}^{-s/2} = m \left(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}} / N^{\alpha/2} \right) \quad \text{mit } m(\lambda) := \lambda^{-s} e^{-k\lambda^2} \left(1 - e^{-(2^\alpha - 1)\lambda^2} \right)^k \quad (8.26)$$

gilt und $m(\lambda)$ die Bedingungen aus Satz 8.2.1 erfüllt. Insbesondere gilt die Abschätzung $|\lambda^j \partial^j m(\lambda)| \lesssim_j \lambda^{2k-s} e^{-k\lambda^2}$ für alle $j \in \mathbb{N}_0$. Sei nun ε_N eine Folge statistisch unabhängiger und identisch verteilter Zufallsvariablen mit $P(\varepsilon_N = \pm 1) = 1/2$ für alle $N \in 2^{\mathbb{Z}}$, sprich ε_N ist eine Folge mit Rademacher-Verteilung. Dann erfüllt der Multiplikator

$$m_\varepsilon(\lambda) := \sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} \varepsilon_N m(\lambda/N^{\alpha/2})$$

$|\lambda^j \partial^j m_\varepsilon(\lambda)| \lesssim_j 1$ gleichmäßig in der Wahl der Vorzeichen $\{\varepsilon_N\} \subseteq \{\pm 1\}$. Die Summierbarkeit beruht dabei auf der Einschränkung $2k > s$. Mit der Chintschin-Ungleichung (\mathbb{E} bezeichnet den Erwartungswert)

$$\|(\sum_N |g_N|^2)^{1/2}\|_{L^p(\mathbb{R}^d)}^p \sim \int_{\mathbb{R}^d} \mathbb{E}\{|\sum_N \varepsilon_N g_N(x)|^p\} dx$$

(siehe beispielsweise [166, Kapitel IV, §5, Formel (44) und Anhang D]), der Identifikation $g_N = m(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}}/N^{\alpha/2})g$, dem Satz von Fubini und Satz 8.2.1, erhalten wir

$$\int_{\mathbb{R}^d} |S(g)(x)|^p dx \sim \int_{\mathbb{R}^d} \mathbb{E}\{|(m_\varepsilon g)(x)|^p\} dx = \mathbb{E}\|m_\varepsilon g\|_p^p \lesssim \|g\|_p^p,$$

das heißt $\|S(g)\|_p \lesssim \|g\|_p$.

Die umgekehrte Ungleichung $\|g\|_p \lesssim \|S(g)\|_p$ folgt aus der gerade bewiesenen Ungleichung mittels Dualität. Dazu definieren wir

$$\tilde{m}(\lambda) := \left(\sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} m(\lambda/N^{\alpha/2})^2 \right)^{-1}$$

mit demselben $m(\lambda)$ wie in (8.26). Man stellt wieder fest, dass $\tilde{m}(\lambda)$ die Bedingungen aus Satz 8.2.1 erfüllt und daher einen L^p -beschränkten Operator definiert. Mit der Cauchy-Schwarz-Ungleichung in N , der L^p -Beschränktheit von S und \tilde{m} erhält man

$$\begin{aligned} |(g, h)| &= \left| \sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} \left(g, m\left(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}}/N^{\alpha/2}\right)^2 \tilde{m}\left(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}}\right) h \right) \right| \\ &= \left| \sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} \left(m\left(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}}/N^{\alpha/2}\right) g, m\left(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}}/N^{\alpha/2}\right) \tilde{m}\left(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}}\right) h \right) \right| \\ &\leq (S(g), S(\tilde{m}(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}}) h)) \leq \|S(g)\|_p \left\| \tilde{m}\left(\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}}\right) h \right\|_{p'} \lesssim \|S(g)\|_p \|h\|_{p'} \end{aligned}$$

für alle $h \in L^{p'}(\mathbb{R}^d)$. Dies zeigt $\|g\|_p \lesssim \|S(g)\|_p$. Die Äquivalenz $\|g\|_p \sim \|\tilde{S}(g)\|_p$ wird analog bewiesen. \square

8.4 Beweis von Behauptung 8.1.5 und Satz 8.1.2

Ein Schlüssel zum Beweis von Behauptung 8.1.5 sind punktweise Schranken an die Differenz der Wärmeleitungskerne von $|p|^\alpha$ und $\mathcal{L}_{a,\alpha}$, sprich

$$K_t^\alpha(x, y) := e^{-t|p|^\alpha}(x, y) - e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, y).$$

Neben den individuellen Schranken an die Kerne haben wir im letzten Kapitel punktweise Schranken an $K_t^\alpha(x, y)$ hergeleitet und durch die Funktionen

$$L_t^{\alpha, \delta}(x, y) := \mathbf{1}_{\{|x| \vee |y|^\alpha \leq t\}} t^{-\frac{d}{\alpha}} \left(\frac{t^{2/\alpha}}{|x||y|} \right)^\delta + \mathbf{1}_{\{|x| \vee |y|^\alpha \geq t\}} \frac{t}{(|x| \vee |y|)^{d+\alpha}} \left(1 \vee \frac{t^{1/\alpha}}{|x| \wedge |y|} \right)^\delta$$

und

$$M_t^\alpha(x, y) := \mathbf{1}_{\{|x| \vee |y|^\alpha \geq t\}} \mathbf{1}_{\{\frac{1}{2}|x| \leq |y| \leq 2|x|\}} \frac{t^{1-\frac{d}{\alpha}}}{(|x| \wedge |y|)^\alpha} \left(1 \wedge \frac{t^{1+\frac{d}{\alpha}}}{|x-y|^{d+\alpha}} \right)$$

ausgedrückt. Wir hatten gesehen, dass es effektive Auslöschungen in den Regionen $(|x| \vee |y|)^\alpha \geq t$ und $|x| \sim |y|$ gab. Wir erinnern an

Lemma 8.4.1. *Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$, $a \in [a_*, \infty)$ und sei δ durch (8.1) definiert. Dann gilt für alle $x, y \in \mathbb{R}^d$ und $t > 0$*

$$|K_t^\alpha(x, y)| \lesssim L_t^{\alpha, \delta_+}(x, y) + M_t^\alpha(x, y).$$

Der Beweis von Behauptung 8.1.5 verläuft analog wie im letzten Kapitel mittels Schur-Tests und den Schranken von Lemma 8.4.1.

Beweis von Behauptung 8.1.5. Mit der Dreiecksungleichung im Folgenraum ℓ^2 und der $\ell^1 \hookrightarrow \ell^2$ -Einbettung schätzen wir

$$\begin{aligned} & \left\| \left(\sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} |N^{\frac{\alpha s}{2}} P_N^\alpha f|^2 \right)^{1/2} - \left(\sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} |N^{\frac{\alpha s}{2}} P_N^{\alpha, \alpha} f|^2 \right)^{1/2} \right\|_p \\ & \leq \left\| \left(\sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} |N^{\frac{\alpha s}{2}} (P_N^\alpha - P_N^{\alpha, \alpha}) f|^2 \right)^{1/2} \right\|_p \lesssim \left\| \int_{\mathbb{R}^d} dy \sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} N^{\frac{\alpha s}{2}} |K_{N^{-\alpha}}^\alpha(x, y)| |f(y)| \right\|_p \quad (8.27) \\ & \lesssim \left\| \int_{\mathbb{R}^d} dy \left(\sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} N^{\frac{\alpha s}{2}} |L_{N^{-\alpha}}^{\alpha, \delta_+}(x, y)| |y|^{\frac{\alpha s}{2}} \right) \frac{|f(y)|}{|y|^{\frac{\alpha s}{2}}} \right\|_p \\ & \quad + \left\| \int_{\mathbb{R}^d} dy \left(\sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} N^{\frac{\alpha s}{2}} |M_{N^{-\alpha}}^\alpha(x, y)| |y|^{\frac{\alpha s}{2}} \right) \frac{|f(y)|}{|y|^{\frac{\alpha s}{2}}} \right\|_p \end{aligned}$$

ab. Daher genügt es zu zeigen, dass die rechte Seite durch $\||x|^{-\alpha s/2} f\|_p$ für alle $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ beschränkt ist. Um die Notation zu vereinfachen, definieren wir $g(x) = |x|^{-\alpha s/2} |f(x)|$.

Wir verwenden, wie im L^2 -Fall, Schur-Tests, um die Behauptung zu zeigen. Wir beginnen mit dem ersten Summanden und berechnen

$$\begin{aligned} \sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} N^{\frac{\alpha s}{2}} L_{N^{-\alpha}}^{\alpha, \delta_+}(x, y) &= (|x||y|)^{-\delta_+} \sum_{N \leq (|x| \vee |y|)^{-1}} N^{\frac{\alpha s}{2} + d - 2\delta_+} \\ & \quad + \sum_{N \geq (|x| \vee |y|)^{-1}} N^{\frac{\alpha s}{2}} \frac{N^{-\alpha}}{(|x| \vee |y|)^{d+\alpha}} \left(1 \vee \frac{N^{-1}}{|x| \wedge |y|} \right)^{\delta_+} \\ & \sim (|x||y|)^{-\delta_+} (|x| \vee |y|)^{-\alpha s/2 - d + 2\delta_+} + \frac{1}{(|x| \vee |y|)^{\frac{\alpha s}{2} + d}} \left(\frac{|x| \vee |y|}{|x| \wedge |y|} \right)^{\delta_+}. \end{aligned}$$

Hier haben wir $\alpha s/2 + d - 2\delta_+ > 0$ verwendet, was aus $\delta \leq (d - \alpha)/2$ folgt. Wir bemerken, dass die beiden Summanden gleich sind, da

$$\frac{|x| \vee |y|}{|x||y|} = \frac{1}{|x| \wedge |y|}.$$

Daher ist

$$\left\| \int_{\mathbb{R}^d} dy \sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} N^{\frac{\alpha s}{2}} L_{N^{-\alpha}}^{\alpha, \delta_+}(x, y) |y|^{\alpha \frac{s}{2}} g(y) \right\|_p \lesssim \left\| \int_{\mathbb{R}^d} dy \frac{(|x| \vee |y|)^{2\delta_+ - d}}{(|x||y|)^{\delta_+}} g(y) \right\|_p.$$

Für alle $(p \vee p')\delta_+ < \beta < (p \wedge p')(d - \delta_+)$ (solche β existieren, da $d - 2\delta \geq \alpha > 0$ und $d/(d - \delta_+) < p, p' < d/\delta_+$) haben wir

$$\sup_{y \in \mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} dx \left(\frac{|y|}{|x|} \right)^{\frac{\beta}{p}} \frac{(|x| \vee |y|)^{2\delta_+ - d}}{(|x||y|)^{\delta_+}} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{(1 \vee |z|)^{2\delta_+ - d}}{|z|^{\delta_+ + \frac{\beta}{p}}} dz < \infty$$

und analog (wegen der Symmetrie des Integralkerns in x und y)

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} dy \left(\frac{|x|}{|y|} \right)^{\frac{\beta}{p'}} \frac{(|x| \vee |y|)^{2\delta_+ - d}}{(|x||y|)^{\delta_+}} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{(1 \vee |z|)^{2\delta_+ - d}}{|z|^{\delta_+ + \frac{\beta}{p'}}} dz < \infty.$$

Mit Hilfe eines gewichteten Schur-Tests folgt daraus

$$\left\| \int_{\mathbb{R}^d} dy \frac{(|x| \vee |y|)^{2\delta_+ - d}}{(|x||y|)^{\delta_+}} g(y) \right\|_p \lesssim \|g\|_p,$$

was zeigt, dass der erste Term in (8.27) die behauptete Schranke erfüllt.

Der zweite Term in (8.27) wird wie im Beweis von Behauptung 7.1.5 mit Hilfe eines ungewichteten Schur-Tests behandelt. Insbesondere wird das letzte Integral (7.19),

$$\sup_{y \in \mathbb{R}^d} |y|^{\frac{\alpha s}{2} - \alpha} \int_{t \leq (2|y|)^\alpha} \frac{dt}{t} t^{-\frac{s}{2} + 1} \sim \sup_{y \in \mathbb{R}^d} |y|^{\frac{\alpha s}{2} - \alpha} \int_{t \geq (2|y|)^{-1}} \frac{dt}{t} t^{\frac{\alpha s}{2} - \alpha} \sim 1$$

durch die Summe

$$\sup_{y \in \mathbb{R}^d} |y|^{\frac{\alpha s}{2} - \alpha} \sum_{2^{\mathbb{Z}} \ni N \geq (2|y|)^{-1}} N^{\frac{\alpha s}{2} - \alpha} \sim 1$$

ersetzt. Dies zeigt die behauptete Ungleichung. \square

Wir zeigen nun, dass Satz 8.1.2 unmittelbar aus Behauptungen 8.1.4 und 8.1.5 sowie der Littlewood–Paley-Theorie des letzten Abschnitts folgt.

Beweis von Satz 8.1.2. Wir nehmen im Folgenden immer $1 < p < \infty$ an. Für $s \in (0, 2)$ folgt die Behauptung

$$\| |p|^{\alpha \frac{s}{2}} f \|_p \lesssim_{d,p,\alpha,s} \| \mathcal{L}_{a,\alpha}^{\frac{s}{2}} f \|_p$$

durch Anwenden von Satz 8.3.4 (was $\delta_+ < d/p < d - \delta_+$ benötigt), der Dreiecksungleichung, Behauptung 8.1.4 (was $\alpha s/2 + \delta < d/p < d - \delta$ benötigt) und Behauptung 8.1.5 (was wieder $\delta_+ < d/p < d - \delta_+$ benötigt), denn

$$\begin{aligned} \| |p|^{\alpha \frac{s}{2}} f \|_p &\sim \left\| \left(\sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} |N^{\alpha s/2} P_N^\alpha f|^2 \right)^{1/2} \right\|_p \\ &\leq \left\| \left(\sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} |N^{\alpha s/2} P_N^{a,\alpha} f|^2 \right)^{1/2} \right\|_p \\ &\quad + \left\| \left(\sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} |N^{\alpha s/2} P_N^\alpha f|^2 \right)^{1/2} - \left(\sum_{N \in 2^{\mathbb{Z}}} |N^{\alpha s/2} P_N^{a,\alpha} f|^2 \right)^{1/2} \right\|_p \\ &\lesssim \| \mathcal{L}_{a,\alpha}^{s/2} f \|_p + \| |x|^{-\alpha s/2} f \|_p \lesssim \| \mathcal{L}_{a,\alpha}^{s/2} f \|_p. \end{aligned}$$

Wir bemerken, dass die Annahme $\alpha s/2 < d$ in Behauptung 8.1.4 automatisch aus $s \leq 2$ und $\alpha < d$ folgt.

Die andere Ungleichung, sprich

$$\| \mathcal{L}_{a,\alpha}^{\frac{s}{2}} f \|_p \lesssim_{d,p,\alpha,s} \| |p|^{\alpha \frac{s}{2}} f \|_p,$$

wird analog bewiesen, verwendet aber Lemma 8.1.3 (was $\alpha s/2 < d/p$ benötigt), anstatt Behauptung 8.1.4. Die andere Schranken an p , sprich $\delta_+ < d/p < d - \delta_+$ werden wieder für die Abschätzungen der (LP)-Funktionen (Satz 8.3.4) und die umgekehrte Hardy-Ungleichung (Behauptung 8.1.5) benötigt.

Für $s = 2$ wird die obige Littlewood–Paley-Theorie nicht benötigt. Die Ungleichung $\| \mathcal{L}_{a,\alpha} f \|_p \lesssim \| |p|^\alpha f \|_p$ folgt aus der Dreiecksungleichung und der gewöhnlichen Hardy-Ungleichung, Lemma 8.1.3. Die andere Ungleichung folgt aus

$$\| |p|^\alpha f \|_p \leq \| (|p|^\alpha - \mathcal{L}_{a,\alpha}) f \|_p + \| \mathcal{L}_{a,\alpha} f \|_p = \| |x|^{-\alpha} f \|_p + \| \mathcal{L}_{a,\alpha} f \|_p$$

und der verallgemeinerten Hardy-Ungleichung, Behauptung 8.1.4. \square

8.5 Eine Verallgemeinerung

Wie im letzten Kapitel ist es möglich, Satz 8.1.2 auf Operatoren $|p|^\alpha + V$ zu verallgemeinern, wobei V eine Funktion auf \mathbb{R}^d ist, die den Schranken

$$\frac{a}{|x|^\alpha} \leq V(x) \leq \frac{\tilde{a}}{|x|^\alpha} \quad (8.28)$$

mit $a_* \leq a \leq \tilde{a} < \infty$ genügt. Wir zeigen folgenden

Satz 8.5.1. *Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$, $a_* \leq a \leq \tilde{a} < \infty$, $\delta = \delta(a)$ durch (8.1) definiert und $s \in (0, 2]$. Sei weiterhin Annahme 8.1.1 erfüllt, wenn $s \in (0, 2)$.*

1. Falls $1 < p < \infty$ die Ungleichungen $\alpha s/2 + \delta < d/p < \min\{d, d - \delta\}$ erfüllt, dann gilt für alle V , die (8.28) erfüllen

$$\| |p|^{\alpha s/2} f \|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \lesssim_{d,\alpha,a,s} \| (|p|^\alpha + V)^{s/2} f \|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d). \quad (8.29)$$

2. Falls $\max\{\alpha s/2, \delta\} < d/p < \min\{d, d - \delta\}$ (was bereits $1 < p < \infty$ sicherstellt), dann gilt für alle V , die (8.28) erfüllen

$$\| (|p|^\alpha + V)^{s/2} f \|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \lesssim_{d,\alpha,a,s} \| |p|^{\alpha s/2} f \|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d). \quad (8.30)$$

Wir betonen nochmals, dass δ bezüglich a und nicht bezüglich \tilde{a} definiert ist und die Konstanten des Satzes nicht von \tilde{a} abhängen.

Der Beweis von Satz 8.5.1 für $s < 2$ folgt unmittelbar aus den folgenden beiden Behauptungen und den Abschätzungen der (LP)-Funktionen (Satz 8.3.4) im selben Stil, wie Satz 8.1.2 aus den Behauptungen 8.1.4 und 8.1.5 und den Abschätzungen an die (LP)-Funktionen folgte. Für $s = 2$ werden lediglich die gewöhnliche und die folgende verallgemeinerte Hardy-Ungleichung sowie die Dreiecksungleichung benötigt.

Behauptung 8.5.2. Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$, $p \in (1, \infty)$, $a_* \leq a \leq \tilde{a} < \infty$, δ durch (8.1) definiert und $\alpha s/2 \in (0, d)$. Dann gilt für alle $s > 0$ mit $\alpha s/2 + \delta < d/p < d - \delta$ und alle V , die (8.28) erfüllen

$$\| |x|^{-\alpha s/2} f \|_p \lesssim_{d,\alpha,a,s} \| (|p|^\alpha + V)^{s/2} f \|_p \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d).$$

Beweis. Mit dem Maximumprinzip gilt für alle $x, y \in \mathbb{R}^d$ und $t > 0$

$$0 \leq e^{-t(|p|^\alpha + V)}(x, y) \leq e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, y). \quad (8.31)$$

Wegen des Spektralsatzes gilt

$$\mathcal{L}_{a,\alpha}^{-s/2}(x, y) = \frac{1}{\Gamma(s/2)} \int_0^\infty e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, y) t^{s/2} \frac{dt}{t}$$

und entsprechend für $(|p|^\alpha + V)^{-s/2}(x, y)$. Daraus folgt die Ungleichung

$$(|p|^\alpha + V)^{-s/2}(x, y) \leq \mathcal{L}_{a,\alpha}^{-s/2}(x, y),$$

was zeigt, dass die oberen Schranken für $\mathcal{L}_{a,\alpha}^{-s/2}(x, y)$ (Satz 7.1.6) auch für $(|p|^\alpha + V)^{-s/2}$ gelten. Die Behauptung folgt dann im selben Stil wie Behauptung 8.1.4. \square

Behauptung 8.5.3. Seien $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$, $a_* \leq a \leq \tilde{a} < \infty$, δ durch (8.1) definiert, $p \in (1, \infty)$, wenn $a \geq 0$ und $p \in (d/(d - \delta), d/\delta)$, wenn $a < 0$. Seien weiter $s \in (0, 2)$ und

$$P_N^{V,\alpha} := e^{-(|p|^\alpha + V)/N^\alpha} - e^{-(|p|^\alpha + V)/(N^\alpha/2^\alpha)}, \quad P_N^\alpha := P_N^{0,\alpha} \quad \text{für } N \in 2^\mathbb{Z}.$$

Dann gilt für alle V , die (8.28) erfüllen

$$\left\| \left(\sum_{N \in 2^\mathbb{Z}} |N^{\alpha s/2} P_N^\alpha f|^2 \right)^{1/2} - \left(\sum_{N \in 2^\mathbb{Z}} |N^{\alpha s/2} P_N^{V,\alpha} f|^2 \right)^{1/2} \right\|_p \lesssim_{d,\alpha,a,s} \| |x|^{-\alpha s/2} f \|_p$$

für alle $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$.

Beweis. Sei

$$\tilde{K}_t^\alpha(x, y) := e^{-t|p|^\alpha}(x, y) - e^{-t(|p|^\alpha + V)}(x, y).$$

Wegen des Maximumprinzips gilt für alle $x, y \in \mathbb{R}^d$ und $t > 0$

$$e^{-t|p|^\alpha}(x, y) - e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, y) \leq \tilde{K}_t^\alpha(x, y) \leq e^{-t|p|^\alpha}(x, y) - e^{-t\mathcal{L}_{\tilde{a},\alpha}}(x, y).$$

Daher impliziert Lemma 8.4.1 mit a und \tilde{a} , dass die entsprechende Aussage auch für \tilde{K}_t^α anstatt K_t^α gilt. Hierbei haben wir verwendet, dass $\tilde{\delta}$, was durch (8.1) mit \tilde{a} anstatt a definiert ist, die Ungleichung $\tilde{\delta} \leq \delta$ erfüllt. Mit Hilfe des Analogons von Lemma 8.4.1 folgt der Beweis dieser Behauptung im gleichen Stil wie der von Behauptung 8.1.5.

□

Kapitel 9

Offene Fragen

Wir formulieren schließlich einige offene Fragen, die im Zusammenhang mit den Ergebnissen dieser Arbeit stehen. Wir beginnen mit einigen Wünschen und Vermutungen, die die hier behandelten physikalischen Modelle betreffen.

Fragen bezüglich der behandelten physikalischen Modelle

- In Kapitel 4 wurde die schwache Konvergenz der Einteilchendichte eines Grundzustands gegen die wasserstoffartige Thomas–Fermi-Dichte gezeigt. Für Kopplungskonstanten $\gamma \leq 2/\pi$ konnten wir die erwartete schwache Konvergenz in den semiklassischen L^p -Räumen mit $p = 5/2, 4$ zeigen. Für $\gamma \in (2/\pi, 2/(\pi/2 + 2/\pi))$ gelang uns dies nur, wenn die Test-Funktionen zusätzlich punktweise durch ein Vielfaches des Coulomb-Potentials beschränkt und Lipschitz-stetig waren. Zudem konnten wir $\gamma = 2/(\pi/2 + 2/\pi)$ nicht behandeln. Es wäre daher wünschenswert, diese beiden technischen Einschränkungen umgehen zu können.
- Die starke Scott-Vermutung konnte für das Furry-Modell deshalb relativ direkt gezeigt werden, da das effektive Einteilchen-Problem durch den Wasserstoff-Operator beschrieben wird und die Projektion im Furry-Bild gerade mit diesem kommutiert. Im Brown–Ravenhall-Modell ist eine direkte Verallgemeinerung der Methoden aus dem Furry-Modell nicht erwartbar, da Kommutatoren mit der freien Projektion auftreten und kontrolliert werden müssen.
- Die wasserstoffartige Dichte $\rho^H(x)$, sprich die Summe der Betragsquadrate der Eigenfunktionen der hier behandelten relativistischen Operatoren, wurde bisher nicht im Detail studiert. Dies steht im starken Gegensatz zur nicht-relativistischen Dichte, die von Heilmann und Lieb [86] eingehend untersucht wurde. Wie wir bereits erwähnt haben, zeigten die Autoren, dass die Dichte punktweise endlich ist, monoton fällt und sich für $q = 2$ und große Kernabstände asymptotisch wie $2r^{-3/2}/(\sqrt{2}\pi^2) + o(r^{-3/2})$ verhält. Insbesondere ist die Dichte am Ursprung endlich und sie erfüllt nach der Arbeit von Rakowsky und Siedentop [140] (mit $m = 1$ und der starken Scott-Vermutung für nicht-relativistische Atome [95]) die punktweise obere Schranke

$$\rho^H(0) \leq \frac{\pi}{12}.$$

Für die Chandrasekhar- und Furry-Operatoren konnten wir zwar immerhin zeigen, dass ρ^H für große Kernabstände nach oben durch eine implizite Konstante mal $r^{-3/2}$ beschränkt ist. Jedoch fehlt erstens die scharfe Konstante und zweitens eine entsprechende untere Schranke, um ein Ergebnis über die Asymptotik der Dichte für $r \rightarrow \infty$ zu formulieren. Da Elektronen, die sich weit weg vom Kern befinden, keine relativistischen Effekte mehr „spüren“ sollten, vermuten wir, dass die Asymptotik der relativistischen Dichte mit der der nicht-relativistischen Dichte übereinstimmt. Dies würde nochmals unterstreichen, dass die Thomas–Fermi-Theorie den Großteil der Elektronen des Vielteilchen-Systems korrekt beschreibt, da die Thomas–Fermi-Dichte am Ursprung gerade wie $r^{-3/2}$ divergiert. Wir erinnern an das Skalierungsverhalten $\rho_Z^H(x) = Z^3 \rho_{Z=1}^H(Zx)$ der Dichte des Wasserstoffatoms mit Kernladung Z und $\rho_Z^{\text{TF}}(x) = Z^2 \rho_1^{\text{TF}}(Z^{1/3}x)$. Schließlich verbleibt die Bestimmung des Monotonieverhaltens sowie der Singularität am Ursprung. Insbesondere sollte letztere von der Kopplungskonstanten γ abhängen, was bereits an den explizit bekannten Eigenfunktionen des Coulomb–Dirac-Operators ersichtlich ist, siehe beispielsweise Bethe [10]. Am Ursprung verhalten sich die Eigenfunktionen im Kanal $j = 1/2$ wie $r\sqrt{1-\gamma^2-1}$.

Der Beweis der obigen Eigenschaften im nicht-relativistischen Fall beruhte sehr stark auf den Eigenschaften der explizit bekannten Eigenfunktionen, welche für die hier besprochenen relativistischen Modelle nur für den Coulomb–Dirac-Operator im Furry-Bild bekannt sind. Diese beinhalten allerdings hypergeometrische konfluente Funktionen, sind also nur sehr schwer zu handhaben. Nichtsdestotrotz könnte eine WKB-Untersuchung mit dem semiklassischen Parameter $1/c$ etwas Licht ins Dunkel bringen. Diese Hoffnung wird bereits durch Bethe [10, Seite 316] geweckt. Er beobachtete, dass die relativistischen Eigenfunktionen wieder in die nicht-relativistischen Eigenfunktionen übergehen, wenn man $c \rightarrow \infty$ für festes Z gehen lässt. Eine detailliertere Abhandlung über den nicht-relativistischen Grenzwert von Dirac-Operatoren kann in [171, Kapitel 6] und den dort enthaltenen Referenzen gefunden werden.

- In der Einleitung haben wir kurz das Mittlemansche Prinzip zur Herleitung relativistischer Hamilton-Operatoren aus QED-Hamilton-Operatoren angesprochen. Dieses Prinzip sollte zur präzisesten Vorhersage der Grundzustandsenergie schwerer ($Z \gg 1$) Atome führen. Wir verweisen auf [129, Abschnitt II] für eine detaillierte Beschreibung dieses nichtlinearen Variationsprinzips. Sehr grob gesagt, schlug Mittleman vor, dass man zunächst den tiefsten Eigenwert eines (mit einer noch frei wählbaren Projektion) projizierten Vielteilchen-Dirac-Operators finden sollte. Im Anschluß sollte man diesen Eigenwert über alle „erlaubten“ Projektionen maximieren. Die Projektion, die den höchsten Eigenwert liefert, bestimmt demnach den „physikalisch relevantesten“ Hamilton-Operator.

Eine erste natürliche Frage, die man an diesem Punkt stellen muss, ist, über welche Projektionen man überhaupt variieren soll. Man sollte sicherlich solche ausschließen, welche ganz oder teilweise auf den negativen Teil des Spektrums (den „Dirac-See“) des Dirac-Operators projizieren.

Weiterhin kann man folgende zwei Vermutungen äußern, welche die asymptotische Entwicklung der Grundzustandsenergie des Vielteilchen-Operators im Grenzwert großer Teilchenzahlen beziehungsweise Kernladungen betreffen.

- (1) Aufgrund der Intuition, dass der größte Beitrag von kernfernen, „langsamen“ Elek-

tronen auf der Längenskala $Z^{-1/3}$ erzeugt wird, könnte man erwarten, dass die führende Ordnung der Grundzustandsenergie für alle „erlaubten“ Projektionen wieder durch die Thomas–Fermi-Energie gegeben ist.

(2) Des Weiteren sollte die Z^2 -Korrektur im Furry-Bild am höchsten sein, da diese nur durch das effektive Einteilchen-Problem, welches nur Wasserstoff-Operatoren beinhaltet, erzeugt wird. Diese Intuition stützt sich auf das Variationsprinzip für Operatoren mit Spektrallücken [77, 131], welches die höchsten Eigenwerte des Coulomb–Dirac-Operators liefert, wenn bezüglich des Furry-Bilds projiziert wird. Dies ist auch das zu Grunde liegende Argument von Schwinger für die Herleitung der relativistischen Scott-Korrektur [150].

Diese beiden Vermutungen sind bis heute ungeklärt und stellen interessante mathematische beziehungsweise physikalische Probleme dar.

Offene mathematische Fragestellungen

- Wie wir in Kapitel 8 erwähnt haben (und in Anhang D.1 erörtern werden), ist es offen einen Mikhlin- oder Hörmander-Multiplikator-Satz für $|p|^\alpha + V$ für $V \geq 0$, wenn $d \geq 2$ oder $d = 1$ und $\alpha \leq 1$ sind, zu zeigen. Eine weitere eng damit verwandte Frage ist die L^p -Beschränktheit der zugehörigen Maximalfunktion

$$\sup_{t>0} |F(t(|p|^\alpha + V))|$$

sowie der Summierbarkeit von Entwicklungen von Funktionen in Eigenfunktionen von $|p|^\alpha + V$, das heißt, ob

$$\lim_{t \rightarrow 0} F(t(|p|^\alpha + V))f = f$$

punktweise fast überall oder in L^p gilt, wenn F hinreichend glatt ist und $F(0) = 1$ erfüllt. Für $F(\lambda) = (1 - \lambda)_+^\gamma$ mit $\gamma = \gamma(d, \alpha) > 0$ führt dies auf die Frage der Bochner–Riesz-Summierbarkeit.

Schließlich stellt sich im gleichen Kontext die Frage an die kleinste Zahl der benötigten Ableitungen an den Multiplikator damit dieser L^p -beschränkt ist. Im Schrödinger-Fall $-\Delta + V$ mit $V \geq 0$ ist beispielsweise bekannt, dass diese Zahl mindestens $d/2$ sein muss (Hebisch [84]). Des Weiteren gilt Bochner–Riesz–Summierbarkeit, wenn $\gamma > (d - 1)/2$.

- In Kapitel 8 konnten wir kein Mikhlin-Multiplikator-Theorem für $\mathcal{L}_{a,\alpha} = |p|^\alpha + a|x|^{-\alpha}$ mit $a < 0$ zeigen, da der Wellenpropagator $\cos(\tau\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}})$ keinen kompakten distributionellen Träger hat. Insbesondere war es offen eine Abschätzung der Art $\|Tb_k\|_{L^1(\mathbb{R}^d \setminus Q_k^*)} \lesssim h^{1-q} \|b_k\|_q$ zu zeigen, wobei $\{Q_k\}$ eine Familie dyadischer Würfel (mit relativ konkreter Struktur) war, die aus einer Calderón–Zygmund-Zerlegung hervorging und b_k auf Q_k getragene Funktionen waren. Die Q_k^* waren dilatierte Versionen der Q_k . Mit Stones Formel

$$\cos(\tau\sqrt{\mathcal{L}_{a,\alpha}}) = \frac{1}{2\pi i} \lim_{\varepsilon \searrow 0} \int_0^\infty \cos(\tau\sqrt{\lambda}) ((\mathcal{L}_{a,\alpha} - (\lambda + i\varepsilon))^{-1} - ((\mathcal{L}_{a,\alpha} - (\lambda - i\varepsilon))^{-1}) d\lambda$$

könnte es möglich sein hinreichend gute punktweise Schranken des Wellenpropagators zu erhalten und damit die gewünschte Abschätzung zu zeigen.

- Es wäre wünschenswert, die Äquivalenz der Sobolew-Normen auch für den Coulomb-Dirac-Operator mit durch punktweise beschränktem Coulomb-Potential zu beweisen. Konkret erwarten wir, dass Satz 7.4.1 auf diesen Fall verallgemeinerbar ist. Mit der Definition von σ_γ aus (6.10) formulieren wir folgende

Vermutung 9.0.1. *Seien $0 < s \leq 1$ und $0 < \gamma < 1$. Für alle $\gamma' > 0$ gibt es ein $a_{s,\gamma,\gamma'} > 0$, sodass, wenn $s + \sigma_\gamma < 3/2$, dann ist für alle $0 \leq U(x) \leq \gamma'/|x|$*

$$|D_\gamma^0 + U|^{2s} \geq a_{s,\gamma,\gamma'} |p|^{2s} \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$$

und für alle $0 < \gamma' < 1 - \gamma$ gibt es ein $a'_{s,\gamma,\gamma'} > 0$, sodass, wenn $s + \sigma_{\gamma+\gamma'} < 3/2$, dann gilt für alle $0 \leq U(x) \leq \gamma'/|x|$

$$|D_\gamma^0 - U|^{2s} \geq a'_{s,\gamma,\gamma'} |p|^{2s} \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^4} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4).$$

Die Behauptung folgt sofort, wenn

- $U = \gamma'/|x|$, oder
- $\ell \geq 1$ mit $\gamma + \gamma' < 3/2$.

Der erste Fall ist offensichtlich, denn es ist $D_\gamma^0 \mp U = D_{\gamma \pm \gamma'}^0$ und man kann direkt Lemma 6.2.7 anwenden. Im zweiten Fall folgt die Aussage aus der Dreiecksungleichung, der Hardy-Ungleichung

$$\left(f, \frac{(\ell + 1/2)^2}{r^2} f \right) = \int_0^\infty \frac{\ell(\ell + 1) + 1/4}{r^2} |f(r)|^2 dr \leq (f, p_\ell^2 f),$$

und der Operatormonotonie von $x \mapsto x^s$ für $0 < s < 1$, denn für $f \in (\mathfrak{H}_{j,0})^\perp$ ist

$$\|(D_\gamma^0 \mp U)f\| \geq \| |p|f \| - (\gamma + \gamma') \| |x|^{-1}f \| \geq \left(1 - \frac{\gamma + \gamma'}{\ell + 1/2} \right) \| |p|f \|.$$

Für $\ell = 0$ und allgemeine U sollten die Argumente von Morozov und Müller [132] verwendet werden können, um $(D_\gamma^0 \pm U)^2 \geq a_{\gamma,\gamma'} (D_{\gamma+\gamma'}^0)^2$ zu zeigen. Anschließend würde man wieder Lemma 6.2.7 verwenden.

Diese Vermutung erscheint „universeller“ als Lemma 6.2.13, denn dort mussten wir eine Kleinheitsbedingungen an γ' stellen, die nur indirekt etwas mit der Äquivalenz der Sobolew-Normen aus Kapitel 7 zu tun hatte.

Anhang A

Anhang zur semiklassischen Dichte im Brown–Ravenhall-Modell

A.1 Kommutator mit den \mathcal{T} -Transformationen

Im Folgenden betrachten wir das durch den Operator $[\Phi_j, \chi_R]V[\chi_R, \Phi_j]$ erzeugte Lokalisierungspotential mit $V = |z|^{-1}$ und der Lokalisierungsfunktion $\chi_R(x) = \chi(x/R)$ mit χ aus (4.8) im masselosen und massiven Fall. Wir beginnen mit der schwierigeren, zweiten Komponente der \mathcal{T} -Transformation.

Nach Lemma 4.4.1 und Lemma 4.4.3 ist das durch den Operator $[\Phi_1, \chi_R]V[\chi_R, \Phi_1]$ erzeugte Lokalisierungspotential durch

$$L_R^{(1)}(x) = A \int_{\mathbb{R}^3} dy \int_{\mathbb{R}^3} dz \frac{e^{-a|x-z|}e^{-a|z-y|}}{|x-z|^3|z-y|^3} V(z) |\chi_R(x) - \chi_R(z)| |\chi_R(y) - \chi_R(z)| \quad (\text{A.1})$$

mit einem $a \in (0, 1)$ beschränkt.

Im masselosen Fall ist dagegen $\phi_j = 1$ für $j \in \{0, 1\}$, das heißt man muss lediglich das durch $[h, \chi_R]V[\chi_R, h]$ erzeugte Potential betrachten, wobei $h = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$ der Helizitätsoperator ist. Um den Lokalisierungsfehler in diesem Fall zu bestimmen, berechnen wir zunächst das Lokalisierungspotential, das durch $[h_m, \chi_R]V[\chi_R, h_m]$ erzeugt wird, wobei $h_m := \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}/(p^2 + m^2)^{1/2}$ für ein $m > 0$ den regularisierten Helizitätsoperator bezeichnet. Dieses lässt sich nach (4.23) und Lemma 4.4.1 durch

$$L(x) := Am^4 \int_{\mathbb{R}^3} dy \int_{\mathbb{R}^3} dz \frac{K_2(m|x-z|)K_2(m|z-y|)}{|x-z||z-y|} V(z) |\chi_R(x) - \chi_R(z)| |\chi_R(y) - \chi_R(z)| \quad (\text{A.2})$$

abschätzen. Wir erinnern nochmals an das asymptotische Verhalten von K_2 (siehe [137, Formel 9.6.9 und 9.7.2]), nämlich

$$\begin{aligned} K_2(mr) &\sim 2(mr)^{-2} \quad \text{für } r \rightarrow 0, \\ K_2(mr) &\sim \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{e^{-mr}}{\sqrt{mr}} \quad \text{für } r \rightarrow \infty \end{aligned}$$

für festes $m > 0$. Daraus folgt, dass es ein $A_a > 0$ gibt, sodass

$$|\Phi_1(r)| \leq A_a r^{-1} K_2(ar) \quad \text{für alle } r > 0.$$

Dies zeigt, dass das von $[\Phi_1, \chi_R]V[\chi_R, \Phi_1]$ erzeugte Lokalisierungspotential (A.1) durch das von $[h_m, \chi_R]V[\chi_R, h_m]$ erzeugte Potential beschränkt werden kann, wenn $m \in (0, a]$ nicht zu groß ist. Wir untersuchen daher im Folgenden lediglich (A.2) für ein festes $m > 0$. Lässt man $m \rightarrow 0$ gehen, erhält man eine obere Schranke für das Lokalisierungspotential der masselosen \mathcal{T} -Transformation.

A.1.1 Das y -Integral

Wir beginnen mit der Berechnung des y -Integrals. Hierbei untersuchen wir verschiedene Regionen, siehe dazu Abbildung A.1.

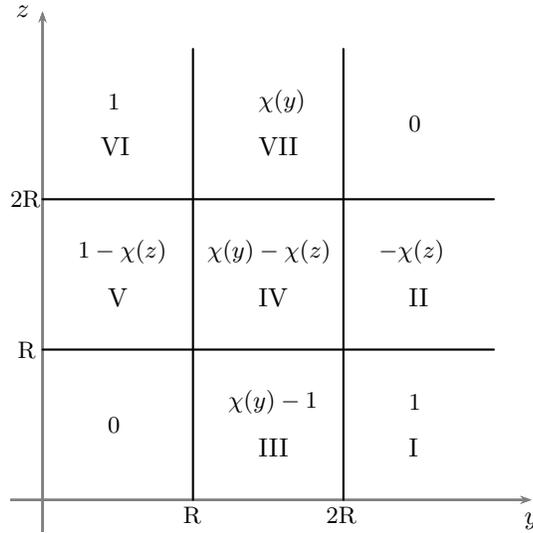


Abbildung A.1: y - z -Gitter

Sind beispielsweise sowohl $|y| \leq R$, als auch $|z| \leq R$, so ist das Integral identisch Null. Für die Region $|y|, |z| \in [R, 2R]$ verwenden wir den Mittelwertsatz sowie die Lipschitz-Stetigkeit von χ und schätzen die Differenz durch MR^{-1} ab, wobei $M = \|\nabla\chi\|_\infty$.

Für die Regionen, in welcher der Abstand $|y - z| \geq ||y| - |z|| \geq R$ ist, verwenden wir die exponentielle Asymptotik $K_2(|y - z|) \leq Ae^{-|y-z|}|y - z|^{-1/2}$. In den Regionen, in welchen der Abstand $|y - z|$ Null werden kann (beispielsweise, wenn $R \leq |z| \leq 2R$ und $2R \leq |y| \leq 3R$ sind), verwenden wir stattdessen $K_2(|y - z|) \leq A|y - z|^{-2}$. Für Region I verwenden wir beispielsweise die exponentielle Asymptotik, wohingegen, wenn wir in Region II die Fälle $2R \leq |y| \leq 3R$ und $|y| \geq 3R$ unterscheiden, wir in ersterem die r^{-2} -Asymptotik von $K_2(r)$ verwenden. Wir definieren

$$I = m^2 \int_{\mathbb{R}^3} \frac{K_2(m|y - z|)}{|y - z|} |\chi_R(y) - \chi_R(z)| dz. \quad (\text{A.3})$$

I: $|z| \leq R$, $|y| \geq 2R$.

$$\begin{aligned}
I &\leq Am^{3/2} \int_{|y| \geq 2R} \frac{e^{-m|y-z|}}{|y-z|^{3/2}} = Am^{3/2} \int_{2R}^{\infty} dr r^2 \int_{-1}^1 du \frac{\exp\left(-m\sqrt{r^2 + |z|^2 - 2r|z|u}\right)}{(r^2 + |z|^2 - 2r|z|u)^{3/4}} \\
&= Am^{3/2} |z|^{-1} \int_{2R}^{\infty} dr r \int_{(r-|z|)^2}^{(r+|z|)^2} du \frac{e^{-m\sqrt{u}}}{u^{3/4}} \\
&\leq Am^{3/2} |z|^{-1} \int_{2R}^{\infty} dr r [(r+|z|)^2 - (r-|z|)^2] \cdot \frac{e^{-m(r-|z|)}}{(r-|z|)^{3/2}} \\
&= Am^{3/2} \int_{2R-|z|}^{\infty} dr \left[r^2 + |z|^2 + 2r|z| \right] \frac{e^{-mr}}{r^{3/2}} \\
&\leq Am^{3/2} \left(\int_0^{\infty} r^{1/2} e^{-mr} dr + R^2 \int_R^{\infty} r^{-3/2} e^{-mr} dr \right) \leq A_1 + A_2 R^{1/2} m^{1/2} e^{-mR}
\end{aligned} \tag{A.4}$$

Sobald wir die Integration über z ausführen, werden wir sehen, dass der zweite Term für $m \rightarrow 0$ verschwindet.

II: $R \leq |z| \leq 2R$, $|y| \geq 2R$. Wir unterscheiden zwei Fälle.

1. $2R \leq |y| \leq 3R$.

$$\begin{aligned}
I &\leq A \int_{2R \leq y \leq 3R} dy |y-z|^{-3} = A \int_{2R}^{3R} dr r^2 \int_{-1}^1 du (r^2 + |z|^2 - 2r|z|u)^{-3/2} \\
&= A |z|^{-1} \int_{2R}^{3R} dr r \left(\frac{1}{r-|z|} - \frac{1}{r+|z|} \right) = A \log \left(1 + \frac{5R^2}{4R^2 - |z|^2} \right) \\
&\leq A \left(1 - \log \left(2 - \frac{|z|}{R} \right) \right)
\end{aligned} \tag{A.5a}$$

2. $|y| \geq 3R$. Man erhält wie in Region I

$$I \leq A_1 + A_2 R^{1/2} m^{1/2} e^{-m(3R-|z|)} \leq A_1 + A_2 R^{1/2} m^{1/2} e^{-mR}, \tag{A.5b}$$

spricht einen konstanten Term sowie einen Term, der für $m \rightarrow 0$ verschwindenden wird.

III: $|z| \leq R$, $R \leq |y| \leq 2R$.

$$\begin{aligned}
I &\leq Am^{2-2} \int_R^{2R} dr r^2 \int_{-1}^1 du (r^2 + |z|^2 - 2r|z|u)^{-3/2} = A \int_R^{2R} dr \frac{r^2}{r|z|} \left(\frac{1}{r-|z|} - \frac{1}{r+|z|} \right) \\
&= A \int_R^{2R} dr \frac{r}{r^2 - |z|^2} \leq A \left(1 - \log \left(1 - \frac{|z|}{R} \right) \right)
\end{aligned} \tag{A.6}$$

IV: $R \leq |z| \leq 2R$, $R \leq |y| \leq 2R$. Um diese Fehler kümmern wir uns, wenn wir zur z -Integration kommen.

V: $R \leq |z| \leq 2R$, $|y| \leq R$.

$$\begin{aligned}
I &\leq A \int_{|y| \leq R} dy |y - z|^{-3} = A \int_0^R dr r^2 \int_{-1}^1 du (r^2 + |z|^2 - 2r|z|u)^{-3/2} \\
&= A \int_0^R dr \frac{r}{|z|} \left(\frac{1}{|z| - r} - \frac{1}{|z| + r} \right) = A |z|^{-1} \int_0^R dr \frac{r^2}{|z|^2 - r^2} \leq A \left(1 - \log \left(\frac{|z|}{R} - 1 \right) \right)
\end{aligned} \tag{A.7}$$

VI: $|z| \geq 2R$, $|y| \leq R$. Diese Region wird ähnlich wie I behandelt.

$$\begin{aligned}
I &\leq Am^{\frac{3}{2}} e^{-m|z|} \int_{|y| \leq R} \frac{e^{m|y|}}{|y - z|^{\frac{3}{2}}} dy = Am^{\frac{3}{2}} e^{-m|z|} \int_0^R dr r^2 e^{mr} \int_{-1}^1 du (r^2 + |z|^2 - 2r|z|u)^{-\frac{3}{4}} \\
&= Am^{\frac{3}{2}} e^{-m|z|} |z|^{-1} \int_0^R dr r e^{mr} \left(\sqrt{|z| + r} - \sqrt{|z| - r} \right) \\
&\leq A \frac{e^{-m|z|} (-2 + e^{mR} (2 - 2mR + m^2 R^2))}{m^{\frac{3}{2}} |z|^{\frac{3}{2}}}
\end{aligned} \tag{A.8}$$

Hierbei haben wir $\sqrt{|z| + r} - \sqrt{|z| - r} \leq Ar|z|^{-1/2}$ abgeschätzt. Für $m \rightarrow 0$ verhält sich die rechte Seite wie $R^3 m^{3/2} |z|^{-3/2}$.

VII: $|z| \geq 2R$, $R \leq |y| \leq 2R$. Wir unterscheiden wieder zwei Fälle.

1. $2R \leq |z| \leq 3R$.

$$\begin{aligned}
I &\leq A \int_{R \leq |y| \leq 2R} \frac{dy}{|y - z|^3} = A \int_R^{2R} dr r^2 \int_{-1}^1 du (r^2 + |z|^2 - 2r|z|u)^{-3/2} \\
&= A \int_R^{2R} dr \frac{r}{|z|} \left(\frac{1}{|z| - r} - \frac{1}{|z| + r} \right) = A |z|^{-1} \int_R^{2R} dr \frac{r^2}{|z|^2 - r^2} \\
&\leq A \left(-\frac{R}{|z|} + \log \left(1 - \frac{2R|z|}{(2R - |z|)(R + |z|)} \right) \right) \leq A \left(1 - \log \left(\frac{|z|}{2R} - 1 \right) \right)
\end{aligned} \tag{A.9a}$$

2. $|z| \geq 3R$. Wir gehen analog wie in Region I vor.

$$\begin{aligned}
I &\leq Am^{\frac{3}{2}} \int_{R \leq |y| \leq 2R} dy \frac{e^{-m|y-z|}}{|y-z|^{\frac{3}{2}}} = Am^{\frac{3}{2}} \int_R^{2R} dr r^2 \int_{-1}^1 du \frac{\exp\left(-m\sqrt{r^2 + |z|^2 - 2r|z|u}\right)}{(r^2 + |z|^2 - 2r|z|u)^{\frac{3}{4}}} \\
&= Am^{3/2} |z|^{-1} \int_R^{2R} dr r \int_{(|z|-r)^2}^{(|z|+r)^2} du \frac{e^{-m\sqrt{u}}}{u^{3/4}} \\
&\leq Am^{3/2} |z|^{-1} \int_R^{2R} dr r \left[(|z|+r)^2 - (|z|-r)^2 \right] \frac{e^{-m(|z|-r)}}{(|z|-r)^{3/2}} \\
&= Am^{3/2} \int_{R-|z|}^{2R-|z|} (r+|z|)^2 \frac{e^{mr}}{(-r)^{3/2}} dr = Am^{3/2} \int_{|z|-2R}^{|z|-R} dr (|z|-r)^2 \frac{e^{-mr}}{r^{3/2}} dr \\
&\leq Am^2 \int_{m(|z|-2R)}^{m(|z|-R)} \left[r^{1/2} m^{-2} + \frac{|z|^2}{r^{3/2}} \right] e^{-r} dr \\
&\leq \int_0^\infty dr r^{1/2} e^{-r} + \frac{m^2 |z|^2}{m^{3/2} (|z|-2R)^{3/2}} \int_0^\infty dr e^{-r} \leq A_1 + A_2 m^{1/2} |z|^{1/2}
\end{aligned} \tag{A.9b}$$

A.1.2 Das z -Integral

Als Nächstes integrieren wir die Ergebnisse der y -Integration noch über z mit $V(z) = |z|^{-1}$. Ähnlich wie eben untersuchen wir die verschiedenen Regionen separat.

I: $|x| \geq R$, $|z| \leq R$, $|y| \geq 2R$. Es verbleibt

$$[A_1 + A_2 R^{1/2} m^{1/2} e^{-mR}] m^2 \int dz V(z) \frac{K_2(m|x-z|)}{|x-z|} |\chi_R(x) - \chi_R(z)| \tag{A.10}$$

abzuschätzen.

1. $R \leq |x| \leq 2R$.

$$\begin{aligned}
[A_1 + A_2 R^{1/2} m^{1/2} e^{-mR}]^{-1} L(x) &\leq A \int_0^R dr r \int_{-1}^1 \frac{du}{(r^2 + |x|^2 - 2r|x|u)^{3/2}} \\
&= A |x|^{-1} \int_0^R dr \left(\frac{1}{|x|-r} - \frac{1}{|x|+r} \right) = A |x|^{-1} \int_0^R dr \frac{r}{|x|^2 - r^2} \\
&= AR^{-1} \frac{R}{|x|} \int_0^{R/|x|} dr \frac{r}{1-r^2} = -AR^{-1} \frac{R}{|x|} \log \left(1 - \frac{R^2}{|x|^2} \right) \equiv R^{-1} F(|x|/R)
\end{aligned} \tag{A.11a}$$

Für $|x| \searrow R$ verhält sich $F(|x|/R)$ wie $\log(2|x|/R - 2)$, hat also nur eine logarithmische Divergenz, ist aber sonst stetig. Daher kann $F(|x|/R)$ in die Daubechies-Ungleichung eingesetzt werden.

2. $|x| \geq 2R$.

$$\begin{aligned}
[A_1 + A_2 R^{\frac{1}{2}} m^{\frac{1}{2}} e^{-mR}]^{-1} L(x) &\leq A m^{\frac{3}{2}} \int_0^R dr r \int_{-1}^1 du \frac{\exp\left(-m\sqrt{r^2 + |x|^2 - 2r|x|u}\right)}{(r^2 + |x|^2 - 2r|x|u)^{\frac{3}{4}}} \\
&\leq A m^{3/2} |x|^{-1} \int_0^R dr \left[\sqrt{|x| + r} - \sqrt{|x| - r} \right] e^{-m(|x|-r)} \leq A \frac{m^{\frac{3}{2}}}{|x|^{\frac{3}{2}}} \int_0^R dr r e^{-m(|x|-r)} \\
&= A \frac{m^{\frac{3}{2}}}{|x|^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{e^{-m|x|} [1 + e^{mR}(mR - 1)]}{m^{1/2}}
\end{aligned} \tag{A.11b}$$

In führender Ordnung verhält sich dieser Fehler wie m^2 , verschwindet also im Grenzwert $m \rightarrow 0$. Man sieht, dass der $A_2 R^{1/2} m^{1/2} e^{-mR}$ -Term für $m \rightarrow 0$ somit nicht zum Lokalisierungsfehler beiträgt. Andererseits verschwindet der Fehler für festes $m > 0$ exponentiell schnell, wenn $R \rightarrow \infty$.

II.(i): $R \leq |z| \leq 2R$, $2R \leq |y| \leq 3R$.

1. $|x| \leq R$.

$$\begin{aligned}
L(x) &\leq A \int_{R \leq |z| \leq 2R} dz |z|^{-1} |x - z|^{-3} \left(1 - \log \left(2 - \frac{|z|}{R} \right) \right) \\
&= A \int_R^{2R} dr r \left(1 - \log \left(2 - \frac{r}{R} \right) \right) \int_{-1}^1 \frac{du}{(r^2 + |x|^2 - 2r|x|u)^{3/2}} \\
&= A |x|^{-1} \int_R^{2R} dr \left(\frac{1}{r - |x|} - \frac{1}{r + |x|} \right) \left(1 - \log \left(2 - \frac{r}{R} \right) \right) \\
&= AR^{-1} \frac{R}{|x|} \left[\log \frac{(2R - |x|)(R + |x|)}{(R - |x|)(2R + |x|)} + \left(\text{Li}_2 \left(\frac{1}{2 - |x|/R} \right) - \text{Li}_2 \left(\frac{1}{2 + |x|/R} \right) \right) \right] \\
&\equiv R^{-1} F(|x|/R),
\end{aligned} \tag{A.12a}$$

wobei Li_2 den Dilogarithmus

$$\text{Li}_2(x) = - \int_0^x \frac{\log(1-t)}{t} dt$$

bezeichnet [137, Formel 27.7.1]. Wir zeigen am Beispiel des Summanden $(r - |x|)^{-1} \log(2 - r/R)$ wie dieser zu Stande kommt. Den anderen Summanden erhält man analog. Durch Skalieren $r \mapsto Rr$ ist ersichtlich, dass es genügt, $R = 1$ zu betrachten. Mit der Definition von $\text{Li}_2(x)$ sowie $w := 2 - |x| \in [1, 2]$, $(w - 1)/w \in [0, 1/2]$ und $1 - (w - 1)/w = 1/w \in$

$[1/2, 1]$ erhält man

$$\begin{aligned}
& - \int_1^{2^2} \frac{\log(2-r)}{r-|x|} dr = - \int_{w-1}^w \frac{\log(w-r)}{r} dr = - \int_{(w-1)/w}^1 \frac{\log(w(1-r))}{r} dr \\
& = \log(w) \cdot \log\left(\frac{w-1}{w}\right) + \text{Li}_2(1) - \text{Li}_2\left(\frac{w-1}{w}\right) \\
& = \log(w) \cdot \log\left(\frac{w-1}{w}\right) + \text{Li}_2(1) \\
& \quad - \left(\text{Li}_2(1) - \log\left(\frac{w-1}{w}\right) \cdot \log\left(\frac{1}{w}\right) - \text{Li}_2(1/w) \right) \\
& = \text{Li}_2(1/w) = \text{Li}_2(1/(2-|x|)),
\end{aligned}$$

wobei wir Eulers Reflexionsformel (beziehungsweise die Abel-Identität [1])

$$\text{Li}_2(z) + \text{Li}_2(1-z) = \text{Li}_2(1) - \log(z) \log(1-z)$$

für $z \in [1/2, 1]$ mit $z = (w-1)/w$ in der vorletzten Gleichheit verwendet haben.

Der erste Summand in der vorletzten Gleichheit von (A.12a) verhält sich bei $|x| = R$ wie $\log(2R/(3(R-|x|)))$, divergiert also logarithmisch und ist sonst stetig. Der zweite Summand ist hingegen eine beschränkte Funktion, die bei $|x| = R$ maximal wird und dort den Wert $(\pi^2 - 6\text{Li}_2(1/3))/6 \approx 1,28$ annimmt. Insbesondere verhält sich die rechte Seite wie R^{-1} für $|x| \searrow 0$.

2. $R \leq |x| \leq 2R$. Mit dem Mittelwertsatz erhält man

$$\begin{aligned}
L(x) & \leq AR^{-1} \int_{R \leq |z| \leq 2R} dz |z|^{-1} |x-z|^{-2} \left(1 - \log\left(2 - \frac{|z|}{R}\right) \right) \\
& = AR^{-1} \int_R^{2R} dr r \left(1 - \log\left(2 - \frac{r}{R}\right) \right) \int_{-1}^1 \frac{du}{r^2 + |x|^2 - 2r|x|u} \\
& = AR^{-1} |x|^{-1} \int_R^{2R} dr \log\left(\frac{(r+|x|)^2}{(r-|x|)^2}\right) \left(1 - \log\left(2 - \frac{r}{R}\right) \right) \\
& \leq AR^{-1} \int_{R/|x|}^{2R/|x|} dr \log\left(\frac{(r+1)^2}{(r-1)^2}\right) \left(1 - \log\left(2 - \frac{r|x|}{R}\right) \right) \leq AR^{-1}.
\end{aligned} \tag{A.12b}$$

Tatsächlich kann der erste Summand der rechten Seite wieder explizit berechnet werden und ist gerade

$$AR^{-1} \left[\frac{R}{|x|} \left(2 \log\left(\frac{4R}{2R-|x|} - 1\right) + \log\left(1 - \frac{2R}{R+|x|}\right) \right) + \log\left(\frac{4R^2 - |x|^2}{|x|^2 - R^2}\right) \right].$$

Der Ausdruck in eckigen Klammern ist bei $|x| \approx 1,6R$ maximal und durch ca. 2,8 beschränkt. Dies kann auch direkt gesehen werden, da $\log((r+1)^2(r-1)^{-2})$ integrierbar ist und daher das Integral eine auf $[1, 2]$ beschränkte, stetige Funktion von $|x|/R$ ergibt. Analog verhält es sich mit dem zweiten Summanden, da auch das Produkt mit $\log(2 - r|x|/R)$ für jedes $|x| \in [R, 2R]$ integrierbar ist.

3. $2R \leq |x| \leq 3R$.

$$\begin{aligned}
L(x) &\leq A \int_{R \leq |z| \leq 2R} dz |z|^{-1} |x-z|^{-3} \left(1 - \log \left(2 - \frac{|z|}{R}\right)\right) \\
&= A \int_R^{2R} dr r \int_{-1}^1 \left(1 - \log \left(2 - \frac{r}{R}\right)\right) \frac{du}{(r^2 + |x|^2 - 2r|x|u)^{3/2}} \\
&= A|x|^{-1} \int_R^{2R} dr \left(\frac{1}{|x|-r} - \frac{1}{r+|x|}\right) \left(1 - \log \left(2 - \frac{r}{R}\right)\right) \\
&= A|x|^{-1} \int_R^{2R} dr \frac{r}{|x|^2 - r^2} \left(1 - \log \left(2 - \frac{r}{R}\right)\right) \\
&= AR^{-1} \frac{R}{|x|} \left[\left(\log(|x|-R) - \log(2R-|x|) + \log \left(\frac{(2R-|x|)(R+|x|)}{(2R+|x|)(R-|x|)}\right)\right) \right. \\
&\quad \left. - \left(\text{Li}_2 \left(\frac{1}{2-|x|/R}\right) + \text{Li}_2 \left(\frac{1}{2+|x|/R}\right)\right) \right] \\
&\equiv R^{-1} F(|x|/R)
\end{aligned} \tag{A.12c}$$

Hierbei hat $F(|x|/R)$ eine logarithmische Singularität bei $|x| = 2R$ und ist ansonsten stetig. Nach Wood [182, Formel (11.3)] verhält sich $\text{Li}_2(1/(2-|x|/R))$ (beziehungsweise $\text{Li}_2(1/(2-|x|/R)) + \text{Li}_2(1/(2+|x|/R))$) dort wie $\log^2(|x|/R - 2)$.

4. $|x| \geq 3R$.

$$\begin{aligned}
L(x) &\leq Am^{3/2} \int_{R \leq |z| \leq 2R} dz |z|^{-1} |x-z|^{-3/2} e^{-m|x-z|} \left(1 - \log \left(2 - \frac{|z|}{R}\right)\right) \\
&\leq Am^{-1/2} R^{-3/2} e^{-m|x|} \int_{mR}^{2mR} dr r e^r \left(1 - \log \left(2 - \frac{r}{mR}\right)\right) \\
&\leq A \left[m^{-1/2} R^{-3/2} e^{-m|x|} (1 - e^{2mR} + 2mR e^{2mR}) + m^{3/2} R^{1/2} e^{2mR} e^{-m|x|} \right]
\end{aligned} \tag{A.12d}$$

Hierbei haben wir

$$\begin{aligned}
&- m^{-1/2} R^{-3/2} e^{-m|x|} \int_{mR}^{2mR} dr r e^r \log \left(2 - \frac{r}{mR}\right) \\
&\leq -2m^{1/2} R^{-1/2} e^{2mR} e^{-m|x|} \int_{mR}^{2mR} dr \log \left(2 - \frac{r}{mR}\right) = 2m^{3/2} R^{1/2} e^{2mR} e^{-m|x|}
\end{aligned}$$

abgeschätzt. Dieser Fehler verschwindet im Grenzwert $m \rightarrow 0$. Andererseits verschwindet er für festes $m > 0$ exponentiell schnell, wenn $R \rightarrow \infty$ (da $|x| \geq 3R$).

Der Punkt dieser Rechnungen ist, dass die rechte Seite höchstens quadratische logarithmische Singularitäten bei $|x| = R$ und $|x| = 2R$ haben kann (welche immer noch integrierbar sind, selbst wenn sie zu höheren Potenzen genommen werden), da zusätzliche Faktoren wie $\log(2 - r/R)$ integrierbar sind. Wir werden daher von nun an ähnliche Rechnungen (die noch in den Regionen III, V und VII vorkommen) nicht mehr explizit ausführen, sondern nur auf die logarithmischen Singularitäten in $|x|$ hinweisen.

II.(ii): $R \leq |z| \leq 2R$, $|y| \geq 3R$. Es verbleibt

$$[A_1 + A_2 R^{1/2} m^{1/2} e^{-mR}] m^2 \int_{R \leq |z| \leq 2R} dz V(z) \frac{K_2(m|x-z|)}{|x-z|} |\chi_R(x) - \chi_R(z)| \quad (\text{A.13})$$

abzuschätzen.

1. $|x| \leq R$.

$$\begin{aligned} [A_1 + A_2 R^{1/2} m^{1/2} e^{-mR}]^{-1} L(x) &\leq A \int_{R \leq |z| \leq 2R} \frac{dz}{|z| |x-z|^3} \\ &= A \int_R^{2R} dr r \int_{-1}^1 \frac{du}{(r^2 + |x|^2 - 2r|x|u)^{3/2}} = A |x|^{-1} \int_R^{2R} dr \left(\frac{1}{r-|x|} - \frac{1}{r+|x|} \right) \\ &= A \int_R^{2R} \frac{dr}{r^2 - |x|^2} = AR^{-1} \frac{R}{|x|} \log \left(\frac{(2R-|x|)(R+|x|)}{(R-|x|)(2R+|x|)} \right) \equiv R^{-1} F(|x|/R), \end{aligned} \quad (\text{A.14a})$$

wobei sich $F(|x|/R)$ bei $|x| = R$ wie $\log(2R/(3(R-|x|)))$ verhält, also logarithmisch divergiert und sonst stetig ist. Insbesondere ist die rechte Seite (modulo einer Konstanten) durch R^{-1} beschränkt, wenn $|x| \searrow 0$.

2. $R \leq |x| \leq 2R$.

$$\begin{aligned} [A_1 + A_2 R^{1/2} m^{1/2} e^{-mR}]^{-1} L(x) &\leq AR^{-1} \int_{R \leq |z| \leq 2R} \frac{dz}{|z| |x-z|^2} \\ &= AR^{-1} \int_R^{2R} dr r \int_{-1}^1 \frac{du}{r^2 + |x|^2 - 2r|x|u} = AR^{-1} |x|^{-1} \int_R^{2R} dr \log \left(\frac{(|x|+r)^2}{(|x|-r)^2} \right) \\ &\leq AR^{-1} \int_{R/|x|}^{2R/|x|} dr \log \left(\frac{(r+1)^2}{(r-1)^2} \right) \leq AR^{-1} \end{aligned} \quad (\text{A.14b})$$

3. $2R \leq |x| \leq 3R$.

$$\begin{aligned} [A_1 + A_2 R^{1/2} m^{1/2} e^{-mR}]^{-1} L(x) &\leq A \int_{R \leq |z| \leq 2R} \frac{dz}{|z| |x-z|^3} \\ &\leq A \int_R^{2R} dr r \int_{-1}^1 du (r^2 + |x|^2 - 2r|x|u)^{-3/2} \\ &= A |x|^{-1} \int_R^{2R} dr \left(\frac{1}{r-|x|} - \frac{1}{r+|x|} \right) = A \int_R^{2R} \frac{dr}{(|x|^2 - r^2)} \\ &= AR^{-1} \frac{R}{|x|} \log \left(1 - \frac{2R|x|}{(2R-|x|)(R+|x|)} \right) \equiv R^{-1} F(|x|/R), \end{aligned} \quad (\text{A.14c})$$

wobei sich $F(|x|/R)$ bei $|x| = 2R$ wie $\log(4/(3(|x|-2R)))$ verhält, also logarithmisch divergiert und ansonsten stetig ist.

4. $|x| \geq 3R$.

$$\begin{aligned} [A_1 + A_2 R^{1/2} m^{1/2} e^{-mR}]^{-1} L(x) &\leq Am^{3/2} \int_{R \leq |z| \leq 2R} dz |z|^{-1} |x-z|^{-3/2} e^{-m|x-z|} \\ &\leq Am^{3/2} R^{-3/2} e^{-m|x|} \int_{R \leq |z| \leq 2R} dz |z|^{-1} e^{m|z|} \leq Am^{1/2} R^{-1/2} (e^{2mR} - e^{mR}) e^{-m|x|} \end{aligned} \quad (\text{A.14d})$$

Dieser Fehler verschwindet im Grenzwert $m \rightarrow 0$. Andererseits verschwindet er für festes $m > 0$ exponentiell schnell, wenn $R \rightarrow \infty$.

III: $|z| \leq R$, $R \leq |y| \leq 2R$. Wir müssen nur noch

$$m^2 \int_{|z| \leq R} dz V(z) \frac{K_2(m|x-z|)}{|x-z|} \left(1 - \log \left(1 - \frac{|z|}{R}\right)\right) \quad (\text{A.15})$$

betrachten.

1. $R \leq |x| \leq 2R$.

$$\begin{aligned} L(x) &\leq A \int_{|z| \leq R} dz |z|^{-1} |x-z|^{-3} \left(1 - \log \left(1 - \frac{|z|}{R}\right)\right) \\ &= A \int_0^R dr r \left(1 - \log \left(1 - \frac{r}{R}\right)\right) \int_{-1}^1 du (r^2 + |x|^2 - 2r|x|u)^{-3/2} \\ &= A|x|^{-1} \int_0^R dr \left(\frac{1}{|x|-r} - \frac{1}{|x|+r}\right) \left(1 - \log \left(1 - \frac{r}{R}\right)\right) \\ &= A|x|^{-1} \int_0^R dr \frac{r}{|x|^2 - r^2} \left(1 - \log \left(1 - \frac{r}{R}\right)\right) \equiv R^{-1} F(|x|/R), \end{aligned} \quad (\text{A.16a})$$

wobei $F(|x|/R)$ eine logarithmische Singularität bei $|x| = R$ hat und ansonsten stetig ist.

2. $|x| \geq 2R$.

$$\begin{aligned} L(x) &\leq Am^{3/2} \int_{|z| \leq R} \frac{e^{-m|x-z|}}{|z||x-z|^{3/2}} \left(1 - \log \left(1 - \frac{|z|}{R}\right)\right) dz \\ &\leq Am^{-1/2} R^{-3/2} e^{-m|x|} \int_0^{mR} dr r e^r \left(1 - \log \left(1 - \frac{r}{mR}\right)\right) \\ &\leq A \left[m^{-1/2} R^{-3/2} e^{-m|x|} (1 - e^{mR} + mR e^{mR}) + m^{3/2} R^{1/2} e^{mR} e^{-m|x|} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.16b})$$

Dieser Fehler verschwindet im Grenzwert $m \rightarrow 0$. Andererseits verschwindet er für festes $m > 0$ exponentiell schnell, wenn $R \rightarrow \infty$.

IV: $R \leq |z| \leq 2R$, $R \leq |y| \leq 2R$. In allen kommenden Integralen skalieren wir $(y, z) \mapsto R(y, z)$. Wir betrachten zunächst das Hilfsintegral (mit den reskalierten Größen $1 \leq |y| \leq 2$ und $1 \leq |z| \leq 2$)

$$\begin{aligned} \int_{1 \leq |y| \leq 2} \frac{dy}{|y-z|^2} &= A \int_1^2 dr r^2 \int_{-1}^1 \frac{du}{r^2 + |z|^2 - 2r|z|u} \\ &= A|z|^{-1} \int_1^2 dr r [\log((r+|z|)^2) - \log((r-|z|)^2)] \leq A|z|^{-1}, \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

wobei wir in der letzten Ungleichung die Tatsache verwendet haben, dass $\log((r-|z|)^2)$ immer noch integrierbar ist.

1. $|x| \leq R$.

$$\begin{aligned} L(x) &\leq AR^{-1} \int_{1 \leq |z| \leq 2} dz |z|^{-1} \left| \frac{x}{R} - z \right|^{-3} \int_{1 \leq |y| \leq 2} dy |y-z|^{-2} \\ &\leq AR^{-1} \int_{1 \leq |z| \leq 2} dz |z|^{-2} \left| \frac{x}{R} - z \right|^{-3} = AR^{-1} \int_1^2 dr \frac{1}{r(|x|/R)} \left(\frac{1}{r - \frac{|x|}{R}} - \frac{1}{\frac{|x|}{R} + r} \right) \\ &= AR^{-1} \int_1^2 \frac{dr}{r(r^2 - (|x|/R)^2)} = AR^{-1} \frac{R^2}{|x|^2} \log \left(\frac{4R^2 - |x|^2}{4(R^2 - |x|^2)} \right) \equiv R^{-1} F(|x|/R) \end{aligned} \quad (\text{A.18a})$$

Für $|x| \rightarrow 0$ ist $F(|x|/R) \leq 3/8$ und für $|x| \rightarrow R$ verhält sich $F(|x|/R)$ wie $\log(3R/8((R-|x|)))$, hat also eine logarithmische Divergenz.

2. $R \leq |x| \leq 2R$. Wir verwenden zwei mal den Mittelwertsatz sowie zweimal (A.17) und erhalten

$$\begin{aligned} L(x) &\leq AR^{6-3-4} \int_{1 \leq |z| \leq 2} dz |z|^{-1} \left| \frac{x}{R} - z \right|^{-2} \int_{1 \leq |y| \leq 2} dy |y-z|^{-2} \\ &\leq AR^{-1} \int_{1 \leq |z| \leq 2} dz \left| \frac{x}{R} - z \right|^{-2} \leq AR^{-1} \cdot \frac{R}{|x|} \leq AR^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{A.18b})$$

3. $2R \leq |x| \leq 3R$. Mit dem Hilfsintegral (A.17) ist

$$\begin{aligned} L(x) &\leq AR^{-1} \int_{1 \leq |z| \leq 2} dz |z|^{-1} \left| \frac{x}{R} - z \right|^{-3} \int_{1 \leq |y| \leq 2} dy |y-z|^{-2} \\ &\leq AR^{-1} \int_{1 \leq |z| \leq 2} dz |z|^{-2} \left| \frac{x}{R} - z \right|^{-3} = AR^{-1} \int_1^2 dr \frac{1}{r(|x|/R)} \left(\frac{1}{\frac{|x|}{R} - r} - \frac{1}{\frac{|x|}{R} + r} \right) \\ &= AR^{-1} \frac{R}{|x|} \int_1^2 \frac{dr}{\frac{|x|^2}{R^2} - r^2} = AR^{-1} \frac{R^2}{|x|^2} \log \left(1 + \frac{2R|x|}{(|x| - 2R)(R + |x|)} \right) \\ &\equiv R^{-1} F(|x|/R), \end{aligned} \quad (\text{A.18c})$$

wobei $F(|x|/R)$ lediglich eine logarithmische Singularität bei $|x| = 2R$ hat, sich dort wie $\log(4R/(3(|x| - 2R)))$ verhält und ansonsten stetig ist.

4. $|x| \geq 3R$.

$$\begin{aligned} L(x) &\leq Am^{3/2}R^{6-3-2-\frac{1}{2}} \int_{1 \leq |z| \leq 2} dz |z|^{-1} \left| \frac{x}{R} - z \right|^{-\frac{3}{2}} e^{-m|x-Rz|} \int_{1 \leq |y| \leq 2} dy |y-z|^{-2} \\ &\leq Am^{3/2}R^{1/2}e^{-m|x|} \int_{1 \leq |z| \leq 2} dz |z|^{-2} e^{mR|z|} = Am^{1/2}R^{1/2}(e^{2mR} - e^{mR})e^{-m|x|} \end{aligned} \quad (\text{A.18d})$$

Dieser Fehler verschwindet im Grenzwert $m \rightarrow 0$. Andererseits verschwindet er für festes $m > 0$ exponentiell schnell, wenn $R \rightarrow \infty$.

V: $R \leq |z| \leq 2R$, $|y| \leq R$. Es verbleibt

$$m^2 \int_{R \leq |z| \leq 2R} dz V(z) \frac{K_2(m|x-z|)}{|x-z|} |\chi_R(x) - \chi_R(z)| \left(1 - \log \left(\frac{|z|}{R} - 1 \right) \right) \quad (\text{A.19})$$

zu betrachten.

1. $|x| \leq R$.

$$\begin{aligned} L(x) &\leq A \int_{R \leq |z| \leq 2R} dz |z|^{-1} |x-z|^{-3} \left(1 - \log \left(\frac{|z|}{R} - 1 \right) \right) \\ &\leq A \int_R^{2R} dr r \left(1 - \log \left(\frac{r}{R} - 1 \right) \right) \int_{-1}^1 du (r^2 + |x|^2 - 2r|x|u)^{-3/2} \\ &= A|x|^{-1} \int_R^{2R} dr \left(\frac{1}{r-|x|} - \frac{1}{r+|x|} \right) \left(1 - \log \left(\frac{r}{R} - 1 \right) \right) \\ &= A \int_R^{2R} \frac{dr}{(r^2 - |x|^2)} \left(1 - \log \left(\frac{r}{R} - 1 \right) \right) \equiv R^{-1}F(|x|/R), \end{aligned} \quad (\text{A.20a})$$

wobei $F(|x|/R)$ bei $|x| = R$ logarithmisch divergiert und ansonsten stetig ist. Insbesondere verhält sich die rechte Seite wie R^{-1} für $|x| \searrow 0$.

2. $R \leq |x| \leq 2R$. Mit dem Mittelwertsatz erhält man

$$\begin{aligned} L(x) &\leq AR^{-1} \int_{R \leq |z| \leq 2R} dz |z|^{-1} |x-z|^{-2} \left(1 - \log \left(\frac{|z|}{R} - 1 \right) \right) \\ &= AR^{-1} \int_R^{2R} dr r \left(1 - \log \left(\frac{r}{R} - 1 \right) \right) \int_{-1}^1 du (r^2 + |x|^2 - 2r|x|u)^{-1} \\ &= AR^{-1}|x|^{-1} \int_R^{2R} dr \log \left(\frac{(r+|x|)^2}{(r-|x|)^2} \right) \left(1 - \log \left(\frac{r}{R} - 1 \right) \right) \\ &= AR^{-1} \int_{R/|x|}^{2R/|x|} dr \log \left(\frac{(r+1)^2}{(r-1)^2} \right) \left(1 - \log \left(\frac{r|x|}{R} - 1 \right) \right) \leq AR^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{A.20b})$$

Dieses Integral ist ähnlich zu dem in Region II.(i).(2).

3. $2R \leq |x| \leq 3R$. Analog zu (1) erhalten wir hier

$$\begin{aligned} L(x) &\leq A|x|^{-1} \int_R^{2R} dr \left(\frac{1}{|x| - r} - \frac{1}{|x| + r} \right) \left(1 - \log \left(\frac{r}{R} - 1 \right) \right) \\ &= A|x|^{-1} \int_R^{2R} dr \frac{r}{|x|^2 - r^2} \left(1 - \log \left(\frac{r}{R} - 1 \right) \right) \equiv R^{-1} F(|x|/R), \end{aligned} \quad (\text{A.20c})$$

wobei $F(|x|/R)$ bei $|x| = 2R$ eine logarithmische Singularität hat und ansonsten stetig ist.

4. $|x| \geq 3R$.

$$\begin{aligned} L(x) &\leq Am^{3/2} R^{-3/2} e^{-m|x|} \int_{R \leq |z| \leq 2R} dz |z|^{-1} e^{m|z|} \left(1 - \log \left(\frac{|z|}{R} - 1 \right) \right) \\ &\leq A \left[m^{1/2} R^{-1/2} (e^{2mR} - e^{mR}) e^{-m|x|} + m^{3/2} R^{1/2} e^{2mR} e^{-m|x|} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.20d})$$

Dieser Fehler verschwindet im Grenzwert $m \rightarrow 0$. Andererseits verschwindet er für festes $m > 0$ exponentiell schnell, wenn $R \rightarrow \infty$.

VI: $|z| \geq 2R$, $|y| \leq R$. Es verbleibt

$$\begin{aligned} &m^{\frac{1}{2}} \left[-2 + e^{mR}(2 - 2mR + m^2 R^2) \right] \int_{|z| \geq 2R} dz V(z) |z|^{-\frac{3}{2}} e^{-m|z|} \frac{K_2(m|x-z|)}{|x-z|} |\chi_R(x) - \chi_R(z)| \\ &\leq m^{\frac{1}{2}} R^{-\frac{3}{2}} \left[-2 + e^{mR}(2 - 2mR + m^2 R^2) \right] \\ &\quad \int_{|z| \geq 2R} dz V(z) e^{-m|z|} \frac{K_2(m|x-z|)}{|x-z|} |\chi_R(x) - \chi_R(z)| \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

zu betrachten.

1. $|x| \leq R$.

$$\begin{aligned} L(x) &\leq AR^{-\frac{3}{2}} \left[-2 + e^{mR}(2 - 2mR + m^2 R^2) \right] \int_{|z| \geq 2R} dz |z|^{-1} |x-z|^{-\frac{3}{2}} e^{-m|z|} e^{-m|x-z|} \\ &\leq AR^{-3} \left[-2 + e^{mR}(2 - 2mR + m^2 R^2) \right] e^{m|x|} \int_{|z| \geq 2R} dz |z|^{-1} e^{-2m|z|} \\ &= AR^{-3} m^{-2} (1 + 4mR) \left[-2 + e^{mR}(2 - 2mR + m^2 R^2) \right] e^{-4mR} e^{m|x|} \end{aligned} \quad (\text{A.22a})$$

2. $R \leq |x| \leq 2R$ und $2R \leq |z| \leq 3R$.

$$\begin{aligned}
& [-2 + e^{mR}(2 - 2mR + m^2R^2)]^{-1} L(x) \\
& \leq Am^{-3/2}R^{-3/2} \int_{2R \leq |z| \leq 3R} dz |z|^{-1}|x-z|^{-3}e^{-m|z|} \\
& = Am^{-3/2}R^{-3/2} \int_{2R}^{3R} dr re^{-mr} \int_{-1}^1 du (r^2 + |x|^2 - 2r|x|u)^{-3/2} \\
& = Am^{-3/2}R^{-3/2}|x|^{-1} \int_{2R}^{3R} dr \left(\frac{1}{r-|x|} - \frac{1}{r+|x|} \right) e^{-mr} \tag{A.22b} \\
& \leq Am^{-3/2}R^{-3/2}e^{-2mR} \int_{2R}^{3R} \frac{dr}{(r^2 - |x|^2)} \\
& = Am^{-3/2}R^{-3/2}e^{-2mR} \cdot R^{-1} \frac{R}{|x|} \log \left(1 + \frac{2R|x|}{(2R-|x|)(3R+|x|)} \right) \\
& = Am^{-3/2}R^{-3/2}e^{-2mR} \cdot R^{-1} F(|x|/R),
\end{aligned}$$

wobei $F(|x|/R)$ bei $|x| = 2R$ lediglich eine logarithmische Singularität hat, sich dort wie $\log(4R/(10R - 5|x|))$ verhält und ansonsten stetig ist.

3. $R \leq |x| \leq 2R$ und $|z| \geq 3R$.

$$\begin{aligned}
L(x) & \leq AR^{-3/2} [-2 + e^{mR}(2 - 2mR + m^2R^2)] \int_{|z| \geq 3R} dz |z|^{-1}|x-z|^{-3/2}e^{-m|z|}e^{-m|x-z|} \\
& \leq AR^{-3} [-2 + e^{mR}(2 - 2mR + m^2R^2)] e^{m|x|} \int_{|z| \geq 3R} dz |z|^{-1}e^{-2m|z|} \\
& = Am^{-2}R^{-3} [-2 + e^{mR}(2 - 2mR + m^2R^2)] e^{-6mR}(1 + 6mR)e^{m|x|} \tag{A.22c}
\end{aligned}$$

Die Fehler in dieser Region verschwinden im Grenzwert $m \rightarrow 0$. Andererseits verschwinden sie für festes $m > 0$ exponentiell schnell, wenn $R \rightarrow \infty$.

VII.(i): $2R \leq |z| \leq 3R$, $R \leq |y| \leq 2R$.

1. $|x| \leq R$.

$$\begin{aligned}
L(x) & \leq Am^{3/2} \int_{2R \leq |z| \leq 3R} dz \frac{e^{-m|x-z|}}{|z||x-z|^{3/2}} \left(1 - \log \left(\frac{|z|}{2R} - 1 \right) \right) \\
& \leq Am^{3/2}R^{-3/2}e^{m|x|} \int_{2R}^{3R} dr re^{-mr} \left(1 - \log \left(\frac{r}{2R} - 1 \right) \right) \tag{A.23a} \\
& \leq A \left(m^{1/2}R^{-1/2} + m^{3/2}R^{1/2} \right) e^{m(|x|-2R)}
\end{aligned}$$

Dieser Fehler verschwindet im Grenzwert $m \rightarrow 0$. Andererseits verschwindet er für festes $m > 0$ exponentiell schnell, wenn $R \rightarrow \infty$.

2. $R \leq |x| \leq 2R$.

$$\begin{aligned}
L(x) &\leq A \int_{2R \leq |z| \leq 3R} dz |z|^{-1} |x-z|^{-3} \left(1 - \log \left(\frac{|z|}{2R} - 1\right)\right) \\
&= A \int_{2R}^{3R} dr r \left(1 - \log \left(\frac{r}{2R} - 1\right)\right) \int_{-1}^1 \frac{du}{(r^2 + |x|^2 - 2r|x|u)^{3/2}} \\
&= A |x|^{-1} \int_{2R}^{3R} dr \left(\frac{1}{r-|x|} - \frac{1}{r+|x|}\right) \left(1 - \log \left(\frac{r}{2R} - 1\right)\right) \\
&= A \int_{2R}^{3R} \frac{dr}{r^2 - |x|^2} \left(1 - \log \left(\frac{r}{2R} - 1\right)\right) \equiv R^{-1} F(|x|/R),
\end{aligned} \tag{A.23b}$$

wobei $F(|x|/R)$ bei $|x| = 2R$ eine logarithmische Singularität hat und ansonsten stetig ist.

VII.(ii): $|x| \leq 2R$, $|z| \geq 3R$, $R \leq |y| \leq 2R$.

$$\begin{aligned}
L(x) &\leq Am^{3/2} \int_{|z| \geq 3R} dz \frac{e^{-m|x-z|}}{|z| |x-z|^{3/2}} (1 + \sqrt{m|z|}) \\
&= Am^{3/2} \int_{3R}^{\infty} dr r (1 + \sqrt{mr}) \int_{-1}^1 du \frac{\exp\left(-m\sqrt{r^2 + |x|^2 - 2r|x|u}\right)}{(r^2 + |x|^2 - 2r|x|u)^{3/4}} \\
&= Am^{3/2} |x|^{-1} \int_{3R}^{\infty} dr (1 + \sqrt{mr}) \int_{(r-|x|)^2}^{(r+|x|)^2} du \frac{e^{-m\sqrt{u}}}{u^{3/4}} \\
&\leq Am^{3/2} \int_{3R}^{\infty} dr r \frac{e^{-m(r-|x|)}}{(r-|x|)^{3/2}} (1 + \sqrt{mr}) \\
&= Am^2 \int_{m(3R-|x|)}^{\infty} dr (rm^{-1} + |x|) (1 + \sqrt{r+m|x|}) \frac{e^{-r}}{r^{3/2}} \\
&\leq Am \int_{mR}^{\infty} dr r^{-1/2} (1 + \sqrt{r}) e^{-r} \leq Am \left(1 + (mR)^{-1/2}\right) e^{-mR}
\end{aligned} \tag{A.24}$$

Diese Region gibt also keinen Beitrag für $m \rightarrow 0$. Andererseits verschwindet der Fehler für fixes $m > 0$ exponentiell schnell, wenn $R \rightarrow \infty$.

Für $m \rightarrow 0$, das heißt im masselosen Fall, erhält man somit von den Regionen I, II.(i)/d), II.(ii) III/b), IV/d), V/d), VI, VII.(i)/a) und VII.(ii) keinen Beitrag zum Lokalisierungsfehler. Der Beitrag setzt sich folglich nur noch aus der Summe der restlichen Terme zusammen und ist von der Form

$$R^{-1} F(|x|/R) \theta(3 - |x|/R), \tag{A.25}$$

wobei $F(|x|/R)$ lediglich logarithmische Divergenzen bei $|x| = R$ und $|x| = 2R$ hat. Diese

sind von der Form

$$\begin{aligned}
& \left[-\log\left(1 - \frac{|x|}{R}\right) - \log^2\left(1 - \frac{|x|}{R}\right) \right] \theta(R - |x|) \\
& + \left[-\log\left(1 - \frac{R}{|x|}\right) - \log^2\left(1 - \frac{R}{|x|}\right) \right. \\
& \quad \left. - \log\left(2 - \frac{|x|}{R}\right) - \log^2\left(2 - \frac{|x|}{R}\right) \right] \theta(2R - |x|)\theta(|x| - R) \\
& + \left[-\log\left(\frac{|x|}{R} - 2\right) - \log^2\left(\frac{|x|}{R} - 2\right) \right] \theta(3R - |x|)\theta(|x| - 2R).
\end{aligned} \tag{A.26}$$

Die Terme stammen von folgenden Integralen:

- Der erste Summand kam von II.(i).(1), II.(ii).(1), IV.(1) und V.(1),
- der zweite Summand von V.(1),
- der dritte Summand von I.(1) und III.(1),
- der vierte Summand von III.(1),
- der fünfte Summand von VI.(2), VII.(i).(2)
- der sechste Summand von VII.(i).(2),
- der siebte Summand von II.(ii).(3), II.(i).(3), IV.(3), V.(3) und
- der achte Summand von II.(ii).(3) und V.(3).

Andererseits erhält man für festes $m > 0$ folgende „neue“ Fehler im massiven Fall für das Lokalisierungspotential von $[h_m, \chi_R]|x|^{-1}[\chi_R, h_m]$ beziehungsweise $[\Phi_1, \chi_R]|x|^{-1}[\chi_R, \Phi_1]$.

I: $|z| \leq R$, $|y| \geq 2R$, $|x| \geq R$.

$$\begin{aligned}
& \left[1 + Am^{1/2}R^{1/2}e^{-mR} \right] \cdot \left[R^{-1} \cdot \frac{R}{|x|} \log\left(\frac{|x|^2}{|x|^2 - R^2}\right) \theta(2R - |x|)\theta(|x| - R) \right. \\
& \quad \left. + A \frac{m}{|x|^{3/2}} \cdot e^{-m|x|} (1 + e^{mR}(mR - 1))\theta(|x| - 2R) \right]
\end{aligned} \tag{A.27}$$

II.(i): $2R \leq |y| \leq 3R$, $R \leq |z| \leq 2R$.

$$\left[m^{-1/2}R^{-3/2}e^{-m|x|}(1 - e^{2mR} + 2mRe^{2mR}) + m^{3/2}R^{1/2}e^{2mR}e^{-m|x|} \right] \theta(|x| - 3R) \tag{A.28}$$

II.(ii): $|y| \geq 3R$, $R \leq |z| \leq 2R$.

$$\begin{aligned}
& \left[1 + Am^{1/2}R^{1/2}e^{-mR} \right] \cdot \left[R^{-1} \frac{R}{|x|} \log\left(\frac{(2R - |x|)(R + |x|)}{(R - |x|)(2R + |x|)}\right) \theta(R - |x|) \right. \\
& \quad + R^{-1} \theta(2R - |x|)\theta(|x| - R) \\
& \quad + R^{-1} \frac{R}{|x|} \log\left(\frac{(2R - |x|)(R + |x|)}{(R - |x|)(2R + |x|)}\right) \theta(3R - |x|)\theta(|x| - 2R) \\
& \quad \left. + m^{1/2}R^{-1/2}(e^{2mR} - e^{mR})e^{-m|x|}\theta(|x| - 3R) \right]
\end{aligned} \tag{A.29}$$

III: $R \leq |y| \leq 2R, |z| \leq R.$

$$\left[m^{-1/2} R^{-3/2} e^{-m|x|} (1 - e^{mR} + mR e^{mR}) + m^{3/2} R^{1/2} e^{m(R-|x|)} \right] \theta(|x| - 2R) \quad (\text{A.30})$$

IV: $R \leq |y| \leq 2R, R \leq |z| \leq 2R.$

$$m^{1/2} R^{1/2} (e^{2mR} - e^{mR}) e^{-m|x|} \theta(|x| - 3R) \quad (\text{A.31})$$

V: $|y| \leq R, R \leq |z| \leq 2R.$

$$\left[m^{1/2} R^{-1/2} (e^{2mR} - e^{mR}) e^{-m|x|} + m^{3/2} R^{1/2} e^{2mR} e^{-m|x|} \right] \theta(|x| - 3R) \quad (\text{A.32})$$

VI: $|y| \leq R, |z| \geq 2R.$

$$\begin{aligned} & m^{-2} R^{-3} (1 + mR) [-2 + e^{mR} (2 - 2mR + m^2 R^2)] e^{-4mR} e^{m|x|} \theta(R - |x|) \\ & + \left[m^{-\frac{3}{2}} R^{-\frac{3}{2}} [-2 + e^{mR} (2 - 2mR + m^2 R^2)] e^{-2mR} R^{-1} \frac{R}{|x|} \log \left(1 + \frac{2R|x|}{(2R - |x|)(3R + |x|)} \right) \right. \\ & \left. + m^{-2} R^{-3} (1 + 6mR) [-2 + e^{mR} (2 - 2mR + m^2 R^2)] e^{-6mR} e^{m|x|} \right] \theta(2R - |x|) \theta(|x| - R) \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

VII.(i): $R \leq |y| \leq 2R, 2R \leq |z| \leq 3R.$

$$(m^{1/2} R^{-1/2} + m^{3/2} R^{1/2}) e^{m(|x|-2R)} \theta(R - |x|) \quad (\text{A.34})$$

VII.(ii): $R \leq |y| \leq 2R, |z| \geq 3R.$

$$m(1 + (mR)^{-1/2}) e^{-mR} \theta(2R - |x|) \quad (\text{A.35})$$

Insgesamt ist der neue Fehler die Summe folgender Terme:

$$\begin{aligned} \theta(R - |x|) \left\{ R^{-1/2} e^{-mR} \cdot \frac{R}{|x|} \log \left(\frac{(2R - |x|)(R + |x|)}{(R - |x|)(2R + |x|)} \right) \right. \\ \left. + m^{-2} R^{-3} (1 + mR) [-2 + e^{mR} (2 - 2mR + m^2 R^2)] e^{-4mR} e^{m|x|} \right. \\ \left. + (m^{1/2} R^{-1/2} + m^{3/2} R^{1/2}) e^{m(|x| - 2R)} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.36a})$$

$$\theta(2R - |x|) m (1 + (mR)^{-1/2}) e^{-m(3R - |x|)} \quad (\text{A.36b})$$

$$\begin{aligned} \theta(2R - |x|) \theta(|x| - R) \left\{ 2m^{1/2} R^{1/2} e^{-mR} \cdot R^{-1} \cdot \left[\frac{R}{|x|} \log \left(\frac{|x|^2}{|x|^2 - R^2} \right) + 1 \right] \right. \\ \left. + m^{-3/2} R^{-3/2} [-2 + e^{mR} (2 - 2mR + m^2 R^2)] e^{-2mR} R^{-1} \frac{R}{|x|} \log \left(1 + \frac{2R|x|}{(2R - |x|)(3R + |x|)} \right) \right. \\ \left. + m^{-2} R^{-3} (1 + 6mR) [-2 + e^{mR} (2 - 2mR + m^2 R^2)] e^{-6mR} e^{m|x|} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.36c})$$

$$\theta(3R - |x|) \theta(|x| - 2R) \left\{ (1 + m^{1/2} R^{1/2} e^{-mR}) \cdot R^{-1} \frac{R}{|x|} \log \left(\frac{(2R - |x|)(R + |x|)}{(R - |x|)(2R + |x|)} \right) \right\} \quad (\text{A.36d})$$

$$\begin{aligned} \theta(|x| - 2R) \left\{ \left[1 + Am^{1/2} R^{1/2} e^{-mR} \right] \cdot \frac{m}{|x|^{3/2}} \cdot e^{-\frac{m}{2}|x|} (1 + e^{mR} (mR - 1)) \right. \\ \left. + R^{-3/2} e^{-\frac{m}{2}|x|} (1 - e^{mR} + mR e^{mR} + m^2 R^2 e^{mR}) \right\} e^{-\frac{m}{2}|x|} \end{aligned} \quad (\text{A.36e})$$

$$\leq \theta(|x| - 2R) \left\{ \left[1 + Am^{1/2} R^{1/2} e^{-mR} \right] \cdot \frac{m}{(2R)^{3/2}} \cdot (e^{-mR} + (mR - 1)) \right. \\ \left. + R^{-3/2} (e^{-mR} - 1 + mR + m^2 R^2) \right\} e^{-\frac{m}{2}|x|}$$

$$\begin{aligned} \theta(|x| - 3R) \left\{ \left[1 + Am^{1/2} R^{1/2} e^{-mR} \right] e^{-\frac{2m}{3}|x|} (e^{2mR} - e^{mR}) m^{1/2} R^{-1/2} \right. \\ \left. + m^{-1/2} R^{-3/2} (1 - e^{2mR} + 2mR e^{2mR}) e^{-\frac{2m}{3}|x|} + m^{3/2} R^{1/2} e^{2mR} e^{-\frac{2m}{3}|x|} \right\} e^{-\frac{m}{3}|x|} \\ \leq \theta(|x| - 3R) \left\{ \left[1 + Am^{1/2} R^{1/2} e^{-mR} \right] (1 - e^{-mR}) m^{1/2} R^{-1/2} \right. \\ \left. + m^{-1/2} R^{-3/2} (1 - e^{2mR} + 2mR e^{2mR}) e^{-2R} + m^{3/2} R^{1/2} \right\} e^{-\frac{m}{3}|x|} \end{aligned} \quad (\text{A.36f})$$

Bei den beiden letzten Fehlern haben wir alle negativen Potenzen von $|x|$ durch die untere Grenze (also entweder $2R$ oder $3R$) abgeschätzt. Die letzte verbleibende x -Abhängigkeit steckt somit in $e^{-m|x|/2}$ für $|x| \geq 2R$, beziehungsweise $e^{-m|x|/3}$ für $|x| \geq 3R$. Alles in allem kann der Lokalisierungsfehler für festes $m > 0$ und nichtnegative Potentiale, die durch $|x|^{-1}$ beschränkt sind, durch eine m -abhängige Konstante mal

$$\begin{aligned} L_R^{(1)}(x) \leq A_1 R^{-1} F \left(\frac{|x|}{R} \right) \theta(3R - |x|) \\ + A_2 (R^{-2} + R^{-1} + R^{-1/2} + 1 + R^{1/2}) e^{-mR} \theta(3R - |x|) \\ + A_3 (R^{-3/2} + R^{-1/2} + R^{1/2}) e^{-m|x|/2} \theta(|x| - R) \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

abgeschätzt werden. Hierbei hat $F(|x|/R)$ logarithmische Singularitäten bei $|x| = R$ und $|x| = 2R$ und ist sonst stetig und beschränkt. Die Singularitäten sind von der Form (A.26).

A.1.3 Lokalisierungspotential der ersten Komponente der \mathcal{T} -Transformation

Schließlich bestimmen wir noch das Lokalisierungspotential für die erste Komponente der \mathcal{T} -Transformation mit $V(z) = |z|^{-1}$. Mit den punktweisen Schranken aus Lemma 4.4.2 für den Integralkern von $\phi_0 - 1$, können wir das Lokalisierungspotential (4.15), sprich

$$L_R^{(0)}(x) = \int_{\mathbb{R}^3} dy \int_{\mathbb{R}^3} dz \frac{e^{-m|x-z|} e^{-m|y-z|}}{|x-z|^2 |z||y-z|^2} \left| \chi\left(\frac{x}{R}\right) - \chi\left(\frac{z}{R}\right) \right| \left| \chi\left(\frac{y}{R}\right) - \chi\left(\frac{z}{R}\right) \right|$$

für festes $m > 0$ abschätzen. Wir unterscheiden dieses mal nur zwei Fälle, $|x| \leq 3R$ und $|x| \geq 3R$. In beiden Fällen verwenden wir für die Differenz $|\chi_R(y) - \chi_R(z)|$ die Lipschitz-Stetigkeit von χ . Für die Differenz $|\chi_R(x) - \chi_R(z)|$ verwenden wir die Lipschitz-Stetigkeit nur für $|x| \leq 3R$. Das Integral über y gibt wegen der Translationsinvarianz einfach eine Konstante, das heißt wir müssen nur noch

$$L_R^{(0)}(x) \leq AR^{-2} \left(\int_{\mathbb{R}^3} dz \frac{e^{-m|x-z|}}{|z||x-z|} \theta(3R - |x|) + R \int_{\mathbb{R}^3} dz \frac{e^{-m|x-z|}}{|z||x-z|^2} \theta(|x| - 3R) \right) \quad (\text{A.38})$$

behandeln.

Wir beginnen mit der inneren Region $|x| \leq 3R$. Zunächst bestimmen wir hier das Integral über den Winkel mit $r = |z|$ zu

$$\int_{-1}^1 du \frac{\exp(-m\sqrt{|x|^2 + r^2 - 2r|x|u})}{\sqrt{|x|^2 + r^2 - 2r|x|u}} = \frac{e^{-m||x|-r|} - e^{-m(|x|+r)}}{mr|x|}.$$

Hierbei haben wir – in dieser Reihenfolge – die Substitutionen $u \mapsto u/(r|x|)$, $u \mapsto u + (|x|^2 + r^2)/2$, $u \mapsto -u/2$ und $u \mapsto u^2$ verwendet. Damit ist für $|x| \leq 3R$

$$\begin{aligned} L_R^{(0)}(x) &\leq Am^{-1}R^{-2}|x|^{-1} \int_0^\infty dr \left[e^{-m||x|-r|} - e^{-m(|x|+r)} \right] \\ &= Am^{-2}R^{-2}|x|^{-1} \left[1 - e^{-m|x|} \right]. \end{aligned}$$

Die $|x|^{-1}$ -Singularität wird dabei gerade vom letzten Faktor in eckigen Klammern neutralisiert, weshalb die Daubechies-Ungleichung verwendet werden kann. Insbesondere ist $L_R^{(0)}(x) \leq Am^{-1}R^{-2}$ für $|x| \leq 3R$.

Für $|x| \geq 3R$ erhalten wir nur einen Beitrag, wenn $|z| \leq 2R$ ist. Wir müssen daher nur noch

$$AR^{-1} \int_{|z| \leq 2R} dz \frac{e^{-m|x-z|}}{|z||x-z|^2} \theta(|x| - 3R)$$

bestimmen. Mit denselben Substitutionen für das Winkelintegral wie eben erhält man mit $r = |z|$

$$\frac{1}{r|x|} \int_{|x|-r}^{|x|+r} \frac{e^{-mu}}{u} du \leq \frac{1}{r|x|} \int_{|x|-r}^\infty \frac{e^{-mu}}{u} du \leq \frac{1}{mr|x|} \cdot \frac{e^{-m(|x|-r)}}{|x|-r}.$$

Mit $|x| - r \geq R$ und den darauf folgenden Substitutionen $r \mapsto r + |x|$ und $r \mapsto -r$ erhalten wir für $|x| \geq 3R$

$$\begin{aligned} L_R^{(0)}(x) &\leq Am^{-1}R^{-1}|x|^{-1} \int_{|x|-2R}^{|x|} dr \frac{e^{-mr}}{r} \leq Am^{-1}R^{-1}|x|^{-1} \int_{|x|-2R}^{\infty} \frac{e^{-mr}}{r} dr \\ &\leq AR^{-1} \frac{e^{-m(|x|-2R)}}{m^2|x|(|x|-2R)} \leq Am^{-2}R^{-3} \frac{R}{|x|} e^{2mR-m|x|}. \end{aligned}$$

Der Lokalisierungsfehler für die erste Komponente des Spinors beläuft sich also auf eine Konstante mal

$$\begin{aligned} L_R^{(0)}(x) &\leq Am^{-2}R^{-2}|x|^{-1}(1 - e^{-m|x|})\theta(3R - |x|) + Am^{-2}R^{-3} \frac{R}{|x|} e^{2mR-m|x|}\theta(|x| - 3R) \\ &\leq Am^{-1}R^{-2}\theta(3R - |x|) + Am^{-2}R^{-3}e^{-m|x|/3}\theta(|x| - 3R). \end{aligned} \tag{A.39}$$

A.2 Vergleich der verdrehten und unverdrehten Potentiale

Wir schätzen $V - \mathcal{T}_1(V)$ in der mittleren und der äußeren Region ab. Hierbei ist $V \geq 0$ entweder das Coulomb-Potential, das mittlere Feld, oder das Test-Potential. Wir bemerken zunächst die Gleichheit

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_1(V) - V &= \sum_{j=0,1} \left(\Phi_j V \Phi_j - V^{1/2} \Phi_j^2 V^{1/2} \right) \\ &= \sum_{j=0,1} \left(V^{1/2} \Phi_j [V^{1/2}, \Phi_j] + [\Phi_j, V^{1/2}] \Phi_j V^{1/2} + [\Phi_j, V^{1/2}] [V^{1/2}, \Phi_j] \right) \\ &= \sum_{j=0,1} [\Phi_j, V] \Phi_j. \end{aligned} \tag{A.40}$$

Des Weiteren erinnern wir an die punktweisen Schranken der Kerne von $\Phi_0 - 1$ und Φ_1 aus Lemma 4.4.2 und Lemma 4.4.3, nämlich

$$|(\Phi_0 - 1)(x)| \leq A \frac{e^{-a|x|}}{|x|^2}$$

und

$$|\Phi_1(x)| \leq A \frac{e^{-a|x|}}{|x|^3}$$

für gewisse $A > 0$ und $0 < a < 1$.

Wir schätzen zunächst die Differenz des verdrehten und unverdrehten Coulomb-Potentials ab und beginnen mit einer Abschätzung, die in der mittleren Region verwendet wird.

Lemma A.2.1. *Seien $0 \leq U \leq |x|^{-1}$, $\tilde{\chi}_2$ wie in (4.7c) und $f_2 := \tilde{\chi}_2 f$ für $f \in L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^2)$. Dann ist*

$$-(f_2, \mathcal{T}_1(U)f_2) \geq -A(f_2, |x|^{-1}f_2)$$

Beweis. Wegen $-(f_2, \mathcal{T}_1(U)f_2) \geq -(f_2, \mathcal{T}_1(|x|^{-1})f_2)$ müssen wir nur noch zeigen, dass

$$\begin{aligned} & |(f_2, (|x|^{-1} - \mathcal{T}_1(|x|^{-1}))f_2)| \\ &= \left| \sum_{j=0,1} \left(f_2, \left(|x|^{-\frac{1}{2}} \Phi_j [|x|^{-\frac{1}{2}}, \Phi_j] + [\Phi_j, |x|^{-\frac{1}{2}}] \Phi_j |x|^{-\frac{1}{2}} + [\Phi_j, |x|^{-\frac{1}{2}}] [|x|^{-\frac{1}{2}}, \Phi_j] \right) f_2 \right) \right| \end{aligned}$$

durch eine Konstante mal $(f_2, |x|^{-1}f_2)$ abgeschätzt werden kann. Aus der Cauchy–Schwarz-Ungleichung und der Tatsache, dass Φ_j ein durch Eins beschränkter Operator ist, sprich

$$\begin{aligned} \left| \left(f_2, |x|^{-1/2} \Phi_j [|x|^{-1/2}, \Phi_j] f_2 \right) \right| &\leq \| |x|^{-1/2} f_2 \| \cdot \| \Phi_j [|x|^{-1/2}, \Phi_j] f_2 \| \\ &\leq (f_2, |x|^{-1} f_2) + (f_2, [\Phi_j, |x|^{-1/2}] [|x|^{-1/2}, \Phi_j] f_2), \end{aligned}$$

folgt, dass man nur noch

$$|(f_2, [\Phi_j, |x|^{-1/2}] [|x|^{-1/2}, \Phi_j] f_2)| \leq A(f_2, |x|^{-1} f_2), \quad j \in \{0, 1\}$$

zeigen muss. Mit $[\Phi_0, V] = [\Phi_0 - 1, V]$, der Cauchy–Schwarz-Ungleichung (wie im Beweis von Lemma 4.4.1) und den punktwisen Schranken der Lemmata 4.4.2 und 4.4.3 reduziert sich dies auf die Behauptung (mit $0 < a < 1$)

$$\int_{\mathbb{R}^3} dz \frac{e^{-a|x-z|}}{|x-z|^3} \left| \frac{1}{|x|^{1/2}} - \frac{1}{|z|^{1/2}} \right| \int_{\tilde{R}_i \leq |y| \leq \tilde{R}_a} dy \frac{e^{-a|y-z|}}{|y-z|^3} \left| \frac{1}{|y|^{1/2}} - \frac{1}{|z|^{1/2}} \right| \leq A|x|^{-1} \quad (\text{A.41})$$

für $|x| \in [\tilde{R}_i, \tilde{R}_a]$ (was wir von nun an voraussetzen). Die $|\cdot|^{-3}$ -Singularität der Integrale ist wegen der Differenz der Potentiale integrierbar. Wir beschränken zunächst das y -Integral und beginnen mit der Region $|y| \in [|z|/2, 2|z|]$. Nach Skalieren von $y \mapsto |z|y$ erhält man

$$\begin{aligned} \int_{|z|/2 \leq |y| \leq 2|z|} dy \frac{e^{-a|y-z|}}{|y-z|^3} \left| \frac{1}{|y|^{1/2}} - \frac{1}{|z|^{1/2}} \right| &\leq 2\pi|z|^{-\frac{1}{2}} \int_{1/2}^2 dr r^2 \left| \frac{1}{r^{1/2}} - 1 \right| \int_{-1}^1 \frac{du}{(r^2 + 1 - 2ru)^{\frac{3}{2}}} \\ &= 2\pi|z|^{-1/2} \int_{1/2}^2 dr r \left| \frac{1}{r^{1/2}} - 1 \right| \left(\frac{1}{|r-1|} - \frac{1}{r+1} \right) \\ &\leq A|z|^{-1/2}. \end{aligned} \quad (\text{A.42a})$$

Ist $|y| \leq |z|/2$, so ist

$$\int_{\tilde{R}_i \leq |y| \leq |z|/2} dy \frac{e^{-a|y-z|}}{|y-z|^3} \left| \frac{1}{|y|^{1/2}} - \frac{1}{|z|^{1/2}} \right| \leq A \frac{e^{-a|z|/2}}{|z|^{1/2}} \theta(|z| - 2\tilde{R}_i) \quad (\text{A.42b})$$

und, wenn $|y| \geq 2|z|$ ist, dann

$$\begin{aligned} \int_{2|z| \leq |y| \leq \tilde{R}_a} dy \frac{e^{-a|y-z|}}{|y-z|^3} \left| \frac{1}{|y|^{1/2}} - \frac{1}{|z|^{1/2}} \right| &\leq A|z|^{-1/2} \int_{2|z| \leq |y| \leq \tilde{R}_a} dy \frac{e^{-a|y|/2}}{|y|^3} \\ &\leq A|z|^{-1/2} e^{-a|z|} \log \left(\frac{\tilde{R}_a}{2|z|} \right) \theta(\tilde{R}_a - 2|z|). \end{aligned} \quad (\text{A.42c})$$

Insgesamt ist also

$$\begin{aligned} & \int_{\tilde{R}_i \leq |y| \leq \tilde{R}_a} dy \frac{e^{-a|y-z|}}{|y-z|^3} \left| \frac{1}{|y|^{1/2}} - \frac{1}{|z|^{1/2}} \right| \\ & \leq A|z|^{-1/2} \left[e^{-a|z|/2} \left(\theta(|z| - 2\tilde{R}_i) + \log \left(\frac{\tilde{R}_a}{2|z|} \right) \theta(\tilde{R}_a - 2|z|) \right) + 1 \right]. \end{aligned}$$

Wir untersuchen nun die drei Regionen $|z| \geq 2|x|$, $|z| \leq |x|/2$ und $|x|/2 \leq |z| \leq 2|x|$. In der ersten Region ist $|x-z| \geq |z|/2$ und man schätzt die linke Seite von (A.41) weiter durch

$$\begin{aligned} & |x|^{-1/2} \int_{|z| \geq 2|x|} dz \frac{e^{-a|z|/2}}{|z|^3} \int_{\tilde{R}_i \leq |y| \leq \tilde{R}_a} dy \frac{e^{-a|y-z|}}{|y-z|^3} \left| \frac{1}{|y|^{1/2}} - \frac{1}{|z|^{1/2}} \right| \\ & \leq A|x|^{-1/2-3-1/2} \int_{|z| \geq 2|x|} dz \left[e^{-a|z|} \left(1 + \log \left(\frac{\tilde{R}_a}{2|z|} \right) \theta(\tilde{R}_a - 2|z|) \right) + e^{-a|z|/2} \right] \\ & \leq A\tilde{R}_i^{-3}|x|^{-1} e^{-a|x|/2} (1 + \log(\tilde{R}_a/\tilde{R}_i)) \end{aligned}$$

ab. Die rechte Seite fällt exponentiell schnell in Z ab und ist insbesondere durch eine Konstante mal $|x|^{-1}$ beschränkt.

In der zweiten Region ist $|x-z| \geq |x|/2$ und die linke Seite von (A.41) kann durch

$$\begin{aligned} & \int_{|z| \leq |x|/2} dz \frac{e^{-a|x|/2}}{|x|^3|z|^{1/2}} \int_{\tilde{R}_i \leq |y| \leq \tilde{R}_a} dy \frac{e^{-a|y-z|}}{|y-z|^3} \left| \frac{1}{|y|^{1/2}} - \frac{1}{|z|^{1/2}} \right| \\ & \leq A e^{-a|x|/2} |x|^{-3} \int_{|z| \leq |x|/2} |z|^{-1} \left[e^{-a|z|/2} \left(1 + \log \left(\frac{\tilde{R}_a}{2|z|} \right) \theta(\tilde{R}_a - 2|z|) \right) + 1 \right] \\ & \leq A|x|^{-1} e^{-a|x|/2} (1 + \log \tilde{R}_a) \end{aligned}$$

abgeschätzt werden. Die rechte Seite fällt also ebenfalls exponentiell schnell in Z ab und ist insbesondere durch eine Konstante mal $|x|^{-1}$ beschränkt. Schließlich schätzen wir für $|z| \in [|x|/2, 2|x|]$

$$\begin{aligned} & \int_{|x|/2 \leq |z| \leq 2|x|} dz \frac{1}{|x-z|^3} \left| \frac{1}{|x|^{1/2}} - \frac{1}{|z|^{1/2}} \right| \int_{\tilde{R}_i \leq |y| \leq \tilde{R}_a} dy \frac{e^{-a|y-z|}}{|y-z|^3} \left| \frac{1}{|y|^{1/2}} - \frac{1}{|z|^{1/2}} \right| \\ & \leq A \int_{|x|/2 \leq |z| \leq 2|x|} dz \frac{1}{|x-z|^3|z|^{1/2}} \left| \frac{1}{|x|^{1/2}} - \frac{1}{|z|^{1/2}} \right| \left[e^{-a|z|} \left(1 + \log \left(\frac{\tilde{R}_a}{2|z|} \right) \theta(\tilde{R}_a - 2|z|) \right) + 1 \right] \\ & \leq A|x|^{-1/2} \left[e^{-a|x|/2} \left(1 + \log \left(\frac{\tilde{R}_a}{|x|} \right) \right) + 1 \right] \int_{|x|/2 \leq |z| \leq 2|x|} dz \frac{1}{|x-z|^3} \left| \frac{1}{|x|^{1/2}} - \frac{1}{|z|^{1/2}} \right| \\ & \leq A|x|^{-1} \end{aligned}$$

ab. Hierbei haben wir den exponentiellen Abfall in $|x| \geq \tilde{R}_i$ und (A.42a) in der letzten Abschätzung verwendet. \square

Folgende Abschätzung ist für die Bestimmung des Fehlers in der äußeren Region hinreichend.

Lemma A.2.2. *Seien $\tilde{\chi}_2$ und $\tilde{\chi}_3$ wie in (4.7c) sowie $f_2 := \tilde{\chi}_2 f$ und $f_3 := \tilde{\chi}_3 f$ für $f \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2)$. Dann sind*

$$\begin{aligned} |(f_2, (|x|^{-1} - \mathcal{T}_1(|x|^{-1}))f_2)| &\leq A\tilde{R}_i^{-2}\|f_2\|^2 \\ |(f_3, (|x|^{-1} - \mathcal{T}_1(|x|^{-1}))f_3)| &\leq A\tilde{R}_a^{-2}\|f_3\|^2. \end{aligned}$$

Beweis. Wir zeigen die Rechnung nur für $\tilde{\chi}_3$. Die Rechnung für $\tilde{\chi}_2$ kann auf die für $\tilde{\chi}_3$ zurückgeführt werden. Wir verwenden die Darstellung $|x|^{-1} - \mathcal{T}_1(|x|^{-1}) = \sum_{j=0,1} [|x|^{-1}, \Phi_j] \Phi_j$ aus der dritten Gleichheit in (A.40). Für $j \in \{0, 1\}$ ist

$$\sum_{j=0,1} |(f_3, \Phi_j [|x|^{-1}, \Phi_j] f_3)| \leq \|f_3\|_2 \sum_{j=0,1} \| [|x|^{-1}, \Phi_j] f_3 \|_2.$$

Mit den punktweisen Schranken der Lemmata 4.4.2 und 4.4.3 und der Cauchy–Schwarz–Ungleichung (wie im Beweis von Lemma A.2.11) kann der zweite Teil des Produkts kontrolliert werden. Wir erhalten für $j = 0, 1$ mit $0 < a < 1$ und $\|x\| - \|z\| \leq \|x - z\|$

$$\begin{aligned} \| [|x|^{-1}, \Phi_j] f_3 \|_2^2 &\leq \int_{\mathbb{R}^3} dx |f_3(x)|^2 \int_{\mathbb{R}^3} dz \frac{e^{-a|x-z|}}{|x-z|^3} \left| \frac{1}{|x|} - \frac{1}{|z|} \right| \int_{|y| \geq \tilde{R}_a} dy \frac{e^{-a|y-z|}}{|y-z|^3} \left| \frac{1}{|y|} - \frac{1}{|z|} \right| \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} dx |f_3(x)|^2 \int_{\mathbb{R}^3} dz \frac{e^{-a|x-z|} \|x\| - \|z\|}{|x-z|^3 \|x\| \|z\|^2} \int_{|y| \geq \tilde{R}_a} dy \frac{e^{-a|y-z|} \|y\| - \|z\|}{|y-z|^3 \|y\|} \\ &\leq \tilde{R}_a^{-2} \int_{\mathbb{R}^3} dx |f_3(x)|^2 \int_{\mathbb{R}^3} dz \frac{e^{-a|x-z|}}{|x-z|^2 \|z\|^2} \int_{|y| \geq \tilde{R}_a} dy \frac{e^{-a|y-z|}}{|y-z|^2}. \end{aligned}$$

Wir unterscheiden nun zwischen $\|z\| \leq \tilde{R}_a/2$ und $\|z\| \geq \tilde{R}_a/2$ und beginnen mit $\|z\| \leq \tilde{R}_a/2$. In dieser Region schätzen wir das y -Integral durch eine Konstante ab, indem wir den Integrationsbereich auf \mathbb{R}^3 vergrößern. Gleichzeitig ist wegen $\|x\| \geq \tilde{R}_a$, $\|x - z\| \geq \|x\| - \|z\| \geq \|x\|/2$. Damit verbleibt

$$A\tilde{R}_a^{-2} \int_{\mathbb{R}^3} dx |f_3(x)|^2 \int_{\|z\| \leq \tilde{R}_a/2} dz \frac{e^{-a\|x\|/2}}{\|x\|^2 \|z\|^2} \leq A\tilde{R}_a^{-3} e^{-a\tilde{R}_a/2} \|f_3\|^2$$

und die rechte Seite ist für hinreichend großes Z sicherlich durch $\tilde{R}_a^{-4} \|f_3\|^2$ beschränkt.

Für $\|z\| \geq \tilde{R}_a/2$ schätzen wir den $\|z\|^{-2}$ -Faktor im z -Integral durch \tilde{R}_a^{-2} ab und führen die y - und z -Integrationen über ganz \mathbb{R}^3 durch. Zusammengefasst ist also

$$\| [|x|^{-1}, \Phi_j] f_3 \|_2^2 \leq A\tilde{R}_a^{-4} \|f_3\|_2^2,$$

was die Behauptung zeigt. □

Die Differenz der verdrehten und unverdrehten Test-Potentiale und mittleren Felder wird schließlich mit folgender Abschätzung behandelt.

Lemma A.2.3. *Sei $U \geq 0$ Lipschitz-stetig mit Lipschitz-Konstante M . Dann ist*

$$|(f, (U - \mathcal{T}_1(U))f)| \leq AM \|f\|_2^2.$$

Beweis. Wir verwenden wieder die Darstellung $U - \mathcal{T}_1(U) = \sum_{j=0,1} [U, \Phi_j] \Phi_j$ aus der dritten Gleichheit in (A.40). Für $j \in \{0, 1\}$ ist

$$|(f, \Phi_j [U, \Phi_j] f)| \leq \|f\|_2 \| [U, \Phi_j] f \|_2.$$

Mit den punktweisen Schranken der Lemmata 4.4.2 und 4.4.3 und der Cauchy–Schwarz-Ungleichung kann der zweite Teil des Produkts kontrolliert werden. Wir erhalten mit $a \in (0, 1)$

$$\begin{aligned} \| [U, \Phi_j] f \|_2^2 &\leq A_a \int_{\mathbb{R}^3} dx |f(x)|^2 \int_{\mathbb{R}^3} dz \frac{e^{-a|x-z|}}{|x-z|^3} |U(x) - U(z)| \int_{\mathbb{R}^3} dy \frac{e^{-a|y-z|}}{|y-z|^3} |U(y) - U(z)| \\ &\leq A_a M^2 \int_{\mathbb{R}^3} dx |f(x)|^2 \int_{\mathbb{R}^3} dz \frac{e^{-a|x-z|}}{|x-z|^2} \int_{\mathbb{R}^3} dy \frac{e^{-a|y-z|}}{|y-z|^2} \leq A_a M^2 \|f\|^2. \end{aligned}$$

□

A.3 Pseudo-Differential- und singuläre Integral-Operatoren

Wir geben hier einen kurzen Überblick über Pseudo-Differentialoperatoren und ihre wichtigsten Eigenschaften, die wir für die Untersuchung der \mathcal{T} -Transformation benötigen. Dieser hält sich sehr stark an [168, Kapitel VI, §1-4].

Definition A.3.1. Seien $m \in \mathbb{R}$ und $d \in \mathbb{N}$. Dann ist S^m der Vektorraum aller Funktionen $a = a(x, p) \in C^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$, die

$$|\partial_x^\beta \partial_p^\alpha a(x, p)| \leq A_{\alpha, \beta} (1 + |p|)^{m - |\alpha|}$$

für alle Multiindizes α und β erfüllen. Elemente aus S^m heißen *Symbole m -ter Ordnung*.

Formal definiert ein Symbol a einen Pseudo-Differentialoperatoren T_a , der Funktionen f auf

$$(Tf)(x) = \int_{\mathbb{R}^d} a(x, p) \hat{f}(p) e^{ixp} dp$$

abbildet, wobei \hat{f} die Fourier-Transformation von f bezeichnet. Die Φ_j aus (4.2) sind beispielsweise translationsinvariante Operatoren, das heißt sie wirken als Multiplikatoren im Fourierraum, sprich

$$(\widehat{\Phi_j f})(p) = \Phi_j(p) \hat{f}(p).$$

Eine alternative Schreibweise der Wirkung von T_a ist als wiederholtes Integral

$$(T_a f)(x) = \int \int a(x, p) e^{ip(x-y)} f(y) dy dp.$$

Dieses Integral konvergiert jedoch nicht notwendigerweise, selbst wenn $f \in \mathcal{S}$. Zur Regularisierung des Integrals führt man $\chi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ mit $\chi(0, 0) = 1$ ein und setzt $a_\varepsilon(x, p) := \chi(\varepsilon x, \varepsilon p) a(x, p)$. Wenn $a \in S^m$, dann ist auch $a_\varepsilon \in S^m$, gleichmäßig in $\varepsilon \in (0, 1]$. Außerdem konvergiert $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} T_{a_\varepsilon} f = T_a f$ in \mathcal{S} , wann immer $f \in \mathcal{S}$, siehe [168, Kapitel VI, §1.3]. Daher ist

$$(T_a f)(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \int a_\varepsilon(x, p) e^{ip(x-y)} f(y) dy dp.$$

Pseudo-Differentialoperatoren lassen sich auch als singuläre Integrale auffassen. Wir schreiben

$$(T_a f)(x) = \int_{\mathbb{R}^d} k(x, z) f(x - z) dz \quad (\text{A.43})$$

mit folgendem Verständnis. Für jedes x ist $k(x, \cdot)$ eine Distribution, deren Fourier-Transformation die Funktion $a(x, \cdot)$ ist. Formal ist dies die Identität

$$a(x, p) = \int_{\mathbb{R}^d} k(x, z) e^{-ixp} dz.$$

Das heißt, (A.43) kann als Faltung der Distribution $k(x, z)$ mit der Funktion $f \in \mathcal{S}$, ausgewertet am Punkt x , aufgefasst werden. Nach [168, Proposition 1] ist $k(x, z) \in C^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \setminus \{0\})$ und es gilt

$$|\partial_x^\beta \partial_z^\alpha k(x, z)| \leq A_{\alpha, \beta, N} |z|^{-d-m-|\alpha|-N}, \quad z \neq 0$$

für alle Multiindizes α, β und alle $N \geq 0$, sodass $d + m + |\alpha| + N > 0$ erfüllt ist. Das bedeutet, dass die Distribution $k(x, \cdot)$ mit einer Funktion übereinstimmt, die sehr schnell im Unendlichen abfällt.

Anhang B

Anhang zur starken Scott-Vermutung im Chandrasekhar-Modell

B.1 Beweise der Lemmata 5.3.9 und 5.4.5

In diesem Abschnitt berechnen wir Integrale mit Bessel-Funktionen. Wir erinnern an die beiden zu beweisenden Behauptungen.

Lemma B.1.1. (1) Sei $M > 0$ eine feste Konstante und $s \in (1/2, 1]$. Dann gilt für alle $r \geq 0$ und $\nu \geq 1/2$

$$\int_0^\infty dk \frac{kr J_\nu(kr)^2}{(\sqrt{k^2 + 1} - 1 + M)^{2s}} \leq A_{s,M} \left[\left(\frac{r}{\nu}\right)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq \nu\}} + \mathbf{1}_{\{r \geq \nu\}} \right].$$

(2) Seien $a > 0$ und $s \in (1/2, 3/4]$. Dann gilt für jedes $r \geq 0$ und $\nu \geq 1/2$ die Abschätzung

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty dk \frac{kr J_\nu(kr)^2}{(\sqrt{k^2 + 1} - 1 + a\nu^{-2})^{2s}} \\ & \leq A_{s,a} \left[\left(\frac{r}{\nu}\right)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq \nu\}} + \left(\frac{r}{\nu}\right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{\nu \leq r \leq \nu^2\}} + \nu^{4s-1} \mathbf{1}_{\{r \geq \nu^2\}} \right]. \end{aligned}$$

Beweis von Lemma 5.3.9. Wir beginnen mit dem Fall $s < 1$ und erinnern dazu an punktweise Schranken für $|J_\nu(x)|$ für $\nu \geq 1$ (siehe beispielsweise [26, Lemma 3.2]). Es gilt

$$\begin{aligned} |J_\nu(x)|^2 & \leq \text{konst} \frac{1}{\nu^2} \quad \text{für } 0 \leq x \leq \frac{3}{2}\nu \quad \text{und} \\ |J_\nu(x)|^2 & \leq \text{konst} \frac{1}{x} \quad \text{für } x \geq \frac{3}{2}\nu. \end{aligned}$$

Mit diesen Schranken genügt es

$$\nu^{-2} \int_0^{3\nu/(2r)} dk \frac{kr}{(\sqrt{k^2 + 1} - 1 + M)^{2s}} + \int_{3\nu/(2r)}^\infty dk \frac{1}{(\sqrt{k^2 + 1} - 1 + M)^{2s}} \quad (\text{B.1})$$

abzuschätzen. Der Nenner der Integranden besitzt zwei Längenskalen. Für $k \gtrsim 1$ wird der Nenner am besten durch k^{2s} approximiert, wohingegen er für $k \lesssim 1$ am besten durch M^{2s} angenähert wird.

Wegen $1/2 < s < 1$ ist (B.1) für $r \leq \nu$ durch eine Konstante mal

$$\begin{aligned} & \left[\nu^{-2} \int_0^1 kr dk + \nu^{-2} \int_1^{\nu/r} k^{1-2s} r dk + \int_{\nu/r}^{\infty} k^{-2s} dk \right] \mathbf{1}_{\{r \leq \nu\}} \\ & \leq A_s \left[\frac{r}{\nu^2} + \frac{r}{\nu^2} \left(\left(\frac{r}{\nu} \right)^{2s-2} + 1 \right) + \left(\frac{r}{\nu} \right)^{2s-1} \right] \mathbf{1}_{\{r \leq \nu\}} \leq A_s \left(\frac{r}{\nu} \right)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq \nu\}} \end{aligned}$$

beschränkt.

Ist andererseits $r \geq \nu$, so wird (B.1) durch eine Konstante mal

$$\left[\nu^{-2} \int_0^{\nu/r} kr dk + \int_{\nu/r}^1 dk + \int_1^{\infty} k^{-2s} dk \right] \mathbf{1}_{\{r \geq \nu\}} \leq A_s \left[\frac{1}{r} + 1 + \frac{\nu}{r} + 1 \right] \mathbf{1}_{\{r \geq \nu\}} \leq A_s \mathbf{1}_{\{r \geq \nu\}}$$

beschränkt.

Für $\nu \in [1/2, 1]$ verwenden wir die Abschätzungen $t|J_\nu(t)|^2 \leq A \min\{1, t^{1+2\nu}\}$ (siehe [137, Formel 9.1.7 und 9.2.1]) und $k^2 + 1 \leq A_M(\sqrt{k^2 + 1} - 1 + M)^2$ und erhalten (für alle $r \in \mathbb{R}_+$)

$$\int_0^{\infty} dk \frac{kr J_\nu(kr)^2}{(k^2 + 1)^s} \leq A \left(r^{1+2\nu} \int_0^{1/r} k^{1+2\nu-2s} dk + \int_{1/r}^{\infty} k^{-2s} dk \right) \leq A_s r^{2s-1},$$

beziehungsweise für $r \geq 1$

$$r^{1+2\nu} \int_0^{1/r} dk \frac{k^{1+2\nu}}{(k^2 + 1)^s} + \int_{1/r}^{\infty} \frac{dk}{(k^2 + 1)^s} \leq \int_0^1 \frac{dk}{(k^2 + 1)^s} + \int_0^{\infty} \frac{dk}{(k^2 + 1)^s} = A_s.$$

Schließlich behandeln wir den Fall $s = 1$. Mit [37, Formel 10.22.69] ist

$$\int_0^{\infty} dk \frac{kr J_\nu(kr)^2}{k^2 + 1} = r \frac{i\pi}{2} J_\nu(ir) H_\nu^{(1)}(ir),$$

wobei $H_\nu^{(1)}$ die erste Hankel-Funktion bezeichnet. Mit [137, Formel 9.6.3 und 9.6.4] kann die rechte Seite durch die modifizierten Bessel-Funktionen I_ν und K_ν ausgedrückt werden und man erhält

$$\int_0^{\infty} dk \frac{kr J_\nu(kr)^2}{k^2 + 1} = r K_\nu(r) I_\nu(r). \quad (\text{B.2})$$

Mit der punktwisen Schranke (siehe beispielsweise Iantchenko u. a. [95, p. 185])

$$K_\nu(\nu x) I_\nu(\nu x) \leq \frac{9}{4\nu(1+x^2)^{1/2}} \quad \text{für alle } \nu \geq \frac{1}{2},$$

ist insbesondere (mit $x = r/\nu$)

$$\int_0^{\infty} dk \frac{kr J_\nu(kr)^2}{k^2 + 1} \leq A \left(\frac{r}{\nu} \mathbf{1}_{\{r \leq \nu\}} + \mathbf{1}_{\{r \geq \nu\}} \right).$$

□

Beweis von Lemma 5.4.5. Wie im Beweis von Lemma 5.3.9 verwenden wir für $\nu \geq 1$ die Schranken von Cordoba [26, Lemma 3.2] an $|J_\nu(x)|$. Es genügt daher die Summe

$$\nu^{-2} \int_0^{3\nu/(2r)} dk \frac{kr}{(\sqrt{k^2+1}-1+a\nu^{-2})^{2s}} + \int_{3\nu/(2r)}^\infty dk \frac{1}{(\sqrt{k^2+1}-1+a\nu^{-2})^{2s}} \quad (\text{B.3})$$

abzuschätzen. In diesem Fall besitzt der Nenner der Integranden drei Längenskalen. Für $k \gtrsim 1$ approximiert man den Nenner wieder mit k^{2s} . In der Übergangsregion $\nu^{-1} \lesssim k \lesssim 1$ approximiert man $\sqrt{k^2+1}-1 \sim k^2/2$, das heißt der Nenner wird durch k^{4s} angenähert. Schließlich wird der Nenner im Bereich $k \lesssim \nu^{-1}$ am besten durch $a^{2s}\nu^{-4s}$ approximiert.

Wir beschränken nun den zweiten Summanden von (B.3). Ist $\nu/r \leq 1$, unterscheiden wir zwischen den Fällen $\nu^{-1} \leq \nu/r$ (sprich $\nu \leq r \leq \nu^2$) und $\nu/r \leq \nu^{-1}$ (sprich $r \geq \nu^2$). Im ersten Fall erhält man

$$\begin{aligned} & \left(\int_{\nu/r}^1 k^{-4s} dk + \int_1^\infty k^{-2s} dk \right) \mathbf{1}_{\{\nu \leq r \leq \nu^2\}} \\ &= A_s \left(\left(\frac{r}{\nu} \right)^{4s-1} + 1 \right) \mathbf{1}_{\{\nu \leq r \leq \nu^2\}} \leq A_s \left(\frac{r}{\nu} \right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{\nu \leq r \leq \nu^2\}} \end{aligned}$$

und im zweiten Fall

$$\left[\nu^{4s} \int_{\nu/r}^{\nu^{-1}} dk + \int_{\nu^{-1}}^1 dk k^{-4s} + \int_1^\infty dk k^{-2s} \right] \mathbf{1}_{\{r \geq \nu^2\}} \leq A_s \nu^{4s-1} \mathbf{1}_{\{r \geq \nu^2\}}.$$

Falls $\nu/r \geq 1$, muss nur der Bereich $k \geq 1$ untersucht werden. Man erhält

$$\int_{\nu/r}^\infty dk k^{-2s} \mathbf{1}_{\{r \leq \nu\}} = A_s \left(\frac{r}{\nu} \right)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq \nu\}}.$$

Wir widmen uns nun dem ersten Summanden von (B.3). Ist $\nu/r \leq 1$, unterscheidet man wieder zwischen $\nu^{-1} \leq \nu/r$ (sprich $\nu \leq r \leq \nu^2$) und $\nu/r \leq \nu^{-1}$ (sprich $r \geq \nu^2$). Im ersten Fall integriert man und erhält

$$\begin{aligned} & \left[\nu^{-2+4s} r \int_0^{\nu^{-1}} k dk + \nu^{-2} r \int_{\nu^{-1}}^{\nu/r} k^{1-4s} dk \right] \mathbf{1}_{\{\nu \leq r \leq \nu^2\}} \\ & \leq A_s r \nu^{4s-4} \mathbf{1}_{\{\nu \leq r \leq \nu^2\}} \leq A_s \left(\frac{r}{\nu} \right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{\nu \leq r \leq \nu^2\}}. \end{aligned}$$

Hierbei haben wir

$$\frac{r}{\nu^{4-4s}} \leq \left(\frac{r}{\nu} \right)^{4s-1} \Leftrightarrow r^{2-4s} \leq \nu^{5-8s}$$

abgeschätzt, was wahr ist, da (mit $1/2 < s \leq 3/4$) $r^{2-4s} \leq \nu^{2-4s} \leq \nu^{5-8s}$ ist. Im zweiten Fall erhält man

$$\begin{aligned} & \nu^{-2+4s} r \int_0^{\nu/r} dk k \mathbf{1}_{\{r \geq \nu^2\}} \leq A_s \nu^{4s} r^{-1} \mathbf{1}_{\{r \geq \nu^2\}} \\ & \leq A_s \nu^{4s-2} \mathbf{1}_{\{r \geq \nu^2\}} \leq A_s \nu^{4s-1} \mathbf{1}_{\{r \geq \nu^2\}}. \end{aligned}$$

Falls $\nu/r \geq 1$ ist, führt die Integration auf

$$\begin{aligned} & \left[\nu^{-2+4s} r \int_0^{\nu^{-1}} k dk + \nu^{-2} r \int_{\nu^{-1}}^1 k^{1-4s} dk + \nu^{-2} r \int_1^{\nu/r} k^{1-2s} dk \right] \mathbf{1}_{\{r \leq \nu\}} \\ & \leq A_s \left[r \nu^{4s-4} + \nu^{-2} r \left(\frac{\nu}{r} \right)^{2-2s} \right] \mathbf{1}_{\{r \leq \nu\}} \leq A_s \left(\frac{r}{\nu} \right)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq \nu\}}. \end{aligned}$$

Hier haben wir verwendet, dass der zweite Summand in der letzten Abschätzung wegen $\nu \geq 1/2$ durch $r^{2s-1} \nu^{-2s} \leq 2(r/\nu)^{2s-1}$ und der erste Summand (mit $s \leq 3/4$) durch

$$\frac{r}{\nu} \cdot \nu^{4s-3} \leq \left(\frac{r}{\nu} \right)^{2s-1}$$

beschränkt ist.

Für $\nu \in [1/2, 1]$ verwenden wir wieder die Schranken $t|J_\nu(t)|^2 \leq A \min\{1, t^{1+2\nu}\}$ und $k^2 + 1 \leq A_a(\sqrt{k^2 + 1} - 1 + 4a)^2$ und erhalten (für alle $r \in \mathbb{R}_+$)

$$\int_0^\infty dk \frac{kr J_{1/2}(kr)^2}{(k^2 + 1)^s} \leq A \left(r^{1+2\nu} \int_0^{1/r} k^{1+2\nu-2s} dk + \int_{1/r}^\infty k^{-2s} dk \right) \leq A_s r^{2s-1},$$

beziehungsweise, falls $r \geq 1$,

$$r^{1+2\nu} \int_0^{1/r} dk \frac{k^{1+2\nu}}{(k^2 + 1)^s} + \int_{1/r}^\infty \frac{dk}{(k^2 + 1)^s} \leq \int_0^1 \frac{dk}{(k^2 + 1)^s} + \int_0^\infty \frac{dk}{(k^2 + 1)^s} = A_s.$$

□

B.2 Einfacher Beweis für eine obere Schranke für die nicht-relativistische Wasserstoffdichte

Wie wir in der Einleitung bemerkt haben, zeigten Heilmann und Lieb [86], dass die nicht-relativistische Dichte für $r \rightarrow \infty$ sich asymptotisch wie $r^{-3/2}/(\sqrt{2}\pi^2) + o(r^{-3/2})$ verhält. Ihr Beweis beruhte sehr stark auf den genauen Eigenschaften und Asymptotiken der explizit bekannten Wasserstoffeigenfunktionen. Es ist allerdings möglich, mit den einfachen Methoden des Beweises von 5.1.1 wenigstens eine entsprechende obere Schranke mit nicht-expliziter Konstante zu zeigen.

Da im Folgenden keine relativistischen Operatoren auftauchen, missbrauchen wir die Notation und bezeichnen mit ρ_ℓ^H und ρ^H die nicht-relativistischen wasserstoffartigen Dichten. Wir bezeichnen die orthogonale Projektion auf den negativen Spektralraum von $p_\ell^2/2 - 1/r$ wieder mit d_ℓ und schreiben

$$\rho_\ell^H(r) = \text{Tr } d_\ell \delta_r = \text{Tr } ABCB^* A^*,$$

wobei

$$\begin{aligned} A &:= d_\ell (p_\ell^2/2 - 1/r + a_\ell)^{1/2} \\ B &:= (p_\ell^2/2 - 1/r + a_\ell)^{-1/2} (p_\ell^2/2 + a_\ell)^{1/2} \\ C &:= (p_\ell^2/2 + a_\ell)^{-1/2} \delta_r (p_\ell^2/2 + a_\ell)^{-1/2} \end{aligned}$$

mit $a_\ell > |\inf \text{spec}(p_\ell^2/2 - 1/r)|$. Wegen der expliziten Formel der nicht-relativistischen Wasserstoffeigenwerte, welche durch $-1/(2(n + \ell + 1)^2)$ gegeben sind (für einen Spin-Freiheitsgrad), setzen wir $a_\ell = a(\ell + 1/2)^{-2}$ mit einer hinreichend großen Konstanten $a > 0$, welche unabhängig von ℓ ist.

Zunächst haben wir die übliche Schranke $\|A\| \leq a(\ell + 1/2)^{-2}$. Die Spur von C ist gerade die Diagonale $(p_\ell^2/2 + a_\ell)^{-1}(r, r)$, da der Kern $(p_\ell^2/2 + a_\ell)^{-1}(r, r')$ (wegen der Sobolew-Ungleichung mit $2 > d = 1$) eine stetige Funktion in beiden Variablen ist. Die Diagonale wurde bereits in (B.2) zu

$$\begin{aligned} (p_\ell^2/2 + a_\ell)^{-1}(r, r) &= \int_0^\infty dk \frac{kr J_{\ell+1/2}(kr)^2}{k^2/2 + a(\ell + 1/2)^{-2}} = 2r K_{\ell+1/2} \left(\frac{\sqrt{2ar}}{\ell + 1/2} \right) I_{\ell+1/2} \left(\frac{\sqrt{2ar}}{\ell + 1/2} \right) \\ &\leq A_a \left[\frac{r}{\ell + 1/2} \mathbf{1}_{\{r \leq (\ell+1/2)^2\}} + \frac{r}{\ell + 1/2} \cdot \frac{(\ell + 1/2)^2}{r} \mathbf{1}_{\{r \geq (\ell+1/2)^2\}} \right] \end{aligned}$$

bestimmt. Die Operatornorm von B ist endlich, da

$$\frac{p_\ell^2}{2} - \frac{1}{r} + a_\ell = \frac{1}{2} \left(\frac{p_\ell^2}{2} + a_\ell \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{p_\ell^2}{2} - \frac{2}{r} + a_\ell \right)$$

und die rechte Seite von unten durch $(p_\ell^2/2 + a_\ell)/2$ beschränkt ist, wenn $a > 0$ so groß gewählt wird, dass auch $p_\ell^2/2 - 2/r + a_\ell > 0$ ist.

Kombiniert man die Schranken für A, B und C , erhält man

$$\rho_\ell^H(r) = \text{Tr } d_\ell \delta_r \leq A_a (\ell + 1/2)^{-2} \left[\frac{r}{\ell + 1/2} \mathbf{1}_{\{r \leq (\ell+1/2)^2\}} + (\ell + 1/2) \mathbf{1}_{\{r \geq (\ell+1/2)^2\}} \right].$$

Die mit $2\ell + 1$ multiplizierte rechte Seite ist immer noch summierbar und man erhält schließlich

$$r^2 \rho^H(r) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \rho_\ell^H(r) \leq A_a r^{1/2}.$$

Anhang C

Anhang zur starken Scott-Vermutung im Furry-Modell

Partialwellenzerlegung

Die folgende Zusammenfassung stammt aus dem Anhang von [80], siehe auch [6, Abschnitt 2.1.1].

Seien $Y_{\ell,m}$ die Kugelflächenfunktionen auf der Einheitssphäre \mathbb{S}^2 , welche die Normierungsbedingung $\int_{\mathbb{S}^2} |Y_{\ell,m}|^2 d\omega = 1$ erfüllen. Hierbei bezeichnet $d\omega$ das gewöhnliche Flächenmaß auf \mathbb{S}^2 . Für $|m| > \ell$ setzt man $Y_{\ell,m} \equiv 0$. Für die Menge der erlaubten Indizes $\mathcal{I} := \{(\ell, j, m) : \ell \in \mathbb{N}_0, 1/2 \leq j = \ell \pm 1/2, m = -j, \dots, j\}$, definiert man *sphärische Pauli-Spinoren* durch

$$\Omega_{j,\ell,m}(\omega) := \begin{cases} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j+m}{2j}} Y_{\ell,m-\frac{1}{2}}(\omega) \\ \sqrt{\frac{j-m}{2j}} Y_{\ell,m+\frac{1}{2}}(\omega) \end{pmatrix} & \text{falls } j = \ell + \frac{1}{2} \\ \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{j-m+1}{2j+2}} Y_{\ell,m-\frac{1}{2}}(\omega) \\ \sqrt{\frac{j+m+1}{2j+2}} Y_{\ell,m+\frac{1}{2}}(\omega) \end{pmatrix} & \text{falls } j = \ell - \frac{1}{2}. \end{cases}$$

Die $\Omega_{j,\ell,m}$ bilden eine Orthonormalbasis von $L^2(\mathbb{S}^2 : \mathbb{C}^2)$ für $(\ell, j, m) \in \mathcal{I}$. Zudem sind sie die gemeinsamen Eigenfunktionen der Operatoren L^2 , J^2 (mit dem gesamten Drehimpuls $J = L + S$, sprich der Summe von Bahndrehimpuls und Spin) und J_3 jeweils mit Eigenwerten $\ell(\ell+1)$, $j(j+1)$ und m . Der Unterraum $\mathfrak{H}_{j,\ell,m}^{(0)}$, der zum gemeinsamen Eigenraum des gesamten Drehimpulses J und des Bahndrehimpulses L gehört, ist durch

$$\mathfrak{H}_{j,\ell,m}^{(0)} = \text{span}\{x \mapsto |x|^{-1} f(|x|) \Omega_{j,\ell,m}(x/|x|) : f \in L^2(\mathbb{R}_+)\}$$

gegeben. Dies führt auf die orthogonale Zerlegung

$$L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^2) = \bigoplus_{\ell \in \mathbb{N}_0} \bigoplus_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \mathfrak{H}_{j,\ell}^{(0)} := \bigoplus_{(\ell,j,m) \in \mathcal{I}} \mathfrak{H}_{j,\ell,m}^{(0)}$$

des Hilbertraums der Zweier-Spinoren.

Der Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4)$ wird mit Hilfe der *sphärischen Dirac-Spinoren*

$$\Phi_{j,\ell,m}^+ = \begin{pmatrix} i\Omega_{j,\ell,m} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \Phi_{j,\ell,m}^- = \begin{pmatrix} 0 \\ -\Omega_{j,2j-\ell,m} \end{pmatrix}$$

zerlegt. Die $\Phi_{j,\ell,m}^\pm$ bilden eine Orthonormalbasis von $L^2(\mathbb{S}^2 : \mathbb{C}^4)$ für $(\ell, j, m) \in \mathcal{I}$ und es gilt analog

$$L^2(\mathbb{R}^3 : \mathbb{C}^4) = \bigoplus_{\ell \in \mathbb{N}_0} \bigoplus_{\frac{1}{2} \leq j = \ell \pm \frac{1}{2}} \mathfrak{H}_{j,\ell} := \bigoplus_{(\ell,j,m) \in \mathcal{I}} \mathfrak{H}_{j,\ell,m},$$

wobei nun

$$\mathfrak{H}_{j,\ell,m} = \text{span} \left\{ x \mapsto \frac{f^+(|x|)}{|x|} \Phi_{j,\ell,m}^+(x/|x|) + \frac{f^-(|x|)}{|x|} \Phi_{j,\ell,m}^-(x/|x|) : f^+, f^- \in L^2(\mathbb{R}_+) \right\}.$$

Die orthogonale Projektion auf diese Räume wird mit $\Pi_{j,\ell}$ beziehungsweise $\Pi_{j,\ell,m}$ bezeichnet. Man bemerkt, dass die $\Phi_{j,\ell,m}^\pm$ keine Eigenfunktionen von L^2 mehr sind.

Anhang D

Anhang zu Hardy-Operatoren und Sobolew-Normen in L^p

Im ersten Abschnitt geben wir einen gestraffteren Beweis für ein Hörmander-Multiplikator-Theorem für $|p|^\alpha + V$ mit $V \geq 0$ wieder, welches zuerst von Hebisch [85, Theorem 3.8] bewiesen wurde. Im Anschluß beweisen wir einen Hörmander-Multiplikator-Satz für $|p|^\alpha + a|x|^{-\alpha}$ mit $a \geq 0$, welcher auf dem abstrakten Spektralmultiplikator-Satz [85, Theorem 3.1] beruht. Im letzten Abschnitt zeigen wir einige interessante Hardy–Sobolew-Ungleichungen.

D.1 Ein Hörmander-Multiplikator-Theorem für $|p|^\alpha + V$

In [84] gelang es Hebisch ein Hörmander-Multiplikator-Theorem für $-\Delta + V$ in $L^2(\mathbb{R}^d)$ zu beweisen, wenn $V \geq 0$. (Genauer gesagt meinen wir mit $-\Delta + V$ den selbstadjungierten Operator in $L^2(\mathbb{R}^d)$, den man durch die Friedrichs-Erweiterung der zugehörigen quadratischen Form erhält, die zunächst auf $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ definiert ist.) Der Beweis beruht wesentlich auf Schranken an den Wärmeleitungskern $\exp(\Delta - V)(x, y)$, welcher mit der Trotter-Formel nach oben durch $\exp(\Delta)(x, y)$ abgeschätzt werden kann.

Natürlich kann die Trotter-Formel auch für $\exp(-(|p|^\alpha + V))$ mit $\alpha \in (0, 2)$ und $V \geq 0$ verwendet werden. Wie wir bereits in Kapitel 8 gesehen haben, ist es allerdings bei weitem nicht klar, ob man mit den Schranken an $e^{-|p|^\alpha}$ überhaupt ein Mikhlin-Multiplikator-Theorem für $|p|^\alpha + V$ beweisen kann. Der Grund hierfür war, dass der Wärmeleitungskern lediglich algebraisch abfällt, was es erschwerte, den Beitrag des „schlechten Teils“ der Calderón–Zygmund-Zerlegung zu kontrollieren, siehe insbesondere (8.12). (Wir machen bereits jetzt auf die Schranke (D.7a) aufmerksam, welche der Schranke (8.12) stark ähnelt, allerdings relativ einfach bewiesen werden kann.) Tatsächlich gelang es Hebisch in [85, Theorem 3.8] auch ein Hörmander-Multiplikator-Theorem für $|p|^\alpha + V$ zu zeigen, zumindest, wenn $d = 1$ und $\alpha > 1$ sind. Andernfalls muss eine zusätzliche Annahme erfüllt sein, damit der Beweis (welcher wieder auf einer Calderón–Zygmund-Zerlegung beruht) funktioniert. Das Ziel dieses Abschnitts ist es, seinen Beweis zu straffen und herauszustellen, woher die Einschränkungen an d und α kommen. Die neue Beobachtung ist, dass der Beweis tatsächlich ein Multiplikator-Theorem für alle $d \in \mathbb{N}$ und $\alpha \in (0, 2)$ liefert, wenn der Multiplikator kompakt getragen und hinreichend regulär ist, siehe Behauptung D.1.9.

In diesem Abschnitt werden wir häufig die folgende Notation verwenden, welche es erlaubt Integalkerne von Funktionen $F(|p|^\alpha + V)$ quantitativ zu behandeln.

Sei $\omega_b(x, y) = (1 + |x - y|)^b$ für ein $b \in \mathbb{R}$. Dann definiert man für eine messbare, komplexwertige Funktion $K(x, y)$ auf $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ die b -te Schur-Norm

$$\|K\|_b := \max \left\{ \sup_x \int |K(x, y)| \omega_b(x, y) dy, \sup_y \int |K(x, y)| \omega_b(x, y) dx \right\}. \quad (\text{D.1})$$

Man bemerkt, dass K einen L^p -beschränkten ($1 \leq p \leq \infty$) Integraloperator definiert, falls $\|K\|_0 < \infty$, was aus Youngs Ungleichung für Integraloperatoren folgt (siehe beispielsweise [161, Theorem 0.3.1]).

Unter der folgenden technischen Annahme an punktweise Schranken von kompakt getragenen, glatten Funktionen des Operators $\psi(|p|^\alpha + V)$ (die durch den Spektralsatz definiert sind) ist es möglich, ein Hörmander-Multiplikator-Theorem zu zeigen.

Annahme D.1.1. *Seien*

- $d = 1$ und $\alpha \in (0, 1]$, oder
- $d \in \mathbb{N} \setminus \{1\}$ und $\alpha \in (0, 2)$,

dann gilt folgende Aussage.

Sei $\psi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ mit $\text{supp } \psi \subseteq [-1, 1]$ und $\psi(x) = 1$ für $x \in [0, 2^{-\alpha/2}]$ und definiere $\psi_k(\lambda) = \psi(2^{\alpha k} \lambda)$ für $k \in \mathbb{Z}$. Dann gibt es ein $\varepsilon > 0$, sodass für alle $0 \leq c < d + \varepsilon$ die Schranke

$$|\psi_k(|p|^\alpha + V)(x, y)| \leq A_\psi 2^{-kd} (1 + 2^{-k} |x - y|)^{-c} \quad (\text{D.2})$$

für alle $x, y \in \mathbb{R}^d$ gilt.

Tatsächlich ist es möglich, (D.2) unter der schwächeren Bedingung $c < \alpha$ zu zeigen, siehe Lemma D.1.8. Es wird später ersichtlich sein, dass die Annahme wesentlich ist, um eine bekannte Eigenschaft des Hardy–Littlewoodschen Maximaloperators ausnutzen zu können. Um sie zu verwenden, muss die punktweise Schranke an $\psi_k(|p|^\alpha + V)$ wenigstens für ein $c > d$ gelten, siehe (D.17). Aus diesem Grund können wir auch den Fall $d = 1$ und $\alpha > 1$ ohne weitere Annahmen behandeln. In diesem Fall wurde das Multiplikator-Theorem auch kürzlich von Chen u. a. [22] (allerdings mit völlig anderen Methoden) bewiesen.

Wir formulieren nun

Satz D.1.2. *Seien $\alpha \in (0, 2)$, $0 \leq b \leq \tilde{b} < b_0 < \alpha$,*

$$s := s(d, b, \tilde{b}, \kappa) = \max\{b + d/2, b - \tilde{b} + \kappa\} \quad (\text{D.3})$$

mit

$$\kappa = \kappa(d, b_0, \tilde{b}) = 2^{[(\tilde{b} + d/2)/(b_0 - \tilde{b})]} ((\tilde{b} + d/2)(1 + 1/(b_0 - \tilde{b})) + 1). \quad (\text{D.4})$$

Sei zudem Annahme D.1.1 erfüllt. Ist für $\varepsilon > 0$, $0 \neq \varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}_+)$ der Multiplikator F eine messbare und beschränkte Funktion, sodass

$$\sup_{t>0} \|\varphi(\cdot)F(t)\|_{H^{s+(1+\varepsilon)/2}(\mathbb{R})} < \infty \quad (\text{D.5})$$

gilt, dann ist $F(|p|^\alpha + V)$ schwach $L^1 \rightarrow L^1$ -beschränkt und L^p -beschränkt für alle $1 < p < \infty$.

In einem ersten Schritt reduzieren wir den Beweis auf die Verifikation von punktweisen Schranken und Schranken an die Schur-Normen von $F(|p|^\alpha + V)$. Wir verwenden für den Rest dieses Abschnitts die Abkürzung $\mathcal{H}_\alpha := |p|^\alpha + V$.

Beweis von Satz D.1.2. Wegen $\|F\|_\infty < \infty$ ist zunächst $F(\mathcal{H}_\alpha)$ wegen des Spektralsatzes L^2 -beschränkt. Die L^p -Beschränktheit folgt aus dem Interpolationssatz von Marcinkiewicz und der Dualität der L^p -Räume, wenn man zeigen kann, dass $F(\mathcal{H}_\alpha)$ schwach $L^1 \rightarrow L^1$ -beschränkt ist. Dazu führt man eine Calderón–Zygmund-Zerlegung von $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$ auf der Höhe λ durch. Nach dieser Zerlegung gibt es Mengen \mathcal{F} und $\Omega = \bigcup_i Q_i$, wobei $\{Q_i\}$ eine Familie disjunkter dyadischer Würfel ist, sodass $\mathbb{R}^d = \mathcal{F} \cup \Omega$ und $\mathcal{F} \cap \Omega = \emptyset$. Insbesondere ist $|f(x)| \lesssim \lambda$ für fast alle $x \in \mathcal{F}$. Wir definieren $k_i = \lceil \log_2(\text{diam } Q_i) \rceil$ und zerlegen $f = g + \sum_i b_i$, wobei $\text{supp } b_i \subseteq Q_i$ und f, g, b_i sowie Q_i die Schranken

$$|g(x)| \lesssim \lambda \quad \int |b_i| \lesssim \lambda |Q_i| \quad \sum_i |Q_i| \lesssim \|f\|_1 / \lambda$$

erfüllen. Als Nächstes definieren wir $0 \leq \varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ mit $\text{supp } \varphi \subseteq [2^{-\alpha}, 2^{\alpha/2}]$ so, dass $\sum_{k \in \mathbb{Z}} \varphi(2^{\alpha k} \lambda) = 1$ für alle $\lambda > 0$. Sei darüberhinaus $0 \leq \psi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ so, dass $\text{supp } \psi \subseteq [-1, 1]$ mit $\psi(\lambda) = 1$ für $\lambda \in [0, 2^{-\alpha/2}]$. Schließlich definiert man

$$F_k(\lambda) := \varphi(2^{\alpha k} \lambda) F(\lambda) \quad \text{und} \quad \psi_k(\lambda) = \psi(2^{\alpha k} \lambda).$$

Wenn $j < k$, dann ist $\psi_k F_j = 0$ (einerseits ist $\lambda \leq 2^{-\alpha k}$ und andererseits $\lambda \geq 2^{-\alpha j - \alpha}$) und somit $\psi_k(\mathcal{H}_\alpha) F_j(\mathcal{H}_\alpha) = 0$. Andererseits ist $\psi_k(\mathcal{H}_\alpha) F_j(\mathcal{H}_\alpha) = F_j(\mathcal{H}_\alpha)$, wenn $j > k$. Damit zerlegt man

$$\begin{aligned} F(\mathcal{H}_\alpha) f &= \sum_{j,i} F_j(\mathcal{H}_\alpha) b_i + F(\mathcal{H}_\alpha) g \\ &= \sum_i \left(\sum_{j \leq k_i} F_j(\mathcal{H}_\alpha) b_i + \sum_{j > k_i} F_j(\mathcal{H}_\alpha) b_i \right) + F(\mathcal{H}_\alpha) g \\ &= \sum_i \sum_{j \leq k_i} F_j(\mathcal{H}_\alpha) b_i + \sum_{i,j} F_j(\mathcal{H}_\alpha) \psi_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) b_i - \sum_i F_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) \psi_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) b_i + F(\mathcal{H}_\alpha) g \\ &= \sum_i \sum_{j \leq k_i} F_j(\mathcal{H}_\alpha) b_i + F(\mathcal{H}_\alpha) \left(\sum_i \psi_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) b_i + g \right) - \sum_i F_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) \psi_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) b_i. \end{aligned}$$

Wir schätzen nun die schwache L^1 -Norm dieses Ausdrucks ab. Es bezeichne Q_i^* die konzentrische Kugel um Q_i mit dem gleichen Mittelpunkt wie Q_i und Radius $2 \text{diam}(Q_i)$ sowie $S := \bigcup_i Q_i^*$. Damit können die schwachen L^1 -Normen der drei Summanden auf der rechten Seite der letzten Ungleichung mittels der Tschebyscheff-Ungleichung, der Schranke $\sum_i |Q_i| \lesssim \|f\|_1 / \lambda$ und der L^2 -Beschränktheit beschränkter Funktionen von \mathcal{H}_α durch

$$\begin{aligned} |\{x : |\sum_i \sum_{j \leq k_i} (F_j(\mathcal{H}_\alpha) b_i)(x)| > \frac{\lambda}{3}\}| &\leq |S| + \frac{3}{\lambda} \int_{S^c} |\sum_i \sum_{j \leq k_i} (F_j(\mathcal{H}_\alpha) b_i)(x)| dx \\ &\lesssim \frac{\|f\|_1}{\lambda} + \frac{3}{\lambda} \int_{S^c} |\sum_i \sum_{j \leq k_i} (F_j(\mathcal{H}_\alpha) b_i)(x)| dx, \end{aligned} \tag{D.6a}$$

$$\begin{aligned} |\{x : |F(\mathcal{H}_\alpha) \left(\sum_i \psi_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) b_i + g \right)| > \frac{\lambda}{3}\}| &\lesssim \lambda^{-2} \left\| \sum_i \psi_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) b_i + g \right\|_2^2 \\ &\lesssim \lambda^{-2} \left(\lambda \|f\|_1 + \left\| \sum_i \psi_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) b_i \right\|_2^2 \right) \end{aligned} \quad (\text{D.6b})$$

und

$$|\{x : \left| \sum_i F_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) \psi_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) b_i \right| > \frac{\lambda}{3}\}| \lesssim \lambda^{-1} \left\| \sum_i F_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) \psi_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) b_i \right\|_1 \quad (\text{D.6c})$$

abgeschätzt werden. Der Satz ist also bewiesen, wenn man

$$\int_{S^c} \left| \sum_i \sum_{j \leq k_i} (F_j(\mathcal{H}_\alpha) b_i)(x) \right| dx \lesssim \sum_i \|b_i\|_1 \leq \|f\|_1, \quad (\text{D.7a})$$

$$\left\| \sum_i \psi_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) b_i \right\|_2^2 \lesssim \lambda \|f\|_1 \quad (\text{D.7b})$$

sowie

$$\left\| \sum_i (F_{k_i} \psi_{k_i})(\mathcal{H}_\alpha) b_i \right\|_1 \lesssim \sum_i \|b_i\|_1 \leq \|f\|_1 \quad (\text{D.7c})$$

verifizieren kann. \square

Im Folgenden verifizieren wir (D.7a) bis (D.7c). Wir beginnen mit (D.7a) und (D.7c), welche, im Gegensatz zu (D.7b), die Annahme D.1.1 *nicht* benötigen.

Um (D.7a) und (D.7c) zu zeigen, zeigen wir, dass $\|F(\mathcal{H}_\alpha)\|_b$ endlich ist, wenn F kompakt getragen und hinreichend regulär ist (siehe Behauptung D.1.6). Die wesentliche Idee zur Beschränkung von $\|F(\mathcal{H}_\alpha)\|_b$ ist, dass man $F(\mathcal{H}_\alpha)$ durch den bereits gut bekannten Wärmeleitungskern $e^{-\mathcal{H}_\alpha}$ ausdrückt. Dazu definiert man $K(\mu) := F(-\log \mu) \mu^{-1}$ und entwickelt $K(\mu) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \hat{K}(n) e^{in\mu}$ in einer Fourier-Reihe. Somit ist $F(\mathcal{H}_\alpha) = K(e^{-\mathcal{H}_\alpha}) e^{-\mathcal{H}_\alpha}$, weshalb nur noch $\|e^{in \exp(-\mathcal{H}_\alpha)} e^{-\mathcal{H}_\alpha}\|_b$ beschränkt werden muss. Dazu schätzen wir im Folgenden $\|e^{-\mathcal{H}_\alpha}\|_b$, $\|e^{in \exp(-\mathcal{H}_\alpha)}\|_b$ sowie $\|e^{in \exp(-\mathcal{H}_\alpha)} e^{-\mathcal{H}_\alpha}\|_b$ ab.

Lemma D.1.3. *Sei $\alpha \in (0, 2)$ und $V \geq 0$. Dann gilt für alle $t > 0$ und $b_0 < \alpha$*

$$\sup_{y \in \mathbb{R}^d} \int |e^{-t\mathcal{H}_\alpha}(x, y)| (1 + t^{-1/\alpha} |x - y|)^{b_0} dx < \infty \quad \text{und} \quad (\text{D.8a})$$

$$\sup_{y \in \mathbb{R}^d} t^{d/\alpha} \int |e^{-t\mathcal{H}_\alpha}(x, y)|^2 dx < \infty. \quad (\text{D.8b})$$

Beweis. Da $V \geq 0$, folgt aus der Trotter-Formel, dass es genügt (D.8a) und (D.8b) zu zeigen, wobei $e^{-t\mathcal{H}_\alpha}(x, y)$ durch $e^{-t|p|^\alpha}(x, y)$ ersetzt wird. Des Weiteren folgt aus der Substitution $x \mapsto t^{1/\alpha} x$, dass es ausreicht den Fall $t = 1$ zu betrachten.

Wegen

$$1 \wedge \frac{1}{|x - y|^{d+\alpha}} \sim \frac{1}{(1 + |x - y|)^{d+\alpha}}$$

ist für alle $y \in \mathbb{R}^d$ das Integral

$$\int_{\mathbb{R}^d} \frac{(1 + |x - y|)^{b_0}}{(1 + |x - y|)^{d+\alpha}} dx$$

endlich, falls $b_0 < \alpha$. Dies zeigt (D.8a).

Aus dem Satz von Plancherel folgt andererseits

$$\int_{\mathbb{R}^d} |e^{-|p|^\alpha}(x, y)|^2 dx \sim \int_{\mathbb{R}^d} e^{-2|p|^\alpha} dp = \text{konst},$$

was die Endlichkeit der linken Seite von (D.8b) zeigt. \square

Aus Lemma D.1.3 erhält man mit [85, Theorem 2.1] Schranken an die Schur-Normen von $e^{in \exp(-\mathcal{H}_\alpha)}$, welche wir in dem folgenden Hilfssatz zusammenfassen.

Lemma D.1.4. *Seien $\alpha \in (0, 2)$, $0 \leq \tilde{b} < b_0 < \alpha$ und $n \in \mathbb{R}$. Dann gibt es ein $A > 0$, welches nur von b_0, \tilde{b}, d und $\|e^{-\mathcal{H}_\alpha}\|_{b_0}$ abhängt, sodass*

$$\left\| e^{in \exp(-\mathcal{H}_\alpha)} \right\|_{\tilde{b}} \leq A(1 + |n|)^\kappa \quad (\text{D.9})$$

gilt, wobei $\kappa = \kappa(d, b_0, \tilde{b}) = 2^{[(\tilde{b}+d/2)/(b_0-\tilde{b})]}((\tilde{b} + d/2)(1 + 1/(b_0 - \tilde{b})) + 1)$.

Mit Hilfe dieser Schranke erhält man (ähnlich wie in [83, Theorem 3.1])

Lemma D.1.5. *Seien $\alpha \in (0, 2)$, $0 \leq b \leq \tilde{b} < b_0 < \alpha$, $n \in \mathbb{R}$, κ wie in Lemma D.1.4 sowie $s = s(d, b, \tilde{b}, \kappa) = \max\{b + d/2, b - \tilde{b} + \kappa\}$ aus (D.3). Dann ist*

$$\|e^{in \exp(-\mathcal{H}_\alpha)} e^{-\mathcal{H}_\alpha}\|_b \lesssim_{b_0, \tilde{b}, d} (1 + |n|)^s. \quad (\text{D.10})$$

Beweis. Für $K(x, y) = e^{-\mathcal{H}_\alpha}(x, y)$ zerlegen wir für ein beliebiges $\ell \geq 0$ (welches zum Schluß gewählt wird)

$$\int_{\mathbb{R}^d} |(e^{inK} K)(x, y)| \omega_b(x, y) dx = \left(\int_{|x-y| \leq \ell} + \int_{|x-y| \geq \ell} \right) |(e^{inK} K)(x, y)| \omega_b(x, y) dx.$$

Das erste Integral beschränken wir mit der Cauchy-Schwarz-Ungleichung, der Unitarität von e^{inK} (das heißt $\|e^{inK}\|_{L^2 \rightarrow L^2} = 1$) und (D.8b) durch

$$\begin{aligned} \int_{|x-y| \leq \ell} |(e^{inK} K)(x, y)| \omega_b(x, y) dx &\lesssim (1 + \ell)^b \ell^{d/2} \|e^{inK} K\|_{L^2(B_y(\ell))} \\ &\leq (1 + \ell)^{b+d/2} \|K\|_{L^2}, \end{aligned}$$

wobei $B_y(\ell)$ die um y zentrierte Kugel mit Radius ℓ bezeichnet. Für das zweite Integral verwenden wir die Submultiplikativität von ω_b , (D.8a) und (D.9) und erhalten

$$\begin{aligned} \int_{|x-y| \geq \ell} |(e^{inK} K)(x, y)| \omega_{\tilde{b}}(x, y) \omega_{b-\tilde{b}}(x, y) dx \\ \leq (1 + \ell)^{b-\tilde{b}} \|e^{inK} K\|_{\tilde{b}} \leq (1 + \ell)^{b-\tilde{b}} \|e^{inK}\|_{\tilde{b}} \|K\|_{b_0} \lesssim (1 + \ell)^{b-\tilde{b}} (1 + |n|)^\kappa \|K\|_{b_0}. \end{aligned}$$

Wählt man $\ell = |n|$ folgt (D.10). \square

Die beiden letzten Lemmata zeigen, dass die Endlichkeit von nur sehr niedrigen Schur-Normen dem langsamen, algebraischen Abfall von $\exp(-\mathcal{H}_\alpha)(x, y)$ für große Abstände $|x - y|$ geschuldet sind.

Die folgende Behauptung erlaubt es, Schur-Normen von kompakt getragenen, hinreichend regulären Funktionen von \mathcal{H}_α zu kontrollieren. Diese Schranken sind wesentlich für die Verifikation von (D.7a) und (D.7c).

Behauptung D.1.6. *Seien $\alpha \in (0, 2)$, $0 \leq b \leq \tilde{b} < b_0 < \alpha$, $s := s(d, b, \tilde{b}, \kappa)$ aus (D.3), $\kappa = \kappa(d, b_0, \tilde{b})$ aus (D.4) und $\varepsilon > 0$. Falls $F \in H^{s+(1+\varepsilon)/2}(\mathbb{R})$ mit $\text{supp } F \subseteq [\eta, \xi]$ und $-\infty < \eta < \xi < \infty$, dann gilt*

$$\|F(\mathcal{H}_\alpha)\|_b \lesssim \|F\|_{H^{s+(1+\varepsilon)/2}}. \quad (\text{D.11})$$

Ist weiter $G \in H^{\kappa+(1+\varepsilon)/2}(\mathbb{R})$, dann gilt auch

$$\|G(e^{-\mathcal{H}_\alpha})\|_b \lesssim \|G\|_{H^{\kappa+(1+\varepsilon)/2}}. \quad (\text{D.12})$$

Beweis. Wir definieren die Funktion $K(\lambda) := \lambda^{-1}F(-\log \lambda)$, welche

$$\|K\|_{H^{s+(1+\varepsilon)/2}} \lesssim \|F\|_{H^{s+(1+\varepsilon)/2}} \quad \text{und} \quad \text{supp } K \subseteq [e^{-\xi}, e^{-\eta}]$$

erfüllt. Als Nächstes entwickeln wir $K(\lambda) = \sum_n \hat{K}(n)e^{in\lambda}$, wobei $\hat{K}(n)$ die Fourier-Koeffizienten von K bezeichnen. Daher ist

$$F(\mathcal{H}_\alpha) = K(e^{-\mathcal{H}_\alpha})e^{-\mathcal{H}_\alpha} = \sum \hat{K}(n)e^{in \exp(-\mathcal{H}_\alpha)}e^{-\mathcal{H}_\alpha}$$

und mit (D.10) und der Cauchy-Schwarz-Ungleichung erhält man

$$\begin{aligned} \|F(\mathcal{H}_\alpha)\|_b &\lesssim \sum_n |\hat{K}(n)|(1+|n|)^s \\ &\leq \left(\sum_n |\hat{K}(n)|^2 (1+|n|)^{2s+1+\varepsilon} \right)^{1/2} \left(\sum_n (1+|n|)^{-1-\varepsilon} \right)^{1/2} \\ &\lesssim \|K\|_{H^{s+(1+\varepsilon)/2}} \lesssim \|F\|_{H^{s+(1+\varepsilon)/2}}. \end{aligned}$$

Dies zeigt (D.11).

Ähnlich beweist man (D.12). Aus Lemma D.1.3 folgt, dass es eine Konstante $A > 0$ gibt, sodass $\|e^{-\mathcal{H}_\alpha}\|_{L^2 \rightarrow L^2} \leq A$, das heißt $\text{spec}(e^{-\mathcal{H}_\alpha}) \subseteq [-A, A]$. Somit hängt $G(e^{-\mathcal{H}_\alpha})$ nicht von den Werten von G außerhalb des Intervalls $[-A, A]$ ab. Setzt man $H = \phi G$, wobei $\phi \in C_c^\infty([-2A, 2A])$ mit $\phi = 1$ auf $[-A, A]$, so gilt $G(e^{-\mathcal{H}_\alpha}) = H(e^{-\mathcal{H}_\alpha})$. Entwickelt man nun wieder $H(e^{-\mathcal{H}_\alpha}) = \sum_n \hat{H}(n)e^{in \exp(-\mathcal{H}_\alpha)}$ in einer Fourierreihe, erhält man mit (D.9) und Cauchy-Schwarz

$$\begin{aligned} \|H(e^{-\mathcal{H}_\alpha})\|_b &\leq \sum_n |\hat{H}(n)| \|e^{in \exp(-\mathcal{H}_\alpha)}\|_b \lesssim \sum_n |\hat{H}(n)|(1+|n|)^\kappa \lesssim \|H\|_{H^{\kappa+(1+\varepsilon)/2}} \\ &\lesssim \|G\|_{H^{\kappa+(1+\varepsilon)/2}}, \end{aligned}$$

was (D.12) zeigt. □

Mit Hilfe von Dilatationen erhalten wir

Korollar D.1.7. Seien $\alpha \in (0, 2)$, $0 \leq b \leq \tilde{b} < b_0 < \alpha$, $s := s(d, b, \tilde{b}, \kappa)$ aus (D.3), $\varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ mit $\text{supp } \varphi \subseteq [2^{-\alpha}, 2^{\alpha/2}]$, $F_k(\lambda) := \varphi(2^{\alpha k} \lambda) F(\lambda)$ und F aus Satz D.1.2. Dann gilt

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^d} \int |F_k(\mathcal{H}_\alpha)(x, y)| (1 + 2^{-k} |x - y|)^b dy \lesssim \|\varphi(\cdot) F(2^{-\alpha k} \cdot)\|_{H^{s+(1+\varepsilon)/2}} \lesssim 1. \quad (\text{D.13})$$

Bevor wir diese Aussage zeigen, verifizieren wir die Bedingungen (D.7a) und (D.7c).

Beweis von (D.7a) und (D.7c). Für $y \in Q_i$ und $x \in (Q_i^*)^c$ gilt $|x - y| \gtrsim 2^{k_i}$. Damit und mit Korollar D.1.7 erhalten wir für ein beliebiges $0 < b < \alpha$

$$\begin{aligned} \int_{(Q_i^*)^c} |(F_j(\mathcal{H}_\alpha) b_i)(x)| dx &\leq \|b_i\|_1 \sup_{y \in Q_i} \int_{(Q_i^*)^c} |F_j(\mathcal{H}_\alpha)(x, y)| 2^{b(j-k_i)} \cdot 2^{-b(j-k_i)} dx \\ &\lesssim 2^{b(j-k_i)} \|b_i\|_1 \sup_{y \in Q_i} \int_{|x-y| \geq 2^{k_i}} |F_j(\mathcal{H}_\alpha)(x, y)| (1 + 2^{-j} |x - y|)^b dx \\ &\leq 2^{b(j-k_i)} \|b_i\|_1 \sup_{y \in \mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} |F_j(\mathcal{H}_\alpha)(x, y)| (1 + 2^{-j} |x - y|)^b dx \\ &\lesssim 2^{b(j-k_i)} \|b_i\|_1. \end{aligned}$$

Summiert man diese Abschätzung über alle $j \leq k_i$, erhält man

$$\sum_{j \leq k_i} \int_{(Q_i^*)^c} |(F_j(\mathcal{H}_\alpha) b_i)(x)| dx \lesssim \sum_{j \leq k_i} 2^{b(j-k_i)} \|b_i\|_1 \lesssim \|b_i\|_1,$$

was gerade (D.7a) ist.

Der Beweis von (D.7c) ist noch simpler. Da F_k und ψ_k die Bedingungen von Korollar D.1.7 erfüllen, folgt

$$\|(F_k \psi_k)(\mathcal{H}_\alpha)\|_{L^1 \rightarrow L^1} = \|(F_k \psi_k)(\mathcal{H}_\alpha)\|_0 \lesssim \|\varphi F(2^{-\alpha k} \cdot)\|_{H^{s+(1+\varepsilon)/2}} \|\psi_0\|_{H^{s+(1+\varepsilon)/2}} \lesssim 1,$$

wobei jetzt $s = s(d, 0, 0, \kappa)$ aus (D.3) ist. Dies impliziert Bedingung (D.7c), denn

$$\left\| \sum_i (F_{k_i} \psi_{k_i})(\mathcal{H}_\alpha) b_i \right\|_1 \leq \sum_i \|(F_{k_i} \psi_{k_i})(\mathcal{H}_\alpha)\|_0 \|b_i\|_1 \lesssim \|f\|_1.$$

□

Wir ergänzen nun den

Beweis von Korollar D.1.7. Wir definieren Dilatationen δ_t durch $\delta_t x := tx$ für $x \in \mathbb{R}^d$ und $\delta_t f := f \circ \delta_t$, das heißt $(\delta_t f)(x) = f(tx)$ für Funktionen f auf \mathbb{R}^d . Dann gilt

$$\delta_{2^k} \mathcal{H}_\alpha \delta_{2^{-k}} = \delta_{2^k} |p|^\alpha \delta_{2^{-k}} + \delta_{2^k} V \delta_{2^{-k}} = 2^{-\alpha k} (|p|^\alpha + 2^{\alpha k} V \circ \delta_{2^k}) =: 2^{-\alpha k} (\mathcal{H}_\alpha)_k,$$

wobei $(\mathcal{H}_\alpha)_k := |p|^\alpha + 2^{\alpha k} V \circ \delta_{2^k}$, das heißt $\mathcal{H}_\alpha = 2^{-\alpha k} \delta_{2^{-k}} (\mathcal{H}_\alpha)_k \delta_{2^k}$. Definiert man $\tilde{F}_k := F_k \circ \delta_{2^{-\alpha k}}$, sprich $F_k(\lambda) = \tilde{F}_k(2^{\alpha k} \lambda)$, erhält man

$$F_k(\mathcal{H}_\alpha) = \delta_{2^{-k}} \tilde{F}_k((\mathcal{H}_\alpha)_k) \delta_{2^k}.$$

Wir behaupten nun

$$F_k(\mathcal{H}_\alpha)(x, y) = 2^{-kd} \tilde{F}_k((\mathcal{H}_\alpha)_k)(2^{-k}x, 2^{-k}y). \quad (\text{D.14})$$

Dies ist ersichtlich, wenn man das innere Produkt der beiden Operatoren, die durch die obigen Integralkerne definiert sind, mit Funktionen $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$ nimmt. Mit der Beobachtung $(g, \delta_{2^k} f) = 2^{-kd}(\delta_{2^{-k}} g, f)$ erhalten wir

$$\begin{aligned} (f, F_k(\mathcal{H}_\alpha)f) &= (f, \delta_{2^{-k}} \tilde{F}_k((\mathcal{H}_\alpha)_k) \delta_{2^k} f) = 2^{+kd} (\delta_{2^k} f, \tilde{F}_k((\mathcal{H}_\alpha)_k) \delta_{2^k} f) \\ &= 2^{-kd} \int f(x) \tilde{F}_k((\mathcal{H}_\alpha)_k)(2^{-k}x, 2^{-k}y) f(y) dx dy. \end{aligned}$$

Wenden wir (D.14) und Behauptung D.1.6 mit der kompakt getragenen und hinreichend regulären Funktion $\tilde{F}_k(\lambda) = \varphi(\lambda)F(2^{-\alpha k}\lambda)$ und dem Operator $(\mathcal{H}_\alpha)_k = |p|^\alpha + 2^{\alpha k}V \circ \delta_{2^k}$ an (wir erinnern daran, dass im Beweis dieser Behauptung lediglich der Wärmeleitungskern mit $V = 0$ eine Rolle spielte), erhalten wir mit der Substitution $y \mapsto 2^k y$,

$$\begin{aligned} &\sup_{x \in \mathbb{R}^d} \int |F_k(\mathcal{H}_\alpha)(x, y)|(1 + 2^{-k}|x - y|)^b dy \\ &= \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \int |\tilde{F}_k((\mathcal{H}_\alpha)_k)(x, y)|(1 + |x - y|)^b dy \\ &\lesssim \|\tilde{F}_k\|_{H^{s+(1+\varepsilon)/2}} = \|\varphi(\cdot)F(2^{-\alpha k}\cdot)\|_{H^{s+(1+\varepsilon)/2}} \end{aligned}$$

und die rechte Seite ist wegen der Annahme von Satz D.1.2 gleichmäßig in α und k beschränkt. \square

Der Beweis von (D.7b) beruht auf exzellenten *punktweisen* Schranken von $|\psi_k(\mathcal{H}_\alpha)(x, y)|$. An diesem Punkt kommt Annahme D.1.1 ins Spiel. Unglücklicherweise sind wir nur in der Lage, sie für $c < \alpha$ zu verifizieren, da der Wärmeleitungskern lediglich algebraisch abfällt.

Behauptung D.1.8. *Seien $\alpha \in (0, 2)$, $\psi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ mit $\text{supp } \psi \subseteq [-1, 1]$ und $\psi(x) = 1$ für $x \in [0, 2^{-\alpha/2}]$. Sei weiter $\psi_k(\lambda) = \psi(2^{\alpha k}\lambda)$. Dann gilt für alle $0 \leq c < \alpha$*

$$|\psi_k(\mathcal{H}_\alpha)(x, y)| \lesssim 2^{-kd}(1 + 2^{-k}|x - y|)^{-c}$$

für alle $x, y \in \mathbb{R}^d$.

Beweis. Wir schreiben $\psi_0(\mathcal{H}_\alpha) = (\psi_0(\mathcal{H}_\alpha)e^{\mathcal{H}_\alpha})e^{-\mathcal{H}_\alpha}$ und bemerken, dass die Funktion $F(\lambda) := \psi_0(\lambda)e^\lambda$ die Bedingungen von Behauptung D.1.6 erfüllt. Für $k = 0$ impliziert Behauptung D.1.6 dann für alle $0 \leq c < \alpha$ (mit der Submultiplikativität von ω_c)

$$\begin{aligned} |\omega_c(x, y)\psi_0(\mathcal{H}_\alpha)(x, y)| &\leq \left| \int (\psi_0(\mathcal{H}_\alpha)e^{\mathcal{H}_\alpha})(x, z)\omega_c(x, z) e^{-\mathcal{H}_\alpha}(z, y)\omega_c(z, y) dz \right| \\ &\leq \|\psi_0(\mathcal{H}_\alpha)e^{\mathcal{H}_\alpha}\|_c \sup_{x \in \mathbb{R}^d} e^{-|p|^\alpha(x)}(1 + |x|)^c \lesssim 1, \end{aligned}$$

also die gewünschte Schranke. Für $k \neq 0$ verwendet man die Dilatationsmethoden aus Korollar D.1.7 mit dem Multiplikator

$$F_k(\lambda) := \psi_k(\lambda)e^{2^{\alpha k}\lambda} \equiv \psi(2^{\alpha k}\lambda)F(2^{\alpha k}\lambda)$$

(anstatt $F_k(\lambda) := \varphi(2^{\alpha k} \lambda)F(\lambda)$), woraus die Endlichkeit von

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^d} \int (\psi_k(\mathcal{H}_\alpha) e^{2^{\alpha k} \mathcal{H}_\alpha})(x, y) (1 + 2^{-k}|x - y|)^c dy \leq \|\psi_0 F\|_{H^{s+(1+\varepsilon)/2}}$$

und mit dem obigem Argument die behauptete Schranke von $|\psi_k(\mathcal{H}_\alpha)(x, y)|$ folgt. \square

Obwohl $\sup_x e^{-|p|^\alpha(x)}(1 + |x|)^c$ sogar für alle $c \leq d + \alpha$ endlich ist, folgen aus dem Beweis keine besseren punktweise Schranken an $|\psi_k(\mathcal{H}_\alpha)(x, y)|$. Andererseits ist die Endlichkeit der Schur-Norm $\|\psi_k(\mathcal{H}_\alpha)\|_b$ für $b < \alpha$ ein Indiz, dass bessere Schranken plausibel sind, insbesondere solche, die wir in Annahme D.1.1 postulieren.

Um fortzufahren, nehmen wir im Folgenden an, dass Annahme D.1.1 erfüllt ist, das heißt, es gibt ein $\varepsilon > 0$, sodass für alle $c < d + \varepsilon$

$$|\psi_k(\mathcal{H}_\alpha)(x, y)| \lesssim 2^{-kd}(1 + 2^{-k}|x - y|)^{-c} \tag{D.15}$$

gilt. Wir erinnern, dass die Annahme im Fall $d = 1$ und $\alpha > 1$ wegen Behauptung D.1.8 automatisch erfüllt ist. Wir bemerken an dieser Stelle, dass diese Schranke, zusammen mit Korollar D.1.7, ebenfalls (D.7c) (wofür wir $\|(\psi_k F_k)(\mathcal{H}_\alpha)\|_{L^1 \rightarrow L^1} \lesssim 1$ zeigen mussten) impliziert.

In jedem Fall erlaubt uns (D.15) eine bekannte Eigenschaft des Hardy–Littlewoodschen Maximaloperators auszunutzen (siehe (D.17)), welche wesentlich für die Verifikation von (D.7b), sprich $\|\sum_i \psi_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) b_i\|_2^2 \lesssim \lambda \|f\|_1$, ist.

Beweis von (D.7b). Es bezeichne y_0 den Mittelpunkt eines fixierten dyadischen Würfels Q_i . Falls $y \in Q_i$, dann folgt aus der Dreiecksungleichung und $|y - y_0| \lesssim 2^{k_i}$ für $y \in Q_i$

$$1 + 2^{-k_i}|x - y| \leq 1 + 2^{-k_i}(|y - y_0| + |x - y_0|) \lesssim 1 + 2^{-k_i}|x - y_0| \quad \text{für } x \in \mathbb{R}^d.$$

Wiederholt man das Argument nochmals, erhält man auch die umgekehrte Schranke, zusammengefasst also

$$1 + 2^{-k_i}|x - y| \sim 1 + 2^{-k_i}|x - y_0| \quad \text{für } x \in \mathbb{R}^d, y \in Q_i. \tag{D.16}$$

Mit dieser Abschätzung, (D.15) sowie $\int |b_i| \lesssim \lambda |Q_i|$, erhält man

$$\begin{aligned} |\psi_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) b_i(x)| &\leq \int 2^{-k_i d} (1 + 2^{-k_i}|x - y|)^{-c} |b_i(y)| dy \\ &\lesssim \lambda |Q_i| 2^{-k_i d} (1 + 2^{-k_i}|x - y_0|)^{-c} \lesssim \lambda \int_{Q_i} 2^{-k_i d} (1 + 2^{-k_i}|x - y|)^{-c} dy \\ &= \lambda (2^{-k_i d} (1 + 2^{-k_i}|\cdot|)^{-c} * \chi_{Q_i})(x). \end{aligned}$$

Für ein beliebiges $h \in L^2(\mathbb{R}^d)$ gilt

$$|(h, 2^{-k_i d} (1 + 2^{-k_i}|\cdot|)^{-c} * \chi_{Q_i})| = |(2^{-k_i d} (1 + 2^{-k_i}|\cdot|)^{-c} * h, \chi_{Q_i})| \lesssim (Mh, \chi_{Q_i}), \tag{D.17}$$

wobei M den (zentrierten) Hardy–Littlewoodschen Maximaloperator bezeichnet und wir

$$\sup_{\varepsilon > 0} |(\phi_\varepsilon * f)(x)| \lesssim (Mf)(x)$$

für $f \in L^p(\mathbb{R}^d)$ (mit $1 \leq p \leq \infty$) und einen glättenden Kern $\phi_\varepsilon(x) = \varepsilon^{-d} \phi(x/\varepsilon)$, welcher eine radial abfallende, integrierbare Majorante besitzt, verwendet haben (siehe beispielsweise

[166, Kapitel III, §3, Theorem 2]). Da M insbesondere L^2 -beschränkt ist (siehe beispielsweise [166, Kapitel I, §1, Theorem 1]), erhält man zusammen mit den Eigenschaften der Calderón-Zygmund-Zerlegung

$$\begin{aligned} |(h, \sum_i \psi_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) b_i)| &\lesssim (Mh, \sum_i \lambda \chi_{Q_i}) \lesssim \|h\|_2 \|\lambda \sum_i \chi_{Q_i}\|_2 \\ &\lesssim \|h\|_2 \cdot \lambda \sqrt{\sum_i |Q_i|} \lesssim \|h\|_2 \cdot \sqrt{\lambda \|f\|_1}. \end{aligned}$$

Dies schließt den Beweis von (D.7b) und damit den Beweis von Satz D.1.2 unter der Voraussetzung, dass Annahme D.1.1 erfüllt ist. \square

Wir bemerken schließlich, dass dieser Beweis immerhin ein Hörmander-Multiplikator-Theorem für kompakt getragene Funktionen liefert.

Behauptung D.1.9. *Seien $\alpha \in (0, 2)$, $0 \leq b \leq \tilde{b} < b_0 < \alpha$ und $s = s(d, b, \tilde{b}, \kappa)$ aus (D.3). Ist für $\varepsilon > 0$, $0 \neq \varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}_+)$, der Multiplikator F eine messbare, kompakt getragene Funktion, sodass*

$$\sup_{t>0} \|\varphi F(t \cdot)\|_{H^{s+(1+\varepsilon)/2}(\mathbb{R})} < \infty$$

gilt, dann ist $F(\mathcal{H}_\alpha)$ schwach $L^1 \rightarrow L^1$ -beschränkt und L^p -beschränkt für alle $1 < p < \infty$.

Beweis. Wie im Beweis von Satz D.1.2 genügt es zu zeigen, dass $F(\mathcal{H}_\alpha)$ schwach L^1 -beschränkt ist. Dazu führt man dieselbe Calderón-Zygmund-Zerlegung durch, weshalb es genügt, (D.7a) bis (D.7c) zu zeigen. Wir haben bereits gesehen, dass (D.7a) und (D.7c) auch für Funktionen F gilt, die nicht kompakt getragen sind. Es verbleibt wieder (D.7b) nachzuweisen. Da nun aber F kompakt getragen ist, kann die linke Seite von (D.6b) direkter abgeschätzt werden. Wir erinnern an die gewünschte Ungleichung

$$|\{x : |F(\mathcal{H}_\alpha) \left(\sum_i \psi_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) b_i + g \right)| > \frac{\lambda}{3}\}| \lesssim \lambda^{-1} \|f\|_1. \quad (\text{D.18})$$

Wie zuvor folgt aus der L^2 -Beschränktheit beschränkter Funktionen von \mathcal{H}_α zunächst

$$|\{x : |F(\mathcal{H}_\alpha)g| > \frac{\lambda}{6}\}| \lesssim \lambda^{-2} \|g\|_2^2 \leq \lambda^{-1} \|f\|_1.$$

Andererseits folgt aus Behauptung D.1.6 (welche nun anwendbar ist, da F kompakt getragen und hinreichend glatt ist) und Korollar D.1.7

$$\begin{aligned} |\{x : |F(\mathcal{H}_\alpha) \sum_i \psi_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) b_i| > \frac{\lambda}{6}\}| &\lesssim \lambda^{-1} \sum_i \|F(\mathcal{H}_\alpha) \psi_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha) b_i\|_1 \\ &\leq \lambda^{-1} \|F(\mathcal{H}_\alpha)\|_0 \sum_i \|\psi_{k_i}(\mathcal{H}_\alpha)\|_0 \|b_i\|_1 \lesssim \lambda^{-1} \sum_i \|b_i\|_1 \leq \lambda^{-1} \|f\|_1. \end{aligned}$$

Dies schließt den Beweis. \square

D.2 Ein Hörmander-Multiplikator-Theorem für $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ mit $a \geq 0$

In [85, Theorem 3.1] werden hinreichende Bedingungen für die Gültigkeit eines Hörmander-Multiplikator-Theorems gegeben, falls der zugehörige Wärmeleitungskern lediglich algebraisch abfällt. Neben den Eigenschaften aus Lemma D.1.3, muss der Kern eine Hölder-Bedingung erfüllen. Wir zitieren

Satz D.2.1 (Hebisch [85]). *Sei A ein nicht-negativer, selbstadjungierter Operator auf $L^2(\mathbb{R}^d)$. Angenommen, es gibt positive Zahlen c, b, m , sodass für alle $t > 0$ die Schranken*

$$\sup_{y \in \mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} |e^{-tA}(x, y)| (1 + t^{-1/m} |x - y|)^c dx < \infty,$$

$$\sup_{y \in \mathbb{R}^d} t^{d/m} \int_{\mathbb{R}^d} |e^{-tA}(x, y)|^2 dx < \infty$$

sowie

$$\int |e^{-tA}(x, y) - e^{-tA}(x, z)| dx \lesssim t^{-b/m} |y - z|^b \quad \text{für alle } y, z \in \mathbb{R}^d \quad (\text{D.19})$$

wahr sind. Sei $F \in H_{\text{loc}}^s(\mathbb{R})$ mit

$$s > 2^{\lfloor d/(2c) \rfloor} \left[\frac{d}{2} \left(1 + \frac{1}{c} \right) + 1 \right] + \frac{1}{2}$$

und für ein $0 \neq \varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}_+)$ gilt $\sup_{t>0} \|\varphi F(t)\|_{H^s} < \infty$. Dann ist $F(A)$ schwach L^1 -beschränkt und L^p -beschränkt für alle $p \in (1, \infty)$.

Der Beweis dieses Satzes verläuft ähnlich zu dem von Zo [186] (siehe auch [83, Abschnitt 4-6]) und beruht stark auf der Regularität und der Endlichkeit von Schur-Normen des Wärmeleitungskerns. Aus diesem Grund wird auch die obige Maschinerie, die von Schur-Normen anderer Funktionen von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ abhängt, nicht benötigt. Insbesondere wird das Problem des langsamen Abfalls der $|\psi_k(\mathcal{L}_{a,\alpha})(x, y)|$ umgangen. Da $a \geq 0$ (und damit $\delta \leq 0$), reduziert sich die Verifikation der ersten beiden Schranken auf die, die den freien Wärmeleitungskern $e^{-t|p|^\alpha}$ involvieren. Dies sind gerade die Schranken aus Lemma D.1.3, das heißt es sind $m = \alpha$ und $0 < c < \alpha$ in den obigen Annahmen. Die Verifikation der dritten Bedingung stellt sich als schwieriger heraus, da wir nur Schranken mit *nicht* expliziten Konstanten an den Wärmeleitungskern besitzen. Das heißt, jede mögliche Auslöschung der $e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}}$ geht durch eine Abschätzung verloren. Nichtsdestoweniger ist es möglich die Bedingung zunächst für $a = 0$ zu bestätigen. Im Anschluß verwenden wir Störungstheorie in Form der Duhamel-Formel (7.16) sowie die regularisierende Eigenschaft von $e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}}$ für kleine $|x|$ und $|y|$, um die Bedingung auch für $a > 0$ nachzuweisen. Wir beginnen mit dem Fall $a = 0$.

Behauptung D.2.2. *Seien $d \in \mathbb{N}$ und $\alpha \in (0, 2)$. Dann gilt (D.19) für $A = |p|^\alpha$, $m = \alpha$ und beliebiges $b \in (0, 1]$.*

Beweis. Nach Verschieben von $x \mapsto x + z$ und der darauffolgenden Substitution $x \mapsto t^{1/\alpha}x$ ist ersichtlich, dass es ausreicht

$$\int_{\mathbb{R}^d} \left| e^{-|p|^\alpha}(x, 0) - e^{-|p|^\alpha}(x, w) \right| dx \lesssim |w|^b \quad (\text{D.20})$$

für ein $b > 0$ zu zeigen, wobei $w = t^{-1/\alpha}(y - z)$. Da $e^{-|p|^\alpha}(x)$ wegen (D.8a) integrierbar ist, genügt es, den Fall $|w| \leq 1/2$ zu untersuchen. Dazu zerlegen wir das Integral über x bei $|x| = 3|w|$ und betrachten zuerst $|x| \leq 3|w|$. Da der Wärmeleitungskern nach Satz 8.1.6 gleichmäßig in x beschränkt ist, folgt aus der Dreiecksungleichung

$$\int_{|x| \leq 3|w|} \left| e^{-|p|^\alpha}(x, 0) - e^{-|p|^\alpha}(x, w) \right| dx \leq 2 \int_{|x| \leq 4|w|} \left| e^{-|p|^\alpha}(x, 0) \right| dx \lesssim |w|^d.$$

Für $|x| \geq 3|w|$ verwenden wir den Mittelwertsatz, um die linke Seite von (D.20) durch

$$|w| \int_{|x| \geq 2|w|} dx \left| \nabla_x \int_{\mathbb{R}^d} e^{ipx} e^{-|p|^\alpha} dp \right|$$

abzuschätzen. Im Folgenden zeigen wir, dass das Integral über $|x| \geq 2|w|$ gleichmäßig in $|w|$ beschränkt ist. Mit der Fourier-Bessel-Transformation (siehe beispielsweise Stein und Weiss [170, Kapitel IV, Theorem 3.3]) und der Rekursionsbeziehung für Ableitungen der Bessel-Funktionen [137, Formel 9.1.30]

$$\frac{d}{dz}(z^{-\nu} J_\nu(z)) = -z^{-\nu} J_{\nu+1}(z) \quad \text{für } z > 0, \nu \in \mathbb{R}, \quad (\text{D.21})$$

erhält man für $r = |x|$

$$\begin{aligned} \left| \nabla \int_{\mathbb{R}^d} e^{ipx} e^{-|p|^\alpha} dp \right| &= \left| \partial_r \int_0^\infty k^{d-1} e^{-k^\alpha} (kr)^{-(d-2)/2} J_{(d-2)/2}(kr) dk \right| \\ &= \left| \int_0^\infty k^d e^{-k^\alpha} (kr)^{1-d/2} J_{d/2}(kr) dk \right|. \end{aligned} \quad (\text{D.22})$$

Wir zerlegen nun das Integral über x ein weiteres mal bei $|x| = 2$ und zeigen zuerst, dass die rechte Seite von (D.22) für $|x| \geq 2$ integrierbar ist. Um dies zu sehen, integrieren wir partiell, verwenden wieder (D.21) und erhalten

$$\begin{aligned} \int_0^\infty k^d e^{-k^\alpha} (kr)^{1-d/2} J_{d/2}(kr) dk &= -r^{-1} \int_0^\infty e^{-k^\alpha} k^d \partial_k \left[(kr)^{1-d/2} J_{d/2-1}(kr) \right] dk \\ &= r^{-1} \int_0^\infty e^{-k^\alpha} k^{d-1} (d - \alpha k^\alpha) \cdot (kr)^{1-d/2} J_{d/2-1}(kr) dk. \end{aligned}$$

Wegen des e^{-k^α} -Faktors existiert das Integral über k für große k . Allerdings müssen wir wegen des Verhaltens des Integranden bei kleinen k Vorsicht walten lassen. Integriert man noch $n-1$ mal partiell, sieht man, dass die rechte Seite der letzten Formel gleich

$$\begin{aligned} r^{1-d/2-n} \int_0^\infty k^{1+d/2-n} J_{d/2-n}(kr) \sum_{j=0}^n a_j e^{-k^\alpha} k^{j\alpha} dk \\ = r^{-d} \int_0^\infty (kr)^{1+d/2-n} J_{d/2-n}(kr) \sum_{j=0}^n a_j e^{-k^\alpha} k^{j\alpha} dk \end{aligned} \quad (\text{D.23})$$

ist, wobei $a_j = a_j(d, \alpha) \in \mathbb{R}$ und die $k^{j\alpha}$ -Faktoren vom Ableiten von e^{-k^α} kommen. Der Randterm der partiellen Integrationen bei $k = \infty$ verschwindet wegen des e^{-k^α} -Faktors. Wir erklären gleich, wieso auch der Randterm bei $k = 0$ verschwindet.

Wir unterscheiden zwischen ungeraden und geraden d . Ist d gerade, wählen wir $n = d/2$, womit der j -te Summand der rechten Seite von (D.23) (mit (D.21) und $J_{-m}(z) = (-1)^m J_m(z)$ für $m \in \mathbb{N}$, siehe [137, Formel 9.1.5]) gleich ist zu

$$\begin{aligned} a_j r^{-d} \int_0^\infty (kr) J_0(kr) k^{j\alpha} e^{-k\alpha} dk &= -a_j r^{-d-1} \int_0^\infty \partial_k((kr) J_{-1}(kr)) k^{j\alpha} e^{-k\alpha} dk \\ &= -a_j r^{-d-1} \int_0^\infty k^{-1} \cdot kr J_1(kr) (\alpha j k^{j\alpha} - \alpha k^{j\alpha+\alpha}) e^{-k\alpha} dk, \end{aligned}$$

wobei der Randterm der partiellen Integration bei $k = 0$ quadratisch verschwunden ist. Mit der Schranke $|J_1(z)| \lesssim \min\{z, z^{-1/2}\}$ (siehe [137, Formel 9.1.7 und 9.2.1]), kann der Absolutbetrag der rechten Seite der letzten Formel durch eine Konstante mal

$$r^{-d} \left(\int_0^{r^{-1}} kr \cdot (k^{j\alpha} + k^{j\alpha+\alpha}) e^{-k\alpha} dk + \int_{r^{-1}}^\infty (kr)^{-1/2} (k^{j\alpha} + k^{j\alpha+\alpha}) e^{-k\alpha} dk \right)$$

abgeschätzt werden. Der zweite Summand ist durch eine Konstante mal $r^{-d-1/2}$, wohingegen der erste Summand durch $r^{-d-1-j\alpha} + r^{-d-1-(j+1)\alpha}$ beschränkt ist. Damit ist der Beitrag gerader d für $|x| = r \geq 2$ in \mathbb{R}^d integrierbar. Für $n = d/2 - 1$ ist der Integrand von (D.23)

$$(kr)^2 J_1(kr) \sum_{j=0}^n a_j k^{j\alpha} e^{-k\alpha} = -rk^2 \partial_k (J_0(kr)) \sum_{j=0}^n a_j k^{j\alpha} e^{-k\alpha},$$

das heißt die Randterme der partiellen Integrationen verschwanden mindestens quadratisch.

Ist d dagegen ungerade, wählen wir $n = (d+1)/2$ und verwenden [37, Formel 10.16.1], das heißt $J_{-1/2}(kr) = \sqrt{2/\pi} (kr)^{-1/2} \cos(kr)$. Damit wird (D.23) zu

$$\begin{aligned} &\sqrt{\frac{2}{\pi}} r^{-d} \int_0^\infty e^{-k\alpha} \cos(kr) \sum_{j=0}^n a_j k^{j\alpha} dk \\ &= \frac{a_0}{\sqrt{2\pi}} r^{-d} \int_{\mathbb{R}} e^{-|k|\alpha} e^{ikr} dk + \sqrt{\frac{2}{\pi}} r^{-d-1} \int_0^\infty r \cos(kr) \sum_{j=1}^n a_j e^{-k\alpha} k^{j\alpha} dk. \end{aligned}$$

Das erste Integral über k ist gerade der Wärmeleitungskern $e^{-|p|\alpha}(r)$ in einer Dimension, welcher nach Satz 8.1.6 wie $r^{-1-\alpha}$ abfällt. Integriert man den zweiten Summanden noch einmal partiell, erhält man

$$-\sqrt{\frac{2}{\pi}} r^{-d-1} \sum_{j=1}^n a_j \int_0^\infty (j\alpha k^{j\alpha-1} - \alpha k^{j\alpha+\alpha-1}) e^{-k\alpha} \sin(kr) dk.$$

Dies zeigt, dass sowohl das Integral über k als auch das darauffolgende Integral über $\{x \in \mathbb{R}^d : |x| \geq 2\}$ existieren. Mit [37, Formel 10.16.1]) ist der Integrand von (D.23) für $n = (d-1)/2$ gerade

$$kr \sin(kr) \sum_{j=0}^n a_j k^{j\alpha} e^{-k\alpha} = -(\partial_k \cos(kr)) \sum_{j=0}^n a_j k^{j\alpha+1} e^{-k\alpha},$$

woraus ersichtlich ist, dass die Randterme der partiellen Integrationen bei $k = 0$ mindestens linear verschwinden.

Führt man die beiden Fälle zusammen, folgt

$$|w| \int_{|x| \geq 2} |\nabla \int_{\mathbb{R}^d} e^{ipx} e^{-|p|^\alpha} dp| dx \lesssim |w|.$$

Schließlich schätzen wir (D.22) für $2|w| \leq |x| \leq 2$ mit den Schranken [137, Formel 9.1.60 und 9.2.1] an $|J_{d/2}(z)|$ für $d \geq 1$ ab, sprich $|J_{d/2}(z)| \lesssim \min\{1, z^{-1/2}\}$. Mit diesen Schranken ist die rechte Seite von (D.22) durch eine Konstante mal

$$\int_0^{r^{-1}} k^d e^{-k^\alpha} (kr)^{1-d/2} dk + \int_{r^{-1}}^\infty k^d e^{-k^\alpha} (kr)^{\frac{1-d}{2}} dk$$

beschränkt. Der zweite Summand ist wegen $(kr)^{(1-d)/2} \mathbf{1}_{\{k \geq r^{-1}\}} \leq 1$ gleichmäßig in r beschränkt. Andererseits ist der erste Summand durch eine Konstante mal $r^{1-d/2}$ beschränkt. Dies zeigt, dass das Integral über $2|w| \leq |x| \leq 2$ gleichmäßig in $|w|$ existiert und daher auch die Schranke

$$|w| \int_{2|w| \leq |x| \leq 2} |\nabla \int_{\mathbb{R}^d} e^{ipx} e^{-|p|^\alpha} dp| dx \lesssim |w|$$

gilt. □

Durch Anwenden von Störungstheorie kann dieses Resultat auf $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ mit $a \geq 0$ verallgemeinert werden.

Behauptung D.2.3. *Seien $d \in \mathbb{N}$, $a \geq 0$, $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$ und $c \in (0, \alpha)$. Dann gilt das Hörmander-Multiplikator-Theorem D.2.1 für $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ in \mathbb{R}^d mit*

$$s > 2^{\lfloor d/(2c) \rfloor} \left[\frac{d}{2} \left(1 + \frac{1}{c} \right) + 1 \right] + \frac{1}{2}.$$

Wir betonen, dass die punktweisen Schranken an $\exp(-t\mathcal{L}_{a,\alpha})(x, y)$ (mit $\delta < 0$) für den Beweis entscheidend sind, in dem Sinn, dass der Kern bei kleinen $|x|$ und $|y|$ „regularisierender“ wirkt. Es ist dabei jedoch nicht zwingend notwendig, dass die exakte Relation (8.1) zwischen der Kopplungskonstante und δ besteht. Der Grund dafür ist, dass es nicht auf die Größe der Kopplungskonstante, sondern nur auf das Potential (beziehungsweise die Singularität) ankommt.

Beweis. Es genügt, die Bedingungen in [85, Theorem 3.1] zu verifizieren. Die ersten beiden Annahmen sind gerade die Aussagen aus Lemma D.1.3, welche direkt aus der Trotter-Formel und den Eigenschaften von $\exp(-|p|^\alpha)$ folgen. Daher muss nur noch die Hölder-Bedingung (D.19) nachgewiesen werden. Wie in Behauptung D.2.2 folgt aus der Substitution $x \mapsto t^{1/\alpha}x$ und der $L^1 \rightarrow L^1$ -Beschränktheit von $e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}}$, dass es ausreicht, die Abschätzung

$$\int_{\mathbb{R}^d} |e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, w) - e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, y)| dx \lesssim |w - y|^b \tag{D.24}$$

für $|w - y| \leq 1/2$ und ein $b > 0$ zu zeigen. Mit der Duhamel-Formel (7.16)

$$e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, w) = e^{-|p|^\alpha}(x, w) - a \int_0^1 ds \int_{\mathbb{R}^d} dz e^{-(1-s)\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, z) |z|^{-\alpha} e^{-s|p|^\alpha}(z, w)$$

und der Dreiecksungleichung ist die linke Seite von (D.24) durch

$$\int_{\mathbb{R}^d} \left| e^{-|p|^\alpha}(x, w) - e^{-|p|^\alpha}(x, y) \right| dx + a \int_{\mathbb{R}^d} dx \left| \int_0^1 ds \int_{\mathbb{R}^d} dz e^{-(1-s)\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, z) |z|^{-\alpha} \left(e^{-s|p|^\alpha}(z, w) - e^{-s|p|^\alpha}(z, y) \right) \right|$$

beschränkt. Die Behauptung für den ersten Summanden wurde bereits in Behauptung D.2.2 für alle $b \in (0, 1]$ gezeigt. Für $\gamma \in (0, 1)$ und $|z| \geq |w - y|^\gamma$ kann der zweite Summand mit Hilfe des Maximumprinzips, $\int_{\mathbb{R}^d} dx \exp(-(1-s)\mathcal{L}_{a,\alpha})(x, z) \lesssim 1$,

$$e^{-s|p|^\alpha}(x) \geq e^{-s|p|^\alpha}(y) \quad \text{für alle } |x| \leq |y| \text{ und } s > 0$$

(siehe beispielsweise [12, Formel (5.1)] oder [14, Seite 13]), der Formel für den Riesz-Kern von $|p|^\alpha$

$$|p|^{-\alpha}(x, y) = \int_0^\infty e^{-s|p|^\alpha}(x, y) ds = \frac{\Gamma((d-\alpha)/2)}{\pi^{d/2} 2^\alpha \Gamma(\alpha/2)} |x - y|^{-d+\alpha}$$

(siehe beispielsweise [166, Kapitel V, §1.1]) und [91, Theorem 4.5.10] (mit $1 \leq p \leq \infty$ und $0 < d - d + \alpha - d/p < 1$, das heißt $\alpha - 1 < d/p < \alpha$ und $|z|^{-\alpha} \in L^p(|z| \geq |w - y|^\gamma)$ für $p \in (d/\alpha, \infty]$) durch

$$\begin{aligned} & \int_0^1 ds \int_{\mathbb{R}^d} dx e^{-(1-s)\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, z) \int_{|z| \geq |w-y|^\gamma} dz |z|^{-\alpha} \left| e^{-s|p|^\alpha}(z, w) - e^{-s|p|^\alpha}(z, y) \right| \\ & \lesssim \int_{|z| \geq |w-y|^\gamma} dz |z|^{-\alpha} \int_0^\infty ds \left(e^{-s|p|^\alpha}(z, w) - e^{-s|p|^\alpha}(z, y) \right) \\ & \quad \times \left(\mathbf{1}_{\{|z-w| \leq |z-y|\}} - \mathbf{1}_{\{|z-w| \geq |z-y|\}} \right) \\ & = \frac{\Gamma((d-\alpha)/2)}{\pi^{d/2} 2^\alpha \Gamma(\alpha/2)} \int_{|z| \geq |w-y|^\gamma} dz |z|^{-\alpha} \left| |z-w|^{-d+\alpha} - |z-y|^{-d+\alpha} \right| \\ & \lesssim_{d,\alpha} |w-y|^{d-d+\alpha-d/p} \| |z|^{-\alpha} \|_{L^p(|z| \geq |w-y|^\gamma)} = A |w-y|^{\frac{1-\gamma}{p}(\alpha p - d)} \end{aligned}$$

abgeschätzt werden. Somit verbleibt der Fall $|z| \leq |w - y|^\gamma$ mit obigem $\gamma < 1$. Wie im Beweis von Behauptung D.2.2 erwarten wir in dieser Region keine weiteren Auslöschungen mehr. Daher genügt es (mit der Dreiecksungleichung) die Beiträge von $e^{-s|p|^\alpha}(z, w)$ beziehungsweise $e^{-s|p|^\alpha}(z, y)$ separat zu untersuchen. Wegen Symmetrie reicht es, nur den Summanden mit $e^{-s|p|^\alpha}(z, w)$ zu behandeln. Wir untersuchen nun genauer das Verhalten für $s \leq |w - y|^{\alpha\varepsilon}$ und $|z - w| \leq |w - y|^\varepsilon$ mit $0 < \varepsilon < \gamma$. Einerseits berechnet man für $s \geq |w - y|^{\alpha\varepsilon}$ und beliebiges $|z - w|$ (unter Verwendung des Maximumprinzips, Ausführung der Integration über x und Verwendung von $\exp(-s|p|^\alpha)(z, w) \lesssim s^{-d/\alpha}$)

$$\begin{aligned} & \int_{|w-y|^{\alpha\varepsilon}}^1 ds \int_{|z| \leq |w-y|^\gamma} dz |z|^{-\alpha} e^{-s|p|^\alpha}(z, w) \\ & \lesssim |w-y|^{\gamma(d-\alpha)} \int_{|w-y|^{\alpha\varepsilon}}^1 ds s^{-d/\alpha} \lesssim |w-y|^{(\gamma-\varepsilon)(d-\alpha)}. \end{aligned}$$

Andererseits führt die Verwendung des Maximumprinzips und das Ausführen der Integration über x für das Raum-Zeit-Gebiet $|z - w| \geq |w - y|^\varepsilon$ und $s \in (0, 1)$ auf

$$\begin{aligned} & \int_{\substack{|z| \leq |w-y|^\gamma \\ |z-w| \geq |w-y|^\varepsilon}} dz |z|^{-\alpha} |z-w|^{-d-\alpha} \int_0^{|z-w|^\alpha} ds s + \int_{\substack{|z| \leq |w-y|^\gamma \\ |z-w| \geq |w-y|^\varepsilon}} dz |z|^{-\alpha} \int_{|z-w|^\alpha}^1 ds s^{-d/\alpha} \\ & \lesssim \int_{\substack{|z| \leq |w-y|^\gamma \\ |z-w| \geq |w-y|^\varepsilon}} dz |z|^{-\alpha} |z-w|^{-d+\alpha} \lesssim |w-y|^{(\gamma-\varepsilon)(d-\alpha)}. \end{aligned}$$

Somit verbleibt das Raum-Zeit-Gebiet $|z - w| \leq |w - y|^\varepsilon$ und $s \leq |w - y|^{\alpha\varepsilon}$ mit $\varepsilon < \gamma$. An dieser Stelle verwenden wir die entscheidenden Schranken für den Wärmeleitungskern mit $a > 0$ aus Satz 8.1.6. Verwendet man $1 - s \geq \text{konst}$ (für $s \leq |w - y|^{\alpha\varepsilon} \leq 2^{-\alpha\varepsilon}$), $\delta \in (-\alpha, 0)$, verschiebt $x \mapsto x + z$ und wendet die Hölder-Ungleichung an, erhält man

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^d} dx \int_0^{|w-y|^{\alpha\varepsilon}} ds \int_{\substack{|z| \leq |w-y|^\gamma \\ |z-w| \leq |w-y|^\varepsilon}} dz |z|^{-\alpha} \left(1 \vee \frac{(1-s)^{1/\alpha}}{|x|}\right)^\delta \left(1 \vee \frac{(1-s)^{1/\alpha}}{|z|}\right)^\delta \\ & \quad \times (1-s)^{-d/\alpha} \left(1 \wedge \frac{(1-s)^{1+d/\alpha}}{|x-z|^{d+\alpha}}\right) e^{-s|p|^\alpha}(z, w) \\ & \lesssim \int_{\mathbb{R}^d} \frac{dx}{(1+|x|)^{d+\alpha}} \int_{\substack{|z| \leq |w-y|^\gamma \\ |z-w| \leq |w-y|^\varepsilon}} dz |z|^{-\alpha-\delta} \int_0^{|w-y|^{\alpha\varepsilon}} ds s^{-d/\alpha} \left(1 \wedge \frac{s^{1+d/\alpha}}{|z-w|^{d+\alpha}}\right) \\ & \lesssim \int_{\substack{|z| \leq |w-y|^\gamma \\ |z-w| \leq |w-y|^\varepsilon}} dz |z|^{-\alpha-\delta} |z-w|^{-d+\alpha} \\ & \leq \left(\int_{|z| \leq |w-y|^\gamma} |z|^{-(\alpha+\delta)p} dz \right)^{1/p} \left(\int_{|z-w| \leq |w-y|^\varepsilon} |z-w|^{-(d-\alpha)p'} dz \right)^{1/p'} \\ & \lesssim |w-y|^{(d-(\alpha+\delta)p)\gamma/p} \cdot |w-y|^{(d-(d-\alpha)p')\varepsilon/p'} = |w-y|^{\gamma\left(\frac{d}{p}-\alpha-\delta\right)+\varepsilon\left(\alpha-\frac{d}{p}\right)}. \end{aligned}$$

Die letzten beiden letzten Integrale konvergieren, da $p < d/(\alpha + \delta)$ und $p' < d/(d - \alpha)$, sprich $p \in (d/\alpha, d/(\alpha + \delta))$. Dieses Intervall ist nicht leer, da $\delta < 0$. Darüberhinaus ist ersichtlich, dass der Exponent $\gamma(d/p - \alpha - \delta) + \varepsilon(\alpha - d/p)$ positiv ist, was den Beweis von Behauptung D.2.3 schließt. \square

Hätten wir das Maximumprinzip für $e^{-(1-s)\mathcal{L}^{a,\alpha}}(x, z)$ im Raum-Zeit-Gebiet $|z| \leq |w - y|^\gamma$, $|z - w| \leq |w - y|^\varepsilon$ und $s \leq |w - y|^{\alpha\varepsilon}$ mit $0 < \varepsilon < \gamma < 1$ verwendet, hätten wir

$$\int_0^{|w-y|^{\alpha\varepsilon}} ds \int_{\substack{|z| \leq |w-y|^\gamma \\ |z-w| \leq |w-y|^\varepsilon}} dz |z|^{-\alpha} e^{-s|p|^\alpha}(z, w)$$

integrieren müssen. Dieser Ausdruck kann allerdings nur durch das Integral

$$\int_{\substack{|z| \leq |w-y|^\gamma \\ |z-w| \leq |w-y|^\varepsilon}} dz |z|^{-\alpha} |z-w|^{-d+\alpha}$$

abgeschätzt werden, welches logarithmisch divergiert. Alternativ könnte man die Hardy-Littlewood-Sobolew-Ungleichung

$$\|f * |\cdot|^{-\alpha}\|_q \lesssim \|f\|_p$$

mit $1 + 1/q = 1/p + \alpha/d$ anwenden, wobei in unserer Situation $q = \infty$, $p = d/(d - \alpha)$ und $f = e^{-s|p|^\alpha}(z)\theta(|w - y|^\varepsilon - |z|)$ sind. Dies würde

$$\begin{aligned} & \int_{\substack{|z| \leq |w-y|^\gamma \\ |z-w| \leq |w-y|^\varepsilon}} dz |z|^{-\alpha} e^{-s|p|^\alpha}(z, w) \\ & \lesssim \left(\int_{|x| \leq |w-y|^\varepsilon} \left(\frac{s}{(s^2/\alpha + |x|^2)^{(d+\alpha)/2}} \right)^{d/(d-\alpha)} dx \right)^{(d-\alpha)/d} \lesssim s^{-1} \end{aligned}$$

zeigen, das heißt das darauffolgende Integral über s würde ebenfalls logarithmisch divergieren.

Stand der Dinge und Ausblick

Wir fassen unsere Resultate zusammen. Der Hauptgrund, weshalb wir ein Hörmander-Multiplikator-Theorem für $|p|^\alpha + V$ nur für $d = 1$ und $\alpha > 1$ erhalten, sind schlechte punktweise Schranken für kompakt getragenen Funktionen von $|p|^\alpha + V$ beziehungsweise die Tatsache, dass es nicht offensichtlich ist, dass diese Funktionen radial abfallende, integrierbare Majoranten besitzen. Die schlechten Schranken sind wiederum der Tatsache geschuldet, dass die Schur-Norm $\|e^{-(|p|^\alpha + V)}\|_b$ nur dann endlich ist, wenn $b < \alpha$, was wiederum aus dem langsamen Abfall des freien Wärmeleitungskerns folgt. Andererseits liefert Dziubanski einen Hoffnungsschimmer in diese verzwickte Situation. In [42] betrachtete er eine mit Dilatationen ausgestattete, nilpotente Lie-Gruppe \mathcal{N} homogener Dimension q sowie „Glowackis Distribution“ [73], die durch

$$Pf = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{|x| > \varepsilon} \frac{f(0) - f(x)}{|x|^{q+1}} \Omega(x) dx$$

definiert ist. Hierbei bezeichnet $|x|$ die homogene Norm, dx das rechts-invariante Haar-Maß auf \mathcal{N} und $\Omega \neq 0$ ist eine positive, symmetrische und glatte Funktion auf $\mathcal{N} \setminus \{0\}$, die homogen vom Grad 0 ist. Für $\mathcal{N} = \mathbb{R}^q$ und $\Omega(x) \equiv 1$ ist P gerade $\sqrt{-\Delta}$. Die durch P erzeugte Halbgruppe in $L^2(\mathcal{N})$ wurde von Glowacki [73] untersucht. Dziubanski verallgemeinerte seine Überlegungen und betrachtete die durch P^N ($N \in \mathbb{N}$) erzeugte Halbgruppe, die als

$$e^{-tP^N} f = \int_0^\infty \exp(-t\lambda^N) dE(\lambda) f$$

geschrieben werden kann, wobei dE das Spektralmaß von P bezeichnet. Das Hauptresultat seiner Arbeit ist eine punktweise Schranke an den Wärmeleitungskern e^{-tP^N} . Für alle $N > q$ zeigte er

$$e^{-tP^N}(x) \lesssim_N t^{-q/N} (1 + t^{-1/N}|x|)^{-q-N}.$$

Diese Abschätzung sowie die Ideen von Hulanicki und Stein [61, Seiten 208-215] erlaubten es ihm durch geschickte Iteration ein Mikhlin-Multiplikator-Theorem für P zu beweisen. Insbesondere erhält er die optimale Bedingung an die Regularität des Multiplikators.

Obwohl aus der Trotter-Formel die Abschätzung $e^{-t(|p|+V)}(x, y) \leq e^{-t|p|}(x, y)$ folgt, ist nicht klar, ob auch eine Abschätzung der Art $e^{-t(|p|+V)^N}(x, y) \lesssim e^{-t|p|^N}(x, y)$ wahr ist. Offensichtlich wäre diese hinreichend, um Dziubanskis Iterationsmethode anzuwenden und ein Multiplikator-Theorem auch für $|p| + V$ zu zeigen. Die Verallgemeinerung dieser Ideen für $|p|^\alpha$ beziehungsweise $|p|^\alpha + V$ ($\alpha \neq 1$) ist ein weiteres offenes Problem.

Selbst wenn die Ideen von Hebisch und Dziubanski Multiplikator-Theoreme für $|p|^\alpha + V$ und alle $d \in \mathbb{N}$ und $\alpha \in (0, 2)$ liefern sollten, ist es bei weitem nicht klar, ob diese auch dann anwendbar sind, wenn das Potential einen Negativ-Teil hat. Der Grund dafür ist, dass die obigen Methoden stark auf der Endlichkeit von gewissen $\|\cdot\|_b$ -Normen beruhen. Die Gewichte ω_b können allerdings nicht die Singularitäten des Wärmeleitungskerns im Falle negativer Potentiale kompensieren. Damit meinen wir, dass bereits einfache Abschätzungen, wie beispielsweise

$$\sup_{y \in \mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} |e^{-\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, y)|^2 dx < \infty,$$

oder die Auslöschungseigenschaft der Wärmeleitungskerne von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ für $a < 0$ niemals erfüllt sein können. Ein Ausweg aus diesem Dilemma könnten „gewichtete $\|\cdot\|_b$ -Normen“ im Geiste von Milman und Semenov [128], wie

$$\sup_{y \in \mathbb{R}^d} \left(1 \vee \frac{1}{|y|}\right)^{-\delta} \int_{\mathbb{R}^d} |K(x, y)| \left(1 \vee \frac{1}{|x|}\right)^{-\delta} \omega_b(x, y) dx$$

sein. Allerdings bringt auch diese Idee mindestens zwei Schwierigkeiten mit sich. Erstens ist es unklar, ob Hebischs Formalismus mit diesen gewichteten Normen wieder zu einem Spektralmultiplikator-Theorem führt. Andererseits wird dadurch die Klasse der untersuchbaren Operatoren stark eingeschränkt, da eine ausgezeichnete Kenntnis des zugehörigen Wärmeleitungskerns vorausgesetzt wird. Diese Kenntnis hängt wiederum stark vom Grundzustand des untersuchten Operators ab, siehe auch die Beweise von [128, Theorem A, Theorem B], welche beispielsweise zur Herleitung von Schranken an $\exp(-(-\Delta + a|x|^{-2}))$ verwendet werden können (siehe auch [128, Theorem 1, Theorem 2, Corollary 3]).

D.3 Hardy–Sobolew-Ungleichungen

In diesem Abschnitt beweisen wir einige (gewichtete) Hardy–Sobolew-Ungleichungen. Die ersten Resultate sind unmittelbare Konsequenzen aus den Form-Ungleichungen aus Kapitel 5 und der Äquivalenz der Sobolew-Normen in L^2 und gelten nur für $d = 3$ und $\alpha = 1$ in festen Drehimpulskanälen. Wir betonen nochmals, dass diese Ungleichungen in $L^2(\mathbb{R}_+, dr)$ formuliert sind. Sie lassen sich vermutlich mit ähnlichen Rechnungen auf beliebige $d \in \mathbb{N}$ und $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$ verallgemeinern. Die letzten beiden Resultate gelten für $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ in $L^2(\mathbb{R}^d)$ mit beliebigem $\alpha \in (0, 2 \wedge d)$ und beruhen auf den Techniken aus Kapitel 7.

Wir beginnen mit gewichteten Hardy–Sobolew-Ungleichungen für $|p| + a|x|^{-1}$ in $L^2(\mathbb{R}^3)$ mit $a < 0$ und erinnern an die Notation

$$p_\ell = \sqrt{-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}} \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}_+, dr)$$

sowie die Abkürzung $C_\ell = \sqrt{p_\ell^2 + 1} - 1$. Per Dualität folgt aus Behauptung 5.3.10

Lemma D.3.1. *Seien $M > 0$, $\ell \in \mathbb{N}_0$ und $s \in (1/2, 1]$. Dann gilt für $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}_+)$*

$$\sup_{r \geq 0} \left[\left(\frac{r}{\ell + \frac{1}{2}} \right)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq \ell + \frac{1}{2}\}} + \mathbf{1}_{\{r \geq \ell + \frac{1}{2}\}} \right]^{-1} |f(r)|^2 \leq A_{s,M} \|(C_\ell + M)^s f\|_2^2.$$

Beweis. Dies folgt aus der Unitarität der Fourier–Bessel-Transformation, sprich

$$f(r) = \int_0^\infty \frac{\sqrt{kr} J_{\ell+1/2}(kr) (\Phi_\ell f)(k) (\sqrt{k^2 + 1} - 1 + M)^s}{(\sqrt{k^2 + 1} - 1 + M)^s} dk,$$

der Cauchy–Schwarz-Ungleichung und Lemma 5.3.9. \square

Kombiniert man dieses Ergebnis mit dem Satz von Plancherel, sprich

$$\|(C_\ell + M)^s (p_\ell + M)^{-s}\| \leq a_{s,M}$$

und der Äquivalenz der Sobolew-Normen für $|p| + a|x|^{-1}$ in $L^2(\mathbb{R}^3)$ (Lemma 5.3.6 und Korollar 5.3.8, welche anwendbar sind, wenn s zusätzlich eingeschränkt wird), erhält man

Lemma D.3.2. *Seien $M > 0$, $\ell \in \mathbb{N}_0$, $a \geq -2/\pi$ und $1/2 < s < \min\{3/2 - \delta, 1\}$ mit δ aus (7.3). Dann gilt für $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}_+)$*

$$\sup_{r \geq 0} \left[\left(\frac{r}{\ell + \frac{1}{2}} \right)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq \ell + \frac{1}{2}\}} + \mathbf{1}_{\{r \geq \ell + \frac{1}{2}\}} \right]^{-1} |f(r)|^2 \leq A_{s,M} \|(p_\ell + a|x|^{-1} + M)^s f\|_2^2.$$

Wir bemerken schließlich, dass wir per Dualität aus Behauptung 5.3.10 auch die folgende gewichtete Sobolew-Ungleichung erhalten.

Lemma D.3.3. *Seien $a > 0$, $\ell \in \mathbb{N}_0$ und $s \in (1/2, 3/4]$. Dann gilt für $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}_+)$*

$$\begin{aligned} & \sup_{r \geq 0} \left[\left(\frac{r}{\ell + \frac{1}{2}} \right)^{2s-1} \mathbf{1}_{\{r \leq \ell + \frac{1}{2}\}} + \left(\frac{r}{\ell + \frac{1}{2}} \right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{\ell + \frac{1}{2} \leq r \leq (\ell + \frac{1}{2})^2\}} \right. \\ & \quad \left. + \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^{4s-1} \mathbf{1}_{\{r \geq (\ell + \frac{1}{2})^2\}} \right]^{-1} |f(r)|^2 \\ & \leq A_{s,a} \|(C_\ell + a(\ell + 1/2)^{-2})^s f\|_2^2. \end{aligned}$$

Wir kommen nun zu den ungewichteten Hardy–Sobolew-Ungleichungen und beginnen mit einer Aufwärmübung.

Lemma D.3.4. *Seien $2s > d/\alpha$ und $a \geq 0$, dann gilt*

$$\|f\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \leq \|(\mathcal{L}_{a,\alpha} + 1)^s f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \quad \text{für alle } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d).$$

Beweis. Mit Dunfords und Pettis Ungleichung für Integraloperatoren [177, Abschnitt 46.2] (siehe auch [29, Corollary 2.14]) und wegen der Selbstadjungiertheit von $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ genügt es,

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} dy |(\mathcal{L}_{a,\alpha} + 1)^{-s}(x, y)|^2 = \sup_{x \in \mathbb{R}^d} (\mathcal{L}_{a,\alpha} + 1)^{-2s}(x, x) < \infty$$

nachzuweisen. Mit dem Spektralsatz, dem Maximumprinzip und $2s > d/\alpha$ erhält man

$$\frac{1}{\Gamma(2s)} (\mathcal{L}_{a,\alpha} + 1)^{-2s}(x, x) = \int_0^\infty dt t^{2s-1} e^{-t(\mathcal{L}_{a,\alpha} + 1)}(x, x) \lesssim \int_0^\infty dt t^{2s-1-\frac{d}{\alpha}} e^{-t} < \infty.$$

□

Das folgende Resultat zeigt, dass für $d \geq 3$ und $2s > 1/\alpha$ der Operator $(\mathcal{L}_{a,\alpha} + 1)^{-s}$ im nullten Drehimpulskanal von $L^2(\mathbb{R}^d)$ nach L^∞ beschränkt ist. Dieses Resultat kommt im Wesentlichen durch sphärische Ausmittlungen beziehungsweise Glättungen durch eine Integration über \mathbb{S}^{d-1} zustande.

Lemma D.3.5. *Seien $d \geq 3$, $\alpha \in (0, 2)$ und $a \geq a_*$ so, dass $\delta \leq \min\{(d-1)/2, (d-\alpha)/2\}$ mit δ aus (7.3). Ist $2s > 1/\alpha$, dann gilt*

$$\|\cdot\|^{(d-1)/2} f \|_{L^\infty(\mathbb{R}_+)} \leq A_{\alpha,d,s} \|(\mathcal{L}_{a,\alpha} + 1)^s f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \quad \text{für alle radialen } f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d).$$

Wir bemerken, dass die Einschränkung $2\alpha s < d - 2\delta$ hier nicht nötig ist, da wir hier nicht die Äquivalenz der Sobolew-Normen von Potenzen der Operatoren $|p|^\alpha$ und $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ verwenden. Diese obere Schranke an s garantierte die (für den Beweis der Äquivalenz wesentliche) verallgemeinerte Hardy-Ungleichung, Behauptung 7.1.4. Die Schranke $\delta \leq (d-\alpha)/2$ stellt sicher, dass Potenzen des Operators $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ mit Hilfe des Spektralsatzes und des Wärmeleitungskerns definiert werden können.

Beweis. Wir zeigen die Aussage wieder mit Hilfe der obigen Ungleichung für Integraloperatoren und definieren dazu

$$K(r, r') := \int_{\mathbb{S}^{d-1}} (\mathcal{L}_{a,\alpha} + 1)^{-s}(r\omega, r'\nu) d\omega \quad \text{für alle } \nu \in \mathbb{S}^{d-1},$$

wobei wir bemerken, dass der Kern $(\mathcal{L}_{a,\alpha} + 1)^{-s}(x, y)$ nur von $|x|, |y|$ und dem Winkel zwischen $x = r\omega$ und $y = r'\nu$ abhängt. Für $g(r) := r^{\frac{d-1}{2}} f(r)$ mit $\|f\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \sqrt{|\mathbb{S}^{d-1}|} \|g\|_{L^2(\mathbb{R}_+, dr)} = 1$ haben wir mit $\tilde{K}(r, r') = r^{\frac{d-1}{2}} K(r, r') r'^{\frac{d-1}{2}}$, $|x| = r$ und allen $\nu \in \mathbb{S}^{d-1}$

$$\begin{aligned} & |x|^{(d-1)/2} ((\mathcal{L}_{a,\alpha} + 1)^{-s} |x|^{(d-1)/2} |x|^{-(d-1)} g)(x) \\ &= \int_0^\infty \int_{\mathbb{S}^{d-1}} r^{(d-1)/2} (\mathcal{L}_{a,\alpha} + 1)^{-s}(r\nu, r'\omega) r'^{(d-1)/2} g(r') d\omega dr' = \int_0^\infty \tilde{K}(r, r') g(r') dr'. \end{aligned}$$

Es genügt daher zu zeigen, dass für alle $\nu \in \mathbb{S}^{d-1}$

$$\begin{aligned} & \sup_{r>0} \int_0^\infty dr' \left| \tilde{K}(r, r') \right|^2 = \sup_{r>0} r^{d-1} \int_0^\infty dr' r'^{d-1} K(r, r') K(r', r) \\ &= \sup_{r>0} r^{d-1} \int_{\mathbb{S}^{d-1}} d\omega \int_{\mathbb{S}^{d-1}} d\omega' \int_0^\infty dr' r'^{d-1} (\mathcal{L}_{a,\alpha} + 1)^{-s}(r\omega, r'\nu) (\mathcal{L}_{a,\alpha} + 1)^{-s}(r'\nu, r\omega') \end{aligned}$$

endlich ist. Die Behauptung folgt insbesondere, wenn der Mittelwert des letzten Integrals über $\nu \in \mathbb{S}^{d-1}$ endlich ist, also wenn

$$|\mathbb{S}^{d-1}|^{-1} \sup_{r>0} r^{d-1} \int_{\mathbb{S}^{d-1}} d\omega \int_{\mathbb{S}^{d-1}} d\omega' (\mathcal{L}_{a,\alpha} + 1)^{-2s} (r\omega, r\omega') < \infty.$$

Um dies zu verifizieren, verwenden wir nochmals den Spektralsatz,

$$t^{-d/\alpha} \left(1 \wedge \frac{t^{1+d/\alpha}}{|x|^{d+\alpha}} \right) \sim \frac{t}{(t^{2/\alpha} + |x|^2)^{\frac{d+\alpha}{2}}}$$

und die Tatsache, dass auch $e^{-t\mathcal{L}_{a,\alpha}}(x, y)$ nur von $|x|$, $|y|$ und dem Winkel zwischen x und y abhängt. Es reicht daher aus

$$\begin{aligned} & \sup_{r>0} r^{d-1} \int_0^\infty dt e^{-t} t^{2s-1} \left(1 \vee \frac{t^{1/\alpha}}{r} \right)^{2\delta} \int_0^\pi d\theta \frac{t(\sin \theta)^{d-2}}{(t^{2/\alpha} + 2r^2 - 2r^2 \cos \theta)^{\frac{d+\alpha}{2}}} \\ &= \sup_{r>0} r^{2\alpha s-1} \int_0^\infty dt e^{-tr^\alpha} t^{2s} \left(1 \vee t^{1/\alpha} \right)^{2\delta} \int_{-1}^1 du \frac{(1-u^2)^{\frac{d-3}{2}}}{(t^{2/\alpha} + 2 - 2u)^{\frac{d+\alpha}{2}}} \end{aligned} \quad (\text{D.25})$$

zu untersuchen. Für $t \rightarrow \infty$ fällt das Winkel-Integral wie $t^{-\frac{d+\alpha}{\alpha}}$ ab, wohingegen es sich für $t \rightarrow 0$ wie $t^{-1-1/\alpha}$ verhält. Dies ist aus

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 du \frac{(1-u^2)^{\frac{d-3}{2}}}{(t^{2/\alpha} + 2 - 2u)^{\frac{d+\alpha}{2}}} &= \frac{1}{t^{1+\frac{1}{\alpha}}} \int_{-1}^1 \frac{du}{t^{2/\alpha}} \frac{\left(\frac{1-u}{t^{2/\alpha}}\right)^{\frac{d-3}{2}} (1+u)^{\frac{d-3}{2}}}{\left(1 + \frac{2(1-u)}{t^{2/\alpha}}\right)^{\frac{d+\alpha}{2}}} \\ &\leq \frac{2^{\frac{d-3}{2}}}{t^{1+\frac{1}{\alpha}}} \int_0^2 \frac{du}{t^{2/\alpha}} \frac{\left(\frac{u}{t^{2/\alpha}}\right)^{\frac{d-3}{2}}}{\left(1 + \frac{2u}{t^{2/\alpha}}\right)^{\frac{d+\alpha}{2}}} \lesssim_{\alpha,d} t^{-1-\frac{1}{\alpha}} \end{aligned}$$

ersichtlich, wobei wir $u \mapsto u + 1$ verschoben, $u \mapsto -u$ gespiegelt, den Integrationsbereich auf $[0, \infty)$ vergrößert und schließlich $u \mapsto t^{2/\alpha}u$ skaliert haben. Daher ist die rechte Seite von (D.25) durch

$$\sup_{r>0} \left(r^{2\alpha s-1} \int_0^1 dt e^{-tr^\alpha} t^{2s-1-\frac{1}{\alpha}} + r^{2\alpha s-1} \int_1^\infty dt e^{-tr^\alpha} t^{2s+\frac{2\delta}{\alpha}-\frac{d+\alpha}{\alpha}} \right) \quad (\text{D.26})$$

beschränkt. Skaliert man $t \mapsto r^{-\alpha}t$ im ersten Summanden und integriert anschließend über t von 0 bis ∞ , sieht man, dass er wegen $2\alpha s > 1$ durch eine Konstante beschränkt ist.

Wir betrachten nun den zweiten Summanden. Für $r \rightarrow \infty$ fällt er offensichtlich exponentiell schnell ab. Wir untersuchen nun das Verhalten für $r \rightarrow 0$. Für $2\alpha s + 2\delta = d$ ist der zweite Summand von (D.26) gerade $r^{2\alpha s-1}\Gamma(0, r^\alpha)$ mit der unvollständigen Γ -Funktion $\Gamma(0, r^\alpha)$ (siehe [34, Formel 6.5.3]). Dieser Ausdruck verhält sich für $r \rightarrow 0$ in jedem Fall wie $-r^{2\alpha s-1} \log r$, ist also in diesem Grenzwert endlich, da $2\alpha s > 1$. Falls $2\alpha s + 2\delta \neq d$ schätzen wir den zweiten Summanden von (D.26) durch eine Konstante mal

$$\begin{aligned} & \theta(2\alpha s + 2\delta - d) r^{d-1-2\delta} \int_{r^\alpha}^\infty \frac{dt}{t} e^{-t} t^{2s+\frac{2\delta}{\alpha}-\frac{d}{\alpha}} + \theta(d - 2\alpha s - 2\delta) r^{2\alpha s-1} \int_1^\infty \frac{dt}{t} e^{-tr^\alpha} t^{2s+\frac{2\delta}{\alpha}-\frac{d}{\alpha}} \\ & \leq \theta(2\alpha s + 2\delta - d) r^{d-1-2\delta} \int_0^\infty \frac{dt}{t} e^{-t} t^{2s+\frac{2\delta}{\alpha}-\frac{d}{\alpha}} + \theta(d - 2\alpha s - 2\delta) r^{2\alpha s-1} \int_1^\infty \frac{dt}{t} t^{2s+\frac{2\delta}{\alpha}-\frac{d}{\alpha}} \\ & \leq A \left(r^{d-1-2\delta} + r^{2\alpha s-1} \right) \end{aligned}$$

ab, wobei $\theta(x)$ die Heaviside-Funktion mit der Konvention $\theta(0) = 0$ bezeichnet. Im Fall $2\alpha s + 2\delta > d$ haben wir die Substitution $t \mapsto r^{-\alpha}t$ durchgeführt. Da $\delta \leq (d-1)/2$ und $2\alpha s > 1$, ist dieser Ausdruck ebenfalls endlich für $r \rightarrow 0$. \square

Wir schließen mit folgenden Bemerkungen.

- (1) Wegen Dualität ist die $L^2 \rightarrow L^\infty$ -Beschränktheit der Resolventen äquivalent zur $L^1 \rightarrow L^2$ -Beschränktheit.
- (2) Das Lemma zeigt, dass $L^2(\mathbb{R}_+, dr)$ -Potentiale relativ beschränkt bezüglich $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ mit $\alpha \geq 1$ im nullten Drehimpuls kanal sind, selbst wenn $a = a_*$.
- (3) Schließlich wäre es interessant

$$\left\| (1 - \Pi_0)[(\mathcal{L}_{a,\alpha} + 1)^{-s} - (|p|^\alpha + 1)^{-s}] \right\|_{L^q(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^r(\mathbb{R}^d)} < \infty$$

für gewisse q und r zu zeigen, wobei Π_0 die Projektion auf den nullten Drehimpuls kanal meint. Damit wäre es möglich, Sobolew-Einbettungen und $L^2 \rightarrow L^\infty$ -Schranken im orthogonalen Komplement des nullten Drehimpuls kanals für $\mathcal{L}_{a,\alpha}$ aus den entsprechenden Ergebnissen für $|p|^\alpha$ herzuleiten.

Literaturverzeichnis

- [1] N. H. ABEL: *Note sur la fonction $\psi x = x + \frac{x^2}{2^2} + \frac{x^3}{3^2} + \dots + \frac{x^n}{n^2} + \dots$* . Oeuvres complètes de Niels Henrik Abel, Seiten 189–193, 1881.
- [2] VOLKER BACH: *Ein Beweis der Scottschen Vermutung für Ionen*. Diplomarbeit, Institut für Mathematische Physik, Technische Universität Braunschweig, Braunschweig, Juni 1989.
- [3] VOLKER BACH: *A proof of Scott's conjecture for ions*. Rep. Math. Phys., 28(2):213–248, Oktober 1989.
- [4] A. A. BALINSKY und W. D. EVANS: *On the virial theorem for the relativistic operator of Brown and Ravenhall, and the absence of embedded eigenvalues*. Lett. Math. Phys., 44(3):233–248, 1998.
- [5] A. A. BALINSKY und W. D. EVANS: *On the spectral properties of the Brown-Ravenhall operator*. J. Comput. Appl. Math., 148(1):239–255, 2002. On the occasion of the 65th birthday of Professor Michael Eastham.
- [6] A. A. BALINSKY und W. D. EVANS: *Spectral Analysis of Relativistic Operators*. Imperial College Press, London, 2011.
- [7] PEDRO BALODIS: *A proof of Scott's correction for matter*. Comm. Math. Phys., 249(1):79–132, 2004.
- [8] BERNHARD BAUMGARTNER: *The Thomas-Fermi-theory as result of a strong-coupling-limit*. Comm. Math. Phys., 47(3):215–219, 1976.
- [9] RAFAEL D. BENGURIA, GONZALO A. BLEY und MICHAEL LOSS: *A new estimate on the indirect Coulomb energy*. International Journal of Quantum Chemistry, 112(6):1579–1584, 2012.
- [10] H. BETHE: *Quantenmechanik der Ein- und Zwei-Elektronenatome*. In: H. GEIGER und K. SCHEEL (Herausgeber): *Handbuch der Physik, XXIV.1, Buch 2*, Kapitel 3, Seiten 273–560. Springer, Berlin, 2 Auflage, 1933.
- [11] RAJENDRA BHATIA: *Matrix Analysis*, Band 169 der Reihe *Graduate Texts in Mathematics*. Springer-Verlag, New York, 1997.
- [12] R. M. BLUMENTHAL und R. K. GETOOR: *Some theorems on stable processes*. Trans. Amer. Math. Soc., 95:263–273, 1960.

- [13] SÖNKE BLUNCK: *A Hörmander-type spectral multiplier theorem for operators without heat kernel*. Ann. Sc. Norm. Super. Pisa Cl. Sci. (5), 2(3):449–459, 2003.
- [14] KRZYSZTOF BOGDAN, TOMASZ BYCZKOWSKI, TADEUSZ KULCZYCKI, MICHAŁ RYZNAR, RENMING SONG und ZORAN VONDRAČEK: *Potential Analysis of Stable Processes and its Extensions*, Band 1980 der Reihe *Lecture Notes in Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 2009. Edited by Piotr Graczyk and Andrzej Stos.
- [15] KRZYSZTOF BOGDAN, TOMASZ GRZYWNY, TOMASZ JAKUBOWSKI und DOMINIKA PILARCZYK: *Fractional Laplacian with Hardy potential*. Communications in Partial Differential Equations, 44(1):20–50, 2019.
- [16] G. E. BROWN und D. G. RAVENHALL: *On the interaction of two electrons*. Proc. Roy. Soc. London Ser. A., 208:552–559, 1951.
- [17] V. M. BURKE und I. P. GRANT: *The effect of relativity on atomic wave functions*. Proceedings of the Physical Society, 90(2):297, 1967.
- [18] ERIC CARLEN: *Trace inequalities and quantum entropy: An introductory course*. In: *Entropy and the quantum*, Band 529 der Reihe *Contemp. Math.*, Seiten 73–140. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2010.
- [19] ROCH CASSANAS und HEINZ SIEDENTOP: *The ground-state energy of heavy atoms according to Brown and Ravenhall: Absence of relativistic effects in leading order*. J. Phys. A, 39(33):10405–10414, 2006.
- [20] SUBRAMANYAN CHANDRASEKHAR: *The maximum mass of ideal white dwarfs*. Astrophys. J., 74:81–82, 1931.
- [21] LI CHEN und HEINZ SIEDENTOP: *Positivity of $|p|^a|q|^b + |q|^b|p|^a$* . J. Funct. Anal., 264(12):2817–2824, 2013.
- [22] PENG CHEN, EL MAATI OUHABAZ, ADAM SIKORA und LIXIN YAN: *Sharp spectral multipliers without semigroup framework and application to random walks*. arXiv e-prints, Februar 2019.
- [23] PENG CHEN, EL MAATI OUHABAZ, ADAM SIKORA und LIXIN YAN: *Restriction estimates, sharp spectral multipliers and endpoint estimates for Bochner-Riesz means*. J. Anal. Math., 129:219–283, 2016.
- [24] SOOBIN CHO, PANKI KIM, RENMING SONG und ZORAN VONDRAČEK: *Factorization and estimates of Dirichlet heat kernels for non-local operators with critical killings*. arXiv e-prints, September 2018.
- [25] V. VON CONTA und H. SIEDENTOP: *Statistical theory of the atom in momentum space*. Markov Process. Related Fields, 21(3, part 1):433–448, 2015.
- [26] ANTONIO CÓRDOBA: *Singular integrals, maximal functions and Fourier restriction to spheres: The disk multiplier revisited*. Adv. Math., 290:208–235, 2016.
- [27] THIERRY COULHON und ADAM SIKORA: *Gaussian heat kernel upper bounds via the Phragmén-Lindelöf theorem*. Proc. Lond. Math. Soc. (3), 96(2):507–544, 2008.

- [28] MICHAEL CWIKEL: *Weak type estimates for singular values and the number of bound states of Schrödinger operators*. Ann. Math., 106:93–102, 1977.
- [29] HANS L. CYCON, RICHARD G. FROESE, WERNER KIRSCH und BARRY SIMON: *Schrödinger Operators with Application to Quantum Mechanics and Global Geometry*. Text and Monographs in Physics. Springer-Verlag, Berlin, 1 Auflage, 1987.
- [30] CHARLES G. DARWIN: *The wave equation of the electron*. Proc. Roy. Soc. (London), A118:654–680, 1928.
- [31] INGRID DAUBECHIES: *An uncertainty principle for fermions with generalized kinetic energy*. Comm. Math. Phys., 90:511–520, September 1983.
- [32] CHANDLER DAVIS: *A Schwarz inequality for convex operator functions*. Proc. Amer. Math. Soc., 8:42–44, 1957.
- [33] CHANDLER DAVIS: *Various averaging operations onto subalgebras*. Illinois J. Math., 3:538–553, 1959.
- [34] PHILIP J. DAVIS: *Gamma function and related functions*. In: MILTON ABRAMOWITZ und IRENE A. STEGUN (Herausgeber): *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Kapitel 6, Seiten 253–293. Dover Publications, New York, 1965.
- [35] P.A.M. DIRAC: *The quantum theory of the electron*. Proc. Royal Soc. London, 117(A):610–624, 1928.
- [36] P.A.M. DIRAC: *The quantum theory of the electron II*. Proc. Royal Soc. London, 118(A):351–361, 1928.
- [37] *NIST Digital Library of Mathematical Functions*. <http://dlmf.nist.gov/>, Release 1.0.21 of 2018-12-15. F. W. J. Olver, A. B. Olde Daalhuis, D. W. Lozier, B. I. Schneider, R. F. Boisvert, C. W. Clark, B. R. Miller und B. V. Saunders (Herausgeber).
- [38] JEAN DOLBEAULT, MARIA J. ESTEBAN und ERIC SÉRÉ: *Variational characterization for eigenvalues of Dirac Operators*. Calc. Var. Partial Differential Equations, 10(4):321–347, 2000.
- [39] XUAN THINH DUONG und ALAN MACINTOSH: *Singular integral operators with non-smooth kernels on irregular domains*. Rev. Mat. Iberoamericana, 15(2):233–265, 1999.
- [40] XUAN THINH DUONG, EL MAATI OUHABAZ und ADAM SIKORA: *Spectral multipliers for self-adjoint operators*. In: *Geometric analysis and applications (Canberra, 2000)*, Band 39 der Reihe Proc. Centre Math. Appl. Austral. Nat. Univ., Seiten 56–66. Austral. Nat. Univ., Canberra, 2001.
- [41] XUAN THINH DUONG, EL MAATI OUHABAZ und ADAM SIKORA: *Plancherel-type estimates and sharp spectral multipliers*. J. Funct. Anal., 196(2):443–485, 2002.
- [42] JACEK DZIUBAŃSKI: *A remark on a Marcinkiewicz-Hörmander multiplier theorem for some nondifferential convolution operators*. Colloq. Math., 58(1):77–83, 1989.

- [43] T. EKHOLM und R. L. FRANK: *On Lieb-Thirring inequalities for Schrödinger operators with virtual level*. Comm. Math. Phys., 264(3):725–740, 2006.
- [44] BERTHOLD-GEORG ENGLERT und JULIAN SCHWINGER: *Statistical atom: Handling the strongly bound electrons*. Phys. Rev. A, 29(5):2331–2338, 1984.
- [45] BERTHOLD-GEORG ENGLERT und JULIAN SCHWINGER: *Statistical atom: Some quantum improvements*. Phys. Rev. A, 29(5):2339–2352, 1984.
- [46] BERTHOLD-GEORG ENGLERT und JULIAN SCHWINGER: *Atomic-binding-energy oscillations*. Phys. Rev. A, 32:47–63, 1985.
- [47] MARIA J. ESTEBAN und M. LOSS: *Self-adjointness for Dirac operators via Hardy-Dirac inequalities*. J. Math. Phys., 48(11):112107, 8, 2007.
- [48] WILLIAM DESMOND EVANS, PETER PERRY und HEINZ SIEDENTOP: *The spectrum of relativistic one-electron atoms according to Bethe and Salpeter*. Comm. Math. Phys., 178(3):733–746, Juli 1996.
- [49] C. FEFFERMAN und L. SECO: *Eigenvalues and eigenfunctions of ordinary differential operators*. Adv. Math., 95(2):145–305, 1992.
- [50] C. FEFFERMAN und L. SECO: *The density of a one-dimensional potential*. Adv. Math., 107(2):187–364, September 1994.
- [51] C. FEFFERMAN und L. SECO: *The eigenvalue sum of a one-dimensional potential*. Adv. Math., 108(2):263–335, Oktober 1994.
- [52] C. FEFFERMAN und L. SECO: *On the Dirac and Schwinger corrections to the ground-state energy of an atom*. Adv. Math., 107(1):1–188, August 1994.
- [53] C. FEFFERMAN und L. SECO: *The density in a three-dimensional radial potential*. Adv. Math., 111(1):88–161, März 1995.
- [54] C. L. FEFFERMAN und L. A. SECO: *An upper bound for the number of electrons in a large ion*. Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 86:3464–3465, 1989.
- [55] C. L. FEFFERMAN und L. A. SECO: *On the energy of a large atom*. Bull. AMS, 23(2):525–530, Oktober 1990.
- [56] CHARLES FEFFERMAN: *Inequalities for strongly singular convolution operators*. Acta Math., 124:9–36, 1970.
- [57] CHARLES L. FEFFERMAN und LUIS A. SECO: *Aperiodicity of the Hamiltonian flow in the Thomas-Fermi potential*. Revista Matemática Iberoamericana, 9(3):409–551, 1993.
- [58] E. FERMI: *Un metodo statistico per la determinazione di alcune proprietà dell'atomo*. Atti della Reale Accademia Nazionale dei Lincei, Rendiconti, Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali, 6(12):602–607, 1927.
- [59] E. FERMI: *Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente*. Z. Phys., 48:73–79, 1928.

- [60] L. L. FOLDY: *A note on atomic binding energies*. Phys. Rev., 83:397–399, Jul 1951.
- [61] G. B. FOLLAND und ELIAS M. STEIN: *Hardy Spaces on Homogeneous Groups*, Band 28 der Reihe *Mathematical Notes*. Princeton University Press, Princeton, N.J.; University of Tokyo Press, Tokyo, 1982.
- [62] RUPERT L. FRANK: *A simple proof of Hardy-Lieb-Thirring inequalities*. Comm. Math. Phys., 290(2):789–800, 2009.
- [63] RUPERT L. FRANK: *Eigenvalue bounds for the fractional Laplacian: A review*. In: *Recent developments in nonlocal theory*, Seiten 210–235. De Gruyter, Berlin, 2018.
- [64] RUPERT L. FRANK, ELLIOTT H. LIEB und ROBERT SEIRINGER: *Hardy-Lieb-Thirring inequalities for fractional Schrödinger operators*. J. Amer. Math. Soc., 21(4):925–950, 2008.
- [65] RUPERT L. FRANK, ELLIOTT H. LIEB und ROBERT SEIRINGER: *Equivalence of Sobolev inequalities and Lieb-Thirring inequalities*. In: *XVIIth International Congress on Mathematical Physics*, Seiten 523–535. World Sci. Publ., Hackensack, NJ, 2010.
- [66] RUPERT L. FRANK, KONSTANTIN MERZ und HEINZ SIEDENTOP: *Equivalence of Sobolev norms involving generalized Hardy operators*. Int. Math. Res. Not. IMRN, rnz135, 2019.
- [67] RUPERT L. FRANK, KONSTANTIN MERZ, HEINZ SIEDENTOP und BARRY SIMON: *Proof of the strong Scott conjecture for Chandrasekhar atoms*. arXiv e-prints, Juli 2019.
- [68] RUPERT L. FRANK und ROBERT SEIRINGER: *Non-linear ground state representations and sharp Hardy inequalities*. J. Funct. Anal., 255(12):3407–3430, 2008.
- [69] RUPERT L. FRANK, HEINZ SIEDENTOP und SIMONE WARZEL: *The ground state energy of heavy atoms: Relativistic lowering of the leading energy correction*. Comm. Math. Phys., 278(2):549–566, 2008.
- [70] RUPERT L. FRANK, HEINZ SIEDENTOP und SIMONE WARZEL: *The energy of heavy atoms according to Brown and Ravenhall: The Scott correction*. Doc. Math., 14:463–516, 2009.
- [71] W.H. FURRY und J.R. OPPENHEIMER: *On the theory of the electron and positive*. Phys. Rev., II. Ser., 45:245–262, 1934.
- [72] EMILIO GAGLIARDO: *On integral transformations with positive kernel*. Proc. Amer. Math. Soc., 16:429–434, 1965.
- [73] PAWEŁ GŁOWACKI: *Stable semigroups of measures as commutative approximate identities on nongraded homogeneous groups*. Invent. Math., 83(3):557–582, 1986.
- [74] P. GOMBÁS: *Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen*. Springer-Verlag, Wien, 1 Auflage, 1949.
- [75] WALTER GORDON: *Die Energieniveaus des Wasserstoffatoms nach der Diracschen Quantentheorie*. Z. Phys., 48:11–14, 1928.

- [76] MARCEL GRIESEMER, ROGER T. LEWIS und HEINZ SIEDENTOP: *A minimax principle for eigenvalues in spectral gaps: Dirac operators with Coulomb potentials*. Doc. Math., 4:275–283, 1999.
- [77] MARCEL GRIESEMER und HEINZ SIEDENTOP: *A minimax principle for the eigenvalues in spectral gaps*. J. London Math. Soc. (2), 60(2):490–500, 1999.
- [78] ROBERT B. GRIFFITHS: *A proof that the free energy of a spin system is extensive*. J. Mathematical Phys., 5:1215–1222, 1964.
- [79] MICHAEL HANDREK und HEINZ SIEDENTOP: *On the maximal excess charge of the Chandrasekhar-Coulomb Hamiltonian in two dimension*. Lett. Math. Phys., 103(8):843–849, 2013.
- [80] MICHAEL HANDREK und HEINZ SIEDENTOP: *The ground state energy of heavy atoms: The leading correction*. Comm. Math. Phys., 339(2):589–617, 2015.
- [81] G. HARDEKOPF und J. SUCHER: *Critical coupling constants for relativistic wave equations and vacuum breakdown in quantum electrodynamics*. Phys. Rev. A, 31(4):2020–2029, April 1985.
- [82] G. H. HARDY: *Note on a theorem of Hilbert*. Mathematische Zeitschrift, 6(3–4):314–317, 1920.
- [83] WALDEMAR HEBISCH: *Almost everywhere summability of eigenfunction expansions associated to elliptic operators*. Studia Math., 96(3):263–275, 1990.
- [84] WALDEMAR HEBISCH: *A multiplier theorem for Schrödinger operators*. Colloq. Math., 60/61(2):659–664, 1990.
- [85] WALDEMAR HEBISCH: *Functional calculus for slowly decaying kernels*. Vorabdruck, 1995.
- [86] OLE J. HEILMANN und ELLIOTT H. LIEB: *Electron density near the nucleus of a large atom*. Physical Review A, 52(5):3628–3643, November 1995.
- [87] IRA W. HERBST: *Spectral theory of the operator $(p^2 + m^2)^{1/2} - Ze^2/r$* . Comm. Math. Phys., 53:285–294, 1977.
- [88] GEORG HOEVER und HEINZ SIEDENTOP: *Stability of the Brown-Ravenhall operator*. Math. Phys. Electron. J., 5:Paper 6, 11 pp. (electronic), 1999.
- [89] P. HOHENBERG und W. KOHN: *Inhomogeneous electron gas*. Phys. Rev. (2), 136:B864–B871, 1964.
- [90] LARS HÖRMANDER: *Estimates for translation invariant operators in L^p spaces*. Acta Math., 104:93–140, 1960.
- [91] LARS HÖRMANDER: *The Analysis of Linear Partial Differential Operators. I*. Springer Study Edition. Springer-Verlag, Berlin, Second Auflage, 1990. Distribution theory and Fourier analysis.

- [92] WEBSTER HUGHES: *An Atomic Energy Lower Bound that Gives Scott's Correction*. Dissertation, Princeton, Department of Mathematics, 1986.
- [93] WEBSTER HUGHES: *An atomic energy lower bound that agrees with Scott's correction*. Adv. in Math., 79:213–270, 1990.
- [94] ALEXEI IANTCHENKO: *The Electronic Density Close to Nuclei*. Dissertation, Universitetet i Oslo, Oslo, August 1995.
- [95] ALEXEI IANTCHENKO, ELLIOTT H. LIEB und HEINZ SIEDENTOP: *Proof of a conjecture about atomic and molecular cores related to Scott's correction*. J. reine angew. Math., 472:177–195, März 1996.
- [96] ALEXEI IANTCHENKO und HEINZ SIEDENTOP: *Asymptotic behavior of the one-particle density matrix of atoms at distances Z^{-1} from the nucleus*. Math. Z., 236(4):787–796, 2001.
- [97] V. JA. IVRII und I. M. SIGAL: *Asymptotics of the ground state energies of large Coulomb systems*. Annals of Math., 138(2):243–335, 1993.
- [98] VICTOR IVRII: *Heavy atoms in a superstrong magnetic field*. In: *Differential operators and spectral theory*, Seiten 125–137. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1999.
- [99] TOMASZ JAKUBOWSKI und JIAN WANG: *Heat kernel estimates of fractional Schrödinger operators with negative Hardy potential*. arXiv e-prints, September 2018.
- [100] HUBERT KALF: *The virial theorem in relativistic quantum mechanics*. J. Functional Analysis, 21(4):389–396, 1976.
- [101] TOSIO KATO: *Perturbation Theory for Linear Operators*, Band 132 der Reihe *Grundlehren der mathematischen Wissenschaften*. Springer-Verlag, Berlin, 1 Auflage, 1966.
- [102] R. KILLIP, C. MIAO, M. VISAN, J. ZHANG und J. ZHENG: *Sobolev spaces adapted to the Schrödinger operator with inverse-square potential*. Math. Z., 288(3-4):1273–1298, 2018.
- [103] ROWAN KILLIP, CHANGXING MIAO, MONICA VISAN, JUNYONG ZHANG und JIQIANG ZHENG: *The energy-critical NLS with inverse-square potential*. Discrete Contin. Dyn. Syst., 37(7):3831–3866, 2017.
- [104] ROWAN KILLIP, JASON MURPHY, MONICA VISAN und JIQIANG ZHENG: *The focusing cubic NLS with inverse-square potential in three space dimensions*. Differential Integral Equations, 30(3-4):161–206, 2017.
- [105] ROWAN KILLIP, MONICA VISAN und XIAOYI ZHANG: *Riesz transforms outside a convex obstacle*. Int. Math. Res. Not. IMRN, (19):5875–5921, 2016.
- [106] M. KLAUS und R. WÜST: *Characterization and uniqueness of distinguished selfadjoint extensions of Dirac operators*. Comm. Math. Phys., 64:171–176, 1978.
- [107] M. KLAUS und R. WÜST: *Spectral properties of Dirac operators with singular potentials*. J. Math. Anal. Appl., 78:206–214, 1979.

- [108] V. F. KOVALENKO, M. A. PERELMUTER und YA. A. SEMENOV: *Schrödinger operators with $L_w^{l/2}(\mathbb{R}^l)$ -potentials*. J. Math. Phys., 22:1033–1044, 1981.
- [109] A. KRAMIDA, YU. RALCHENKO, J. READER und NIST ASD TEAM. NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.2), Online verfügbar: <http://physics.nist.gov/asd> [2014, November 6]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD., 2014.
- [110] W. LENZ: *Über die Anwendbarkeit der statistischen Methode auf Ionengitter*. Z. Phys., 77:713–721, 1932.
- [111] MATHIEU LEWIN und ELLIOTT H. LIEB: *Improved Lieb-Oxford exchange-correlation inequality with a gradient correction*. Phys. Rev. A (3), 91(2):022507, 9, 2015.
- [112] ROGER T. LEWIS, HEINZ SIEDENTOP und SIMEON VUGALTER: *The essential spectrum of relativistic multi-particle operators*. Annales de l’Institut Henri Poincaré, 67(1):1–28, 1997.
- [113] ELLIOTT H. LIEB: *Bounds on the eigenvalues of the Laplace and Schrödinger operators*. Bull. Amer. Math. Soc., 82:751–753, 1976.
- [114] ELLIOTT H. LIEB: *A lower bound for Coulomb energies*. Phys. Lett., 70A:444–446, 1979.
- [115] ELLIOTT H. LIEB: *Thomas-Fermi and related theories of atoms and molecules*. Rev. Mod. Phys., 53(4):603–641, Oktober 1981.
- [116] ELLIOTT H. LIEB: *Bound on the maximum negative ionization of atoms and molecules*. Phys. Rev. A, 29(6):3018–3028, Juni 1984.
- [117] ELLIOTT H. LIEB und STEPHEN OXFORD: *Improved lower bound on the indirect Coulomb energy*. Intern. J. Quantum Chem., 19:427–439, 1981.
- [118] ELLIOTT H. LIEB und BARRY SIMON: *Thomas-Fermi theory revisited*. Phys. Rev. Lett., 31(11):681–683, Sep 1973.
- [119] ELLIOTT H. LIEB und BARRY SIMON: *The Thomas-Fermi theory of atoms, molecules and solids*. Advances in Math., 23(1):22–116, 1977.
- [120] ELLIOTT H. LIEB und WALTER E. THIRRING: *Gravitational collapse in quantum mechanics with relativistic kinetic energy*. Ann. Physics, 155(2):494–512, 1984.
- [121] ELLIOTT H. LIEB und HORNG-TZER YAU: *The Chandrasekhar theory of stellar collapse as the limit of quantum mechanics*. Comm. Math. Phys., 112(1):147–174, 1987.
- [122] ELLIOTT H. LIEB und HORNG-TZER YAU: *The stability and instability of relativistic matter*. Comm. Math. Phys., 118:177–213, 1988.
- [123] PAUL MANCAS, A. M. KLAUS MÜLLER und HEINZ SIEDENTOP: *The optimal size of the exchange hole and reduction to one-particle Hamiltonians*. Theoretical Chemistry Accounts: Theory, Computation, and Modeling (Theoretica Chimica Acta), 111(1):49–53, Februar 2004.

- [124] OLIVER MATTE und EDGARDO STOCKMEYER: *Spectral theory of no-pair Hamiltonians*. Reviews in Mathematical Physics, 22(01):1–53, 2010.
- [125] KONSTANTIN MERZ und HEINZ SIEDENTOP: *The atomic density on the Thomas–Fermi length scale for the Chandrasekhar Hamiltonian*. Rep. Math. Phys., 83(3):387–391, 2019.
- [126] ALBERT MESSIAH: *Mécanique Quantique*, Band 1. Dunod, Paris, 2 Auflage, 1969.
- [127] S. G. MIHLIN: *On the multipliers of Fourier integrals*. Dokl. Akad. Nauk SSSR (N.S.), 109:701–703, 1956.
- [128] PIERRE D. MILMAN und YU. A. SEMENOV: *Global heat kernel bounds via desingularizing weights*. J. Funct. Anal., 212(2):373–398, 2004.
- [129] MARVIN H. MITTLEMAN: *Theory of relativistic effects on atoms: Configuration-space Hamiltonian*. Phys. Rev. A, 24(3):1167–1175, September 1981.
- [130] S. MOROZOV: *Multiparticle Brown-Ravenhall Operators in External Fields*. Dissertation, Ludwig-Maximilians-Universität München, Mai 2008.
- [131] SERGEY MOROZOV und DAVID MÜLLER: *On the minimax principle for Coulomb-Dirac operators*. Math. Z., 280(3-4):733–747, 2015.
- [132] SERGEY MOROZOV und DAVID MÜLLER: *Lower bounds on the moduli of three-dimensional Coulomb-Dirac operators via fractional Laplacians with applications*. J. Math. Phys., 58(7):072302, 22, 2017.
- [133] SERGEY MOROZOV und SEMJON VUGALTER: *Stability of atoms in the Brown-Ravenhall model*. Ann. Henri Poincaré, 7(4):661–687, 2006.
- [134] HAGEN NEIDHARDT und VALENTIN A. ZAGREBNOV: *Fractional powers of self-adjoint operators and Trotter-Kato product formula*. Integral Equations Operator Theory, 35(2):209–231, 1999.
- [135] G. NENCIU: *Self-adjointness and invariance of the essential spectrum for Dirac operators defined as quadratic forms*. Comm. Math. Phys., 48(3):235–247, 1976.
- [136] ISAAC NEWTON: *Philosophiæ naturalis principia mathematica. Vol. I*. Harvard University Press, Cambridge, Mass., 1972. Reprinting of the third edition (1726) with variant readings, Assembled and edited by Alexandre Koyré and I. Bernard Cohen with the assistance of Anne Whitman.
- [137] F. W. J. OLVER: *Bessel functions of integer order*. In: MILTON ABRAMOWITZ und IRENE A. STEGUN (Herausgeber): *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Kapitel 9, Seiten 355–433. Dover Publications, New York, 5 Auflage, 1968.
- [138] LARS ONSAGER: *Electrostatic interaction of molecules*. The Journal of Physical Chemistry, 43(2):189–196, 1939.
- [139] THOMAS ØSTERGAARD SØRENSEN: *The large- Z behavior of pseudorelativistic atoms*. J. Math. Phys., 46(5):052307, 2005.

- [140] NATALJA RAKOWSKY und HEINZ SIEDENTOP: *An upper bound on the ionic ground state density at the nucleus*. Rep. Math. Phys., 36(1):91–98, 1995.
- [141] J. C. RAYNAL, S. M. ROY, V. SINGH, A. MARTIN und J. STUBBE: *The “Herbst Hamiltonian” and the mass of boson stars*. Phys. Lett. B, 320(1–2):105–109, Januar 1994.
- [142] MICHAEL REED und BARRY SIMON: *Methods of Modern Mathematical Physics. I. Functional Analysis*. Academic Press, New York, 1972.
- [143] MICHAEL REED und BARRY SIMON: *Methods of Modern Mathematical Physics. II. Fourier Analysis, Self-Adjointness*. Academic Press [Harcourt Brace Jovanovich Publishers], New York, 1975.
- [144] MICHAEL REED und BARRY SIMON: *Methods of Modern Mathematical Physics, Band 4: Analysis of Operators*. Academic Press, New York, 1. Auflage, 1978.
- [145] MARKUS REIHER und ALEXANDER WOLF: *Relativistic Quantum Chemistry: The Fundamental Theory of Molecular Science*. Wiley-VCH, Weinheim, 2009.
- [146] SERGE RICHARD und RAFAEL TIEDRA DE ALDECOA: *On the spectrum of magnetic Dirac operators with Coulomb-type perturbations*. J. Funct. Anal., 250(2):625–641, 2007.
- [147] G. ROSENBLJUM: *The distribution of the discrete spectrum for singular differential operators*. Soviet Math. Dokl., 13:245–249, 1972.
- [148] TROND SAUE: *Relativistic Hamiltonians for Chemistry: A Primer*. ChemPhysChem, 12(17):3077–3094, 2011.
- [149] UPKE-WALTHER SCHMINCKE: *Distinguished selfadjoint extensions of Dirac operators*. Math. Z., 129:335–349, 1972.
- [150] JULIAN SCHWINGER: *Thomas-Fermi model: The leading correction*. Phys. Rev. A, 22(5):1827–1832, 1980.
- [151] JULIAN SCHWINGER: *Thomas-Fermi model: The second correction*. Phys. Rev. A, 24(5):2353–2361, 1981.
- [152] J. M. C. SCOTT: *The binding energy of the Thomas-Fermi atom*. Phil. Mag., 43:859–867, 1952.
- [153] HEINZ SIEDENTOP und RUDI WEIKARD: *On the leading energy correction for the statistical model of the atom: Interacting case*. Comm. Math. Phys., 112:471–490, 1987.
- [154] HEINZ SIEDENTOP und RUDI WEIKARD: *On the leading correction of the Thomas-Fermi model: Lower bound – with an appendix by A. M. K. Müller*. Invent. Math., 97:159–193, 1989.
- [155] HEINZ SIEDENTOP und RUDI WEIKARD: *A new phase space localization technique with application to the sum of negative eigenvalues of Schrödinger operators*. Annales Scientifiques de l’École Normale Supérieure, 24(2):215–225, 1991.

- [156] HEINZ K. H. SIEDENTOP und RUDI WEIKARD: *On the leading energy correction for the statistical model of the atom: Non-interacting case*. Abh. Braunschweig. Wiss. Ges., 38:145–158, 1986.
- [157] B. SIMON: *Fifteen problems in mathematical physics*. In: *Perspectives in Mathematics*. Birkhäuser, 1984.
- [158] BARRY SIMON: *Trace Ideals and Their Applications*, Band 120 der Reihe *Mathematical Surveys and Monographs*. American Mathematical Society, Providence, RI, Second Auflage, 2005.
- [159] BARRY SIMON: *Convexity: An Analytic Viewpoint*, Band 187 der Reihe *Cambridge Tracts in Mathematics*. Cambridge University Press, Cambridge, 2011.
- [160] A. V. SOBOLEV: *The quasi-classical asymptotics of local Riesz means for the Schrödinger operator in a strong homogeneous magnetic field*. Duke Math. J., 74(2):319–429, 1994.
- [161] CHRISTOPHER D. SOGGE: *Fourier Integrals in Classical Analysis*, Band 210 der Reihe *Cambridge Tracts in Mathematics*. Cambridge University Press, Cambridge, Second Auflage, 2017.
- [162] JAN PHILIP SOLOVEJ, THOMAS ØSTERGAARD SØRENSEN und WOLFGANG L. SPITZER: *The relativistic Scott correction for atoms and molecules*. Commun. Pure Appl. Math., 63:39–118, Januar 2010.
- [163] JAN PHILIP SOLOVEJ und WOLFGANG L. SPITZER: *A new coherent states approach to semiclassics which gives Scott's correction*. Comm. Math. Phys., 241(2-3):383–420, 2003.
- [164] ARNOLD SOMMERFELD: *Zur Quantentheorie der Spektrallinien*. Annalen der Physik, 356(17):1–94.
- [165] ARNOLD SOMMERFELD: *Asymptotische Integration der Differentialgleichung des Thomas-Fermischen Atoms*. Z. Phys. A, 78:283–308, 1932.
- [166] ELIAS M. STEIN: *Singular Integrals and Differentiability Properties of Functions*. Princeton Mathematical Series, No. 30. Princeton University Press, Princeton, N.J., 1970.
- [167] ELIAS M. STEIN: *Topics in Harmonic Analysis Related to the Littlewood-Paley Theory*. Annals of Mathematics Studies, No. 63. Princeton University Press, Princeton, N.J.; University of Tokyo Press, Tokyo, 1970.
- [168] ELIAS M. STEIN: *Harmonic Analysis: Real-Variable Methods, Orthogonality, and Oscillatory Integrals*, Band 43 der Reihe *Princeton Mathematical Series*. Princeton University Press, Princeton, NJ, 1993. With the assistance of Timothy S. Murphy, Monographs in Harmonic Analysis, III.
- [169] ELIAS M. STEIN und RAMI SHAKARCHI: *Complex Analysis*, Band 2 der Reihe *Princeton Lectures in Analysis*. Princeton University Press, Princeton, NJ, 2003.

- [170] ELIAS M. STEIN und GUIDO WEISS: *Introduction to Fourier Analysis on Euclidean Spaces*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 2 Auflage, 1971.
- [171] BERND THALLER: *The Dirac Equation*. Texts and Monographs in Physics. Springer-Verlag, Berlin, 1 Auflage, 1992.
- [172] BERND THALLER: *Advanced Visual Quantum Mechanics*. Springer-Verlag, New York, 2005.
- [173] L. H. THOMAS: *The calculation of atomic fields*. Proc. Camb. Phil. Soc., 23:542–548, 1927.
- [174] C. TIX: *Lower bound for the ground state energy of the no-pair Hamiltonian*. Phys. Lett. B, 405(3-4):293–296, 1997.
- [175] C. TIX: *Self-adjointness and spectral properties of a pseudo-relativistic Hamiltonian due to Brown and Ravenhall*. Vorabdruck, mp-arc: 97-441, 1997.
- [176] C. TIX: *Strict positivity of a relativistic Hamiltonian due to Brown and Ravenhall*. Bull. London Math. Soc., 30(3):283–290, 1998.
- [177] FRANÇOIS TRÈVES: *Topological Vector Spaces, Distributions and Kernels*. Academic Press, New York-London, 1967.
- [178] VOLKER VOGELSANG: *Absolutely continuous spectrum of Dirac operators for long-range potentials*. J. Funct. Anal., 76(1):67–86, 1988.
- [179] R. A. WEDER: *Spectral properties of one-body relativistic spin-zero Hamiltonians*. Ann. Inst. H. Poincaré Sect. A (N.S.), 20:211–220, 1974.
- [180] RICARDO WEDER: *Spectral analysis of pseudodifferential operators*. J. Funct. Anal., 20:319–337, 1975.
- [181] JOACHIM WEIDMANN: *Oszillationsmethoden für Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen*. Math. Z., 119:349–373, 1971.
- [182] DAVID WOOD: *The Computation of Polylogarithms*. Technischer Bericht 15-92*, University of Kent, Computing Laboratory, University of Kent, Canterbury, UK, Juni 1992.
- [183] RAINER WÜST: *Distinguished self-adjoint extensions of Dirac operators constructed by means of cut-off potentials*. Math. Z., 141:93–98, 1975.
- [184] D. YAFAEV: *Sharp constants in the Hardy-Rellich inequalities*. Journ. Functional Analysis, 168(1):212–144, Oktober 1999.
- [185] G. M. ZHISLIN und S. A. VUGALTER: *On the discrete spectrum of Hamiltonians for pseudorelativistic electrons*. Izv. Ross. Akad. Nauk Ser. Mat., 66(1):71–102, 2002.
- [186] FELIPE ZO: *A note on approximation of the identity*. Studia Math., 55(2):111–122, 1976.

Eidesstattliche Versicherung

(Siehe Promotionsordnung vom 12.07.11, §8, Abs. 2 Pkt. .5.)

Hiermit erkläre ich an Eides statt, dass die Dissertation von mir selbstständig, ohne unerlaubte Beihilfe angefertigt ist.

Merz, Konstantin

Name, Vorname

München, 26.07.2019

Ort, Datum

Unterschrift Doktorand