- Unser Ziel ist es nun, die HEISENBERGsche Unschärferelation mathematisch zu formulieren. Dazu brauchen wir einige Begriffe aus der Statistik :

Definition 71.27 : Gegeben sei ein quantenmechanisches System im Zustand x , $x \in H$, $\|x\| = 1$, und eine Observable, also ein selbstadjungierter Operator f im Hilbertraum H . Ist $x \in D(f)$, so heißt

$$< x, f(x) >$$

der **Erwartungswert der Observablen f im Zustand x**. Die Zahl

$$\delta(x, f) := \| f(x) - < x, f(x) > x \|$$

heißt die **Streuung** und $\delta(x, f)^2$ die **Varianz von f im Zustand x**.

Beispiel 71.28 : Sei f ein Operator mit "reinem Punktspektrum", also $SC_f = \emptyset$, und **einfachen** Eigenwerten

$$\lambda_n \quad , \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad .$$

Sei $(x_n)_{n\in\mathbb{N}_0}$ ein vollständiges Orthonormalsystem von Eigenvektoren von f , so gilt für $x \in H$ mit $\|x\| = 1$:

$$x = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x_n \quad \text{mit} \quad \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = \|x\|^2 = 1 \quad .$$

Nach Satz 70.40 gilt für die Spektralschar $(e_\lambda)_{\lambda\in\mathbb{R}}$ von f :

$$(e_{\lambda_n} - e_{\lambda_n,-})(x_n) = x_n \quad .$$

Wegen $\lambda_n \neq \lambda_m$ für $n \neq m$ folgt daraus

$$(e_{\lambda_n} - e_{\lambda_n,-})(x_m) = 0 \quad \text{für} \quad n \neq m , \quad \text{also}$$

$$(e_{\lambda_n} - e_{\lambda_n,-})(x) = c_n x_n \quad .$$

Nach Definition 71.10 ist dann die Wahrscheinlichkeit dafür, dass der Messwert von f im Zustand x gleich λ_n ist :

$$w(x, f, [\lambda_n ; \lambda_n]) = \| (e_{\lambda_n} - e_{\lambda_n,-})(x) \|^2 = |c_n|^2 \quad .$$

Wegen $x \in D(f)$ erhalten wir für den Erwartungswert von f im Zustand x :

$$< x, f(x) > = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, \mathrm{d} < x, e_\lambda(x) > = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, \mathrm{d} \, \|e_\lambda(x)\|^2 \quad .$$

Da $S_f = SP_f$ ist, folgt nach Satz 70.37 : Ist λ kein Eigenwert von f , so gibt es ein $\varepsilon > 0$ mit

$$e_{\lambda+\varepsilon}(x) = e_{\lambda-\varepsilon} \quad , \quad \text{und damit}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, \mathrm{d}\, \|e_\lambda(x)\|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \int_{[\lambda_n;\lambda_n]} \lambda \, \mathrm{d}\, \|e_\lambda(x)\|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n \|(e_{\lambda_n} - e_{\lambda_n,-})(x)\,\|^2 ,$$

also

$$(1) \qquad \underline{< x, f(x) > = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n \, w(x, f, [\lambda_n, \, ; \, \lambda_n])} \quad .$$

Auch die Varianz von f im Zustand x kann man ausrechnen. Nach Satz 70.36 gilt

$$\delta(x,f)^2 = \|(f - < x, f(x) > \mathrm{id})(x)\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\lambda - < x, f(x) >|^2 \, \mathrm{d}\, \|e_\lambda(x)\|^2$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} |\lambda_n - < x, f(x) >|^2 \, \|(e_{\lambda_n} - e_{\lambda_n,-})(x)\|^2 \quad , \qquad \text{also}$$

$$(2) \qquad \underline{\delta(x,f)^2 = \sum_{n=0}^{\infty} |\lambda_n - < x, f(x) >|^2 \;\; w(x, f, [\lambda_n, \, ; \, \lambda_n])} \quad .$$

Aus der Definition der Varianz, und da $f - < x, f(x) > \cdot \, \mathrm{id}$ selbstadjungiert ist, folgt noch

$$(3) \qquad \underline{\delta(x,f)^2 = < (f - < x, f(x) > \mathrm{id})^2 x, x >} \quad .$$

(71.29) Physikalische Interpretation : Wir sehen $\delta(x,f)$ als ein Maß dafür an, mit welcher Schärfe (Genauigkeit) der Erwartungswert von f bei einer Messung im Zustand x angenommen wird. Die Messung im Zustand x heißt **scharf** , wenn

$$\delta(x,f) = 0$$

ist, also nach Definition 71.27 genau dann, wenn

$$f(x) = < x, f(x) > x$$

ist. Dann ist also x ein Eigenvektor von f . Sei umgekehrt x ein normierter Eigenvektor von f , dann gilt

$$f(x) = \mu\, x \quad , \quad \|x\| = 1 , \quad \text{mit} \quad \mu \in \mathbb{R} , \quad \text{also}$$

$$< x, f(x) > = \mu \, \|x\|^2 = \mu , \quad \text{also}$$

$$f(x) = \mu\, x = < x, f(x) > x \quad .$$

Eine Messung von f im Zustand x ist also genau dann scharf, wenn x ein

Eigenvektor der Observablen f ist. Der zu x gehörige Eigenwert von f ist dabei

$$\mu = < x, f(x) > \quad ,$$

also der Erwartungswert von f im Zustand x.

- Nach Satz 70.40 gilt:
x ist Eigenvektor von f zum Eigenwert $\mu \quad \Longleftrightarrow \quad x = (e_\mu - e_{\mu,-})(x)$,
wobei $(e_\lambda)_{\lambda\in\mathbb{R}}$ die zu f gehörige Spektralschar ist, und nach Definition 71.10 ist das gleichbedeutend mit

$$w(x, f, \{\mu\}) = \| (e_\mu - e_{\mu,-})(x) \|^2 = \|x\|^2 = 1 \quad .$$

Eine Messung von f im Zustand x ist also genau dann scharf, wenn man mit Wahrscheinlichkeit 1 als Messwert für f die Zahl $\mu = < x, f(x) >$, den Erwartungswert von f, erhält.

Folgerung 71.30 : Speziell für den Hamilton-Operator $\mathcal{H}$ sagt die letzte Bemerkung: Wir können die Energie eines quantenmechanischen Systems genau dann scharf messen, wenn sich das System in einem stationären Zustand befindet.

- Zur Vorbereitung der Heisenbergschen Unschärferelation brauchen wir noch den

Satz 71.31 : f und g seien zwei Observable und x der Zustand eines quantenmechanischen Systems, $\|x\| = 1$. Sei außerdem

$$x \in D(f) \cap D(g) \quad , \quad f(x) \in D(g) \quad \text{und} \quad g(x) \in D(f) \quad .$$

Dann gilt

$$\delta(x, f) \cdot \delta(x, g) \geq \frac{1}{2} | < x, (g \circ f - f \circ g)(x) > | \quad .$$

Beweis : Für beliebige $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ gilt

$$\begin{aligned}
& < x, (g \circ f - f \circ g)(x) > \\
& \quad = < x, (g-\beta\,\mathrm{id})\circ(f-\alpha\,\mathrm{id})(x) - (f-\alpha\,\mathrm{id})\circ(g-\beta\,\mathrm{id})(x) > \\
& \quad = < x, (g-\beta\,\mathrm{id})\circ(f-\alpha\,\mathrm{id})(x) > - < (g-\beta\,\mathrm{id})\circ(f-\alpha\,\mathrm{id})(x), x > \\
& \quad = 2\,i\ \mathrm{Im} < x, (g-\beta\,\mathrm{id})\circ(f-\alpha\,\mathrm{id})(x) > \quad , \qquad \text{also}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
| < x, (g \circ f - f \circ g)(x) > | &\leq 2 | < (g - \beta\,\mathrm{id})(x), (f - \alpha\,\mathrm{id})(x) > | \\
&\leq 2 \|(g - \beta\,\mathrm{id})(x)\| \cdot \|(f - \alpha\,\mathrm{id})(x)\| \quad ,
\end{aligned}$$

und mit $\alpha := < x, f(x) >$, $\beta := < x, g(x) >$ folgt die Behauptung. $\square$

Folgerung 71.32 : Seien f und g zwei selbstadjungierte Operatoren, so dass für alle $x \in H$ mit

$$(*) \qquad x \in D(f) \cap D(g) \quad , \quad f(x) \in D(g) \quad , \quad g(x) \in D(f)$$

gilt:

$$(g \circ f - f \circ g)(x) \, = \, \rho \, x$$

mit einer festen komplexen Zahl ρ. Dann folgt aus Satz 71.31 :

$$\delta(x, f) \cdot \delta(x, g) \;\geq\; \frac{|\rho|}{2} \quad .$$

Das ist die abstrakte Formulierung der HEISENBERGschen Unschärferelation: Sei $\rho \neq 0$, dann gibt es kein $x \in H$, das $(*)$ erfüllt und Eigenvektor von f oder g ist. Denn sonst wäre nach (71.29)

$$\delta(x, f) \, = \, 0 \qquad \text{oder} \qquad \delta(x, g) \, = \, 0 \quad ,$$

im Widerspruch zu $\delta(x, f) \cdot \delta(x, g) \;\geq\; \dfrac{|\rho|}{2}$. Diese Formel sagt noch etwas mehr aus : In dem Maße, wie $\delta(x, f)$ klein wird, wird $\delta(x, g)$ groß. D.h., wenn man bei den Messergebnissen von f nur geringe Streuung hat, hat man bei den Messergebnissen von g eine große Streuung.

Bemerkung 71.33 : In der Physik formuliert man die HEISENBERGsche Unschärferelation zunächst nur für den Orts- und den Impulsoperator. Dazu müssen wir den Impulsoperator auf einem geeigneten Hilbertraum definieren. Wie schon in §68 sei

$$\mathcal{L}^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n) \quad = \quad \{ f \, : \, \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{C} \;\; \Big| \;\; \int\limits_A f(x) \, \mathrm{d}^n x < \infty$$

$$\text{für jede kompakte Teilmenge } A \subset \mathbb{R}^n \quad \} \text{, und}$$

$$\mathrm{L}^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n) \, = \, \mathcal{L}^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n) / \mathcal{N} \quad ,$$

$$\mathcal{N} \quad = \quad \{ \; f \in \mathcal{L}^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n) \; \big| \; f \, = \, 0 \quad \text{fast überall} \; \} \quad .$$

Jedes $f \in \mathrm{L}^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$ definiert eine Distribution : Für

$$\varphi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n) \, = \, \mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^n) \qquad \text{sei} \qquad T_f[\varphi] \, = \int\limits_{\mathbb{R}^n} f(x) \varphi(x) \, \mathrm{d}^n x \quad ,$$

dann ist

$$T_f \, : \, \mathcal{D}(\mathbb{R}^n) \; \longrightarrow \; \mathbb{C}$$

eine stetige Linearform auf $\mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$, also eine Distribution. Für

$$\alpha := (\alpha_1, \ldots, \alpha_n) \in \mathbb{N}_0^n \quad \text{und} \quad |\alpha| := \sum_{j=1}^{n} \alpha_j$$

war die α-te Ableitung von T_f definiert durch

$$(\mathrm{D}^\alpha T_f)[\varphi] := (-1)^{|\alpha|}\, T_f[\mathrm{D}^\alpha \varphi] \quad .$$

Es kann nun sein, dass es ein $g^\alpha \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)$ gibt mit

$$\mathrm{D}^\alpha T_f = T_{g^\alpha} \quad ,$$

dass also insbesondere $\mathrm{D}^\alpha T_f$ wieder eine **reguläre** Distribution ist, dann sagen wir: Es existiert die <u>α**-te Distributionsableitung**</u> $g^\alpha \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)$ für $f \in \mathrm{L}^1_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^n)$. Dabei wissen wir aus der Theorie der Distributionen : wenn alle partiellen Ableitungen

$$\mathrm{D}^\beta f \quad \text{für} \quad 0 \le |\beta| \le |\alpha|$$

existieren, dann ist $\mathrm{D}^\alpha f$ gleich dieser $\alpha-$ten Distributionsableitung g^α (genauer: die Äquivalenzklassen in $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)$ sind gleich), denn es ist dann

$$\mathrm{D}^\alpha T_f = T_{\mathrm{D}^\alpha f} \quad .$$

Man kann aber aus der Existenz der Distributionsableitung von f nicht die Differenzierbarkeit von f schließen.

<u>**Definition 71.34 :**</u> Sei $k \in \mathbb{N}_0$. Dann verstehen wir unter $W^k(\mathbb{R}^n)$ die Menge der $f \in \mathrm{L}^1_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^n)$, für die die $\alpha-$ te Distributionsableitung von f für

$$0 \le |\alpha| \le k$$

in $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)$ existiert. $W^k(\mathbb{R}^n)$ heißt der <u>**Sobolev - Raum**</u> der Ordnung k. (Bei (T) werden diese Räume mit $W_2^k(\mathbb{R}^n)$ bezeichnet.) □

<u>**Satz 71.35 :**</u> Sei $k \in \mathbb{N}$, und für $\varphi \in W^k(\mathbb{R}^n)$ und $|\alpha| \le k$ sei

$$\tilde{\mathrm{D}}^\alpha \varphi \quad \text{die } \alpha - \text{te Distributionsableitung von} \quad \varphi \quad .$$

Setzt man

$$< \varphi, \psi >_{W^k} := \sum_{\alpha \in \mathbb{N}_0^n \wedge |\alpha| \le k} \int_{\mathbb{R}^n} \overline{\tilde{\mathrm{D}}^\alpha \varphi(x)} \cdot \tilde{\mathrm{D}}^\alpha \psi(x)\, \mathrm{d}^n x \quad ,$$

so wird $W^k(\mathbb{R}^n)$ ein Hilbertraum, und $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ ist ein dichter Untervektorraum von $W^k(\mathbb{R}^n)$.

<u>**Beweis :**</u> Siehe (T), Sätze 5.1, 5.2 . □

<u>**Bemerkung 71.36 :**</u> Wegen Satz 71.19 und nach Definition von $W^k(\mathbb{R}^n)$ gilt

$$\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^n) \subset W^k(\mathbb{R}^n) \subset \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n) \quad ,$$

und bezüglich der L^2−Norm liegt $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ dicht in $L^2(\mathbb{R}^n)$, also liegt auch $W^k(\mathbb{R}^n)$ bezüglich der L^2−Norm dicht in $L^2(\mathbb{R}^n)$. Wir haben aber in $W^k(\mathbb{R}^n)$ eine andere Norm als in $L^2(\mathbb{R}^n)$, nämlich

$$\|\varphi\|_{W^k} \quad = \quad (<\varphi,\varphi>_{W^k})^{\frac{1}{2}} \qquad !$$

- Auf $W^1(\mathbb{R}^n)$ können wir nun den Impulsoperator definieren:

(71.37) Impulsoperator (eindimensional) : Für ein Teilchen, das sich auf der reellen Achse bewegt (z.B. den harmonischen Oszillator), definieren wir den **Impulsoperator** g auf der nach Bemerkung 71.36 in $L^2(\mathbb{R})$ dichten Teilmenge

$$D(g) := W^1(\mathbb{R}) = \{ \varphi \in L^2(\mathbb{R}) \;\big|\; \exists\, \tilde{\mathrm{D}}\varphi \in L^2(\mathbb{R}) \;:\; T_\varphi{}' = T_{\tilde{\mathrm{D}}\varphi} \}$$

$$\text{durch } g(\varphi) := -i\,\hbar\,\tilde{\mathrm{D}}\varphi \quad .$$

Für $\varphi,\psi\in\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ (!) berechnet man mit partieller Integration

$$<g(\varphi),\psi> = i\,\hbar\int\limits_{\mathbb{R}} \overline{\varphi'(x)}\psi(x)\,\mathrm{d}\,x \;=\; -i\,\hbar\int\limits_{\mathbb{R}} \overline{\varphi(x)}\psi'(x)\,\mathrm{d}\,x \;= <\varphi,g(\psi)>,$$

$<\ ,\ >$ ist hier das Skalarprodukt in $L^2(\mathbb{R})$, nicht in $W^1(\mathbb{R})$. Nach 71.36 liegt $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ dicht in $W^1(\mathbb{R})$ bezüglich der L^2−Norm , also gilt auch

$$<g(\varphi),\psi> \quad = \quad <\varphi,g(\psi)> \qquad \text{für alle} \quad \varphi,\psi\in W^1(\mathbb{R}) \quad .$$

g erfüllt also (Sy) . Um zu zeigen, dass g sogar selbstadjungiert ist, fehlen uns entsprechende Sätze über $W^1(\mathbb{R})$.

(71.38) Heisenbergsche Unschärferelation für Orts- und Impulsoperator : Wir wollen sehen, ob die Voraussetzungen von Folgerung 71.32 erfüllt sind für den eben definierten Impulsoperator g und den Ortsoperator f mit

$$D(f) = \{ \varphi\in L^2(\mathbb{R}) \;\big|\; \psi\in L^2(\mathbb{R}) \quad \text{für} \quad \psi(x) := x\cdot\varphi(x) \} \quad ,$$

$$(f(\varphi))(x) := x\cdot\varphi(x) \;:$$

Sei zunächst $\varphi\in\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R})$, dann gilt

$$(*) \quad \varphi\in D(f)\cap D(g) \quad , \quad f(\varphi)\in D(g) \quad , \quad g(\varphi)\in D(f) \quad \text{und}$$

$$((g\circ f - f\circ g)(\varphi))(x) \;=\; -i\,\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,x}(x\varphi(x)) + i\,\hbar x\,\frac{\mathrm{d}\,\varphi(x)}{\mathrm{d}\,x} \;=\; -i\,\hbar\,\varphi(x)\,,$$

also

$$(g\circ f - f\circ g)(\varphi) \quad = \quad -i\,\hbar\,\varphi \quad .$$

Man muss sich noch überlegen, dass diese Formel auch für alle φ gilt, die $(*)$ erfüllen. Dann folgt nach 71.32 :

$$\delta(\varphi, f) \cdot \delta(\varphi, g) \;\geq\; \frac{\hbar}{2} \quad .$$

Das ist die HEISENBERGsche Formulierung der Unschärferelation. □

Wir wollen damit den Abschnitt über die Axiomatik der Quantenmechanik beenden und uns noch einige in der Quantenmechanik vorkommende Operatoren ansehen und ihre Spektren bestimmen. Zur Konstruktion der Hamilton-Operatoren benutzt man die folgende

(71.39) Quantisierungsregel : Gegeben sei ein System von n Teilchen, das im Rahmen der klassischen Mechanik und Elektrodynamik durch cartesische Ortskoordinaten $x_1, \ldots, x_{3n}$ und Impulskoordinaten $p_1, \ldots, p_{3n}$ beschrieben werden kann, und

$$h(x_1, \ldots, x_{3n}, p_1, \ldots, p_{3n})$$

sei die klassische Hamiltonfunktion. Dann ersetzen wir die Ortskoordinaten x_k durch die Operatoren f_k ,

$$(f_k(\varphi))(x) \quad := \quad x_k \cdot \varphi(x)$$

und die Impulskoordinaten p_k durch die Operatoren g_k ,

$$(g_k(\varphi))(x) \quad := \quad -i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial\, x_k}\,\varphi(x) \quad .$$

Den so gewonnenen Differentialoperator $h(f_k, g_k)$ verwendet man zur Konstruktion des Hamiltonoperators.
- Diese Regel bedarf noch der Präzisierung :

Bemerkung 71.40 : Die Regel 71.39 besagt, dass man $h(f_k, g_k)$ formal ausrechnet und damit einen Operator

$$\mathcal{H} \;=\; h(f_k, g_k)$$

erhält. Das ist dann nicht eindeutig, wenn in $h(x,p)$ Produkte $x_k \cdot p_k$ auftreten, denn es ist $x_k \cdot p_k \;=\; p_k \cdot x_k$, aber

$$((f_k \circ p_k)(\varphi))(x) \quad = \quad -i\,\hbar\, x_k\,\frac{\partial}{\partial x_k}\,\varphi(x) \quad ,$$

$$((g_k \circ f_k)(\varphi))(x) \quad = \quad -i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial x_k}(x_k\varphi(x)) \;=\; -i\,\hbar\, x_k\,\frac{\partial}{\partial x_k}\,\varphi(x) - i\,\hbar\varphi(x) \quad .$$

Man muss also davon ausgehen, dass in den gegebenen Hamiltonfunktionen $h(x,p)$ solche Produkte $x_k \cdot p_k$ nicht auftreten.

Bemerkung 71.41 : Die Formulierung “$h(f_k, g_k)$ verwendet man zur Konstruktion des Hamiltonoperators” ist so zu verstehen, dass man zunächst einen Definitionsbereich für den Hamiltonoperator suchen muss. Dazu sucht man sich je nach Problem einen Hilbertraum (etwa $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^{3n})$) und darin einen dichten Untervektorraum $D(\mathcal{H})$, so dass

$$\mathcal{H}(\varphi) \quad = \quad h(f_k, g_k)(\varphi)$$

für $\varphi \in D(\mathcal{H})$ definiert ist. Für den harmonischen Oszillator haben wir das schon gemacht. Für das Beispiel, das gleich kommt, untersuchen wir den Differentialoperator $-\Delta$:

Satz 71.42 : (a) Der Differentialoperator f,

$$D(f) \quad := \quad W^2(\mathbb{R}^n) \quad ,$$

$$f(\varphi) \quad := \quad -\Delta\,\varphi \quad = \quad -\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}\varphi \quad ,$$

wobei hier unter $\dfrac{\partial^2}{\partial x_j^2}$ die zweite Distributionsableitung von φ zu verstehen ist, ist ein selbstadjungierter Operator im Hilbertraum $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)$.

(b) Für den Operator f_0,

$$D(f_0) \quad := \quad \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^n) \quad , \quad f_0(\varphi) := -\Delta\,\varphi$$

gilt $\overline{f_0} = f$.

(c) Es gilt $f \;\geq\; 0$.

(d) $SP_f = \emptyset \quad , \quad SC_f = [0\,;\infty) \quad .$

Beweis : (a) Wir zeigen zunächst, dass f die Bedingung (Sy) erfüllt: Seien $\varphi, \psi \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, dann folgt mit partieller Integration:

$$< f_0(\varphi), \psi > = \int\limits_{\mathbb{R}^n} \overline{(-\Delta\varphi(x))}\,\psi(x)\;\mathrm{d}^n x = \int\limits_{\mathbb{R}^n} \sum_{j=1}^{n} \overline{\frac{\partial\varphi(x)}{\partial x_j}}\,\frac{\partial\psi(x)}{\partial x_j}\;\mathrm{d}^n x$$

$$= \int\limits_{\mathbb{R}^n} \overline{\varphi(x)}\cdot(-\Delta\psi(x))\;\mathrm{d}^n x = < \varphi, f_0(\psi) > \quad .$$

Da $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ dicht in $W^2(\mathbb{R}^n)$ ist, folgt durch Grenzübergang für $\varphi, \psi \in W^2(\mathbb{R}^n)$:

$$< f(\varphi), \psi > \quad = \quad < \varphi, f(\psi) > \quad ,$$

also ist (Sy) erfüllt, und außerdem gilt

$$(1) \qquad < f(\varphi), \varphi > \quad = \quad \int\limits_{\mathbb{R}^n} \sum_{j=1}^{n} \left|\frac{\partial\varphi(x)}{\partial x_j}\right|^2 \mathrm{d}^n x \;\geq\; 0 \quad ,$$

nach Definition 70.5 also : $f \;\geq\; 0$ Also gilt (c) . Die Selbstadjungiertheit von f zeigt man mit Hilfssatz 70.57 :

$$\exists\,\lambda\in\mathbb{C}\ :\ R(f-\lambda\,\mathrm{id})\ =\ R(f-\overline{\lambda}\,\mathrm{id})\ =\ H\quad\Longrightarrow\quad f\ \text{selbstadjungiert.}$$

Dazu nehmen wir uns ein beliebiges $\lambda\in\mathbb{R}$ mit $\lambda<0$, und ein beliebiges $\psi\in\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)$. Mit ψ gehören auch die Fouriertransformierte $\widehat{\psi}$ und die Funktion

$$\sigma\quad,\quad\text{definiert durch}\quad\sigma(x)\ :=\ \frac{1}{\|x\|^2-\lambda}\,\widehat{\psi}(x)$$

($\|x\|$ die Norm von $x\in\mathbb{R}^n$,) zu $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)$ (was wir im Einzelnen nicht beweisen wollen). Dann ist auch

$$\check{\widehat{\sigma}}\in\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)\quad\text{für}\quad\check{\widehat{\sigma}}(x)\ :=\ \widehat{\sigma}(-x)\quad.$$

Nach unseren Rechenregeln für die Vertauschung von Differentiation und Fouriertransformation (Satz 52.2.9, Skript S.129) gilt für $\beta\in\mathbb{N}_0^n$:

$$\mathrm{D}^\beta\check{\widehat{\sigma}}\quad=\quad(-1)^{|\beta|}\,\check{(\mathrm{D}^\beta\widehat{\sigma})}\quad=\quad(-1)^{|\beta|}\check{(\widehat{(\check{\mu}^\beta\sigma)})}\quad=\quad(-1)^{|\beta|}\widehat{\mu^\beta\check{\sigma}}$$

mit $\mu(x)\ :=\ ix$. Für $|\beta|\ \le\ 2$ ist auch $\mu^\beta\sigma\in\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)$ (ohne Beweis) und damit auch $\mathrm{D}^\beta\check{\widehat{\sigma}}\in\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)$, also $\check{\widehat{\sigma}}\in W^2(\mathbb{R}^n)$, und es gilt

$$-\Delta\check{\widehat{\sigma}}\quad=\quad-\sum_{j=1}^n\mathrm{D}_j^2\check{\widehat{\sigma}}\quad=\quad-\sum_{j=1}^n(-1)^2\widehat{\mu_j^2\check{\sigma}}$$

mit $\mu_j(x)\ :=\ i\,x_j$, also $\mu_j(x)^2\ =\ -x_j^2$,

$$\left(-\sum_{j=1}^n\mu_j^2\check{\sigma}\right)(x)\quad=\quad\sum_{j=1}^n x_j^2\,\sigma(-x)\quad=\quad\|(-x)\|^2\,\sigma(-x)\quad=$$

$$=\quad\frac{\|(-x)\|^2}{\|(-x)\|^2-\lambda}\,\widehat{\psi}(-x)\quad,$$

$$-\lambda\,\sigma(-x)\quad=\quad\frac{-\lambda}{\|(-x)\|^2-\lambda}\widehat{\psi}(-x)\quad,\qquad\text{also}$$

$$-\sum_{j=1}^n\mu^2\check{\sigma}-\lambda\check{\sigma}\quad=\quad1\cdot\check{\widehat{\psi}}\quad,$$

$$-\Delta\check{\widehat{\sigma}}-\lambda\check{\widehat{\sigma}}\quad=\quad\psi\quad,$$

also $R(f-\lambda\,\mathrm{id})\ =\ \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)$.

b) Um $\overline{f_0}\ =\ f$ zu zeigen, müssen wir nach Satz 70.66 (c) zeigen, dass $W^2(\mathbb{R}^n)$ der Abschluss von $D(f_0)\ =\ \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ in $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)$ bezüglich $\|\ \ \|_f$ ist, wobei

$$\|\varphi\|_f^2\ =\ \|f(\varphi)\|^2+\|\varphi\|^2\qquad(\|\ \ \|\quad\text{die Norm in}\quad\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)\ )$$

ist. Nun wissen wir, dass $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ bezüglich der Norm von $W^2(\mathbb{R}^n)$ dicht in $W^2(\mathbb{R}^n)$ liegt; wir sind also fertig, wenn wir gezeigt haben, dass $\| \quad \|_{W^2}$ und $\| \quad \|_f$ äquivalent sind, denn dann konvergieren Folgen, die in der einen Norm konvergieren, auch in der anderen Norm, und zwar gegen den gleichen Grenzwert. Rechnen wir die beiden Normen einmal aus:

$$\begin{aligned} \|\varphi\|_f{}^2 &= \|\varphi\|^2 + \|\Delta\varphi\|^2 = \|\varphi\|^2 + \left\| \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2\varphi}{\partial x_j^2} \right\|^2 \\ &= \|\varphi\|^2 + \left\langle \sum_{j=1}^n \mathrm{D}_j^2\varphi, \sum_{j=1}^n \mathrm{D}_j^2\varphi \right\rangle \\ &= \|\varphi\|^2 + \sum_{j,k=1}^n \int\limits_{\mathbb{R}^n} \overline{\mathrm{D}_j^2\varphi(x)}\, \mathrm{D}_k^2\varphi(x)\ \mathrm{d}^n x \quad . \end{aligned}$$

Für $\varphi \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ erhält man mit partieller Integration :

$$\begin{aligned} \|\varphi\|_f{}^2 &= \|\varphi\|^2 - \sum_{j,k=1}^n \int\limits_{\mathbb{R}^n} \overline{\mathrm{D}_j^2\mathrm{D}_k\varphi(x)}\, \mathrm{D}_k\varphi(x)\ \mathrm{d}^n x \\ &= \|\varphi\|^2 + \sum_{j,k=1}^n \int\limits_{\mathbb{R}^n} \overline{\mathrm{D}_j\mathrm{D}_k\varphi(x)}\, \mathrm{D}_j\mathrm{D}_k\varphi(x)\ \mathrm{d}^n x \\ &= \|\varphi\|^2 + \sum_{j,k=1}^n \|\mathrm{D}_j\mathrm{D}_k\varphi\|^2 \quad , \end{aligned}$$

$$(2) \qquad \|\varphi\|_f{}^2 = \|\varphi\|^2 + \sum_{j=1}^n \|\mathrm{D}_j^2\varphi\|^2 + 2\sum_{j<k} \|\mathrm{D}_j\mathrm{D}_k\varphi\|^2 \quad ,$$

wobei hier $\| \quad \|$ stets die Norm in $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)$ bezeichnet. Andererseits ist

$$\begin{aligned} \|\varphi\|_{W^2}^2 &= \sum_{|\beta|\le 2} \int\limits_{\mathbb{R}^n} |\mathrm{D}^\beta\varphi(x)|^2\ \mathrm{d}^n x \\ &= \|\varphi\|^2 + \sum_{1\le|\beta|\le 2} \|\mathrm{D}^\beta\varphi\|^2 \\ &= \|\varphi\|^2 + \sum_{j=1}^n \|\mathrm{D}_j^2\varphi\|^2 + 2\sum_{j<k} \|\mathrm{D}_j\mathrm{D}_k\varphi\|^2 + \sum_{j=1}^n \|\mathrm{D}_j\varphi\|^2 \quad , \end{aligned}$$

also

$$(3) \qquad \|\varphi\|_f{}^2 \le \|\varphi\|_{W^2}^2 \quad .$$