Eigenwertzweige von Schrödinger-Operatoren in Lücken des wesentlichen Spektrums

Tilo Kayser

Vom Fachbereich für Mathematik und Informatik
der Technischen Universität Braunschweig
genehmigte

Dissertation

zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)

1. Referent:	Prof. Dr. R. Hempel
2. Referent:	Prof. Dr. K.-J. Wirths
eingreicht am:	4. 08. 2000
Datum der Promotion:	10. 10. 2000

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Untersuchungsgegenstand

Ziel der vorliegenden Arbeit ist die asymptotische Analyse der Lösungen $E(\lambda)$ der Eigenwertgleichung

$$(H+\lambda W)u = E(\lambda)u \quad (0 \leq \lambda < \infty) \tag{1.1}$$

in einer Spektrallücke $[a,b] \subset \mathbb{R} \setminus \sigma_e(H)$ des wesentlichen Spektrums des Schrödinger-Operators

$$H = -\Delta + V$$

im $L_2(\mathbb{R}^\nu)$ für große λ. Wir setzen dabei voraus, daß $0 \leq V \in L_\infty$ ein nichtnegatives Hintergrundpotential ist, so daß H den Definitionsbereich $D(H) = \mathscr{H}^2$ hat, und W ein beschränktes, im Unendlichen verschwindenes Störpotential ist.

Wegen des Verschwindens von W im Unendlichen ist die Störung W relativ H-kompakt, und der gestörte Operator $H(\lambda) = H + \lambda W$ hat im Intervall (a,b) höchstens diskrete Eigenwerte endlicher Vielfachheit.
Wir haben W beschränkt vorausgesetzt, so daß die Familie der Operatoren $H(\lambda)$ eine selbstadjungierte analytische Familie vom Typ (A) im Sinne von Kato ist. Die Eigenwerte $E(\lambda) \in (a,b)$ sind deshalb durch Zweige analytischer Funktionen gegeben, und wir können von Eigenwertzweigen von $H(\lambda)$ in (a,b) sprechen.

Leitmotiv sind die Arbeiten [AH82, GGH$^+$88]. Mit Methoden der Theorie der gewöhnlichen Differentialgleichungen wurde in diesen Artikeln gezeigt, daß die Eigenwertzweige (1.1) entsprechender eindimensionaler Modellprobleme für große Kopplungen λ in der λ,E-Ebene ein regelmäßiges Erscheinungsbild haben. Wir zeigen, daß die Eigenwertzweige für Raumdimension $\nu \geq 2$ im Kopplungsgrenzwert $\lambda \to \infty$ Charakteristika der eindimensionalen Modellprobleme aufweisen. Für einfache Modellprobleme geben wir eine asymptotische Beschreibung einzelner Eigenwertzweige resp. des Spektrums des gestörten Operators $H(\lambda)$ an.

Motivation

Die Untersuchung des Problems (1.1) ist motiviert durch das Ein-Elektronen-Modell in der Festkörperphysik. Für ein periodisches Potential V werden durch das

Spektrum $\sigma(H)$ des Operators H die erlaubten Energie-Zustände eines sich in einem unendlich ausgedehnten Kristall bewegenden Elektrons beschrieben. Die Energie-Zustände sind in einer Band-Lücken-Struktur angeordnet.
Das System ist in der Lage Energie zu absorbieren, wenn Elektronen von einem Energieniveau auf ein Höheres wechseln können. Durch die Lücken im Spektrum sind der Absorptionsfähigkeit des Systems Grenzen gesetzt.
Das sichtbare Licht passiert ungestört den Korund, und der Kristall erscheint transparent.

Werden einzelne Atome des Kristalls durch Andere mit einer höheren Kernladungszahl ersetzt, können zusätzliche Energieniveaus in den Spektrallücken des reinen Kristalls auftreten. Durch (1.1) werden diese Niveaus mathematisch beschrieben. Der Parameter λ kann dabei als Atomgewicht gedeutet werden. Die zusätzlichen Energieniveaus verkürzen die Längen der Spektrallücken. Der verunreinigte Kristall ist nun in der Lage Quanten geringer Energie zu absorbieren.
Die Farben des Rubins und des Smaragds sind das sichtbare Ergebnis der Störung der Gitterstruktur des Korunds.

Die quantenmechanische Erklärung der Farben von Kristallen ist eine Anwendung des mathematischen Modells. Weitere sind das Verständnis der Physik von Lasern und dotierten Halbleitern. (siehe die motivierenden Abschnitte aus [DH86, Hem87, Hem89, ADH89] und den dortigen Referenzen auf die physikalische Literatur).

Ausgehend von der Fragestellung, ob jedes Energieniveau E in der Spektrallücke durch einen Eigenwertzweig überquert wird ([DH86, GS88]), kozentrierte sich in den letzen zwei Jahrzehnten das Interesse der Untersuchungen auf Asymptotiken bzw. asymtotische Abschätzungen der Anzahl

$$\mathcal{N}(\lambda) = \mathcal{N}(\lambda; H-E, W) = \sum_{0<\mu<\lambda} \dim\ker(H-E+\mu W)$$

der Überquerungen eines Niveaus E durch Eigenwertzweige (siehe z.B. [Hem87, Hem89, ADH89, Hem92a, Hem92b, Hem97, Bir91, BW94, Bir95, Saf97, Saf98a, Saf98b, Lev95, Lev99]).

Existenz und asymptotische Abschätzungen der Überquerungen eines Energieniveaus geben nur Hinweise auf die Veränderung des Spektrums in Abhängigkeit von λ.
Mit Hilfe der Liouville-Green-Approximation und Betrachtung asymptotischer transzendenter Gleichungen konnten die Autoren von [GGH$^+$88] hingegen ein detailiertes Bild von $\sigma(H(\lambda))$ für Schrödinger-Operatoren auf der reellen Achse

entwerfen. Dem Spektrum des Operators $H_S = -\Delta + V$ auf $\mathbb{R} \setminus S$ mit $S = \operatorname{supp} W$ und Dirichletbedingungen auf dem Rand von $\mathbb{R} \setminus S$ kommt dabei eine besondere Rolle zu.
Je nach Vorzeichen des Störpotential ergibt sich ein anderes Bild.

- Im Fall W nichtnegativ lassen sich die Eigenwertzweige von $H(\lambda)$ asymptotisch bei $\lambda = \infty$ entwickeln. Die Eigenwerte des Operators H_S sind waagerechte Asymptoten für die Eigenwertzweige von $H(\lambda)$, und sie sind damit die nullte Approximation der asymtotischen Entwicklungen.
- Hat W ein negatives Vorzeichen, stellt sich ein „Trapping and Cascading"-Muster ein. Auf Parameterintervallen der Länge $O(\sqrt{\lambda})$ verweilen die Eigenwertzweige in einer Umgebung der Eigenwerte von H_S und formen Plateaus aus. Einem Plateau folgt jeweils ein relativ kleines Parameterintervall, auf dem die Eigenwertzweige simultan von einem Plateau zum nächsten tiefergelegenen Plateau wechseln. Das Spektrum von $H(\lambda)$ ist für diese Parameter insgesamt in Bewegung und formt eine Kaskade.
- Bei wechselndem Vorzeichen von W überlagern sich beide Bilder.

Ein Teilaspekt der letzten beiden Punkte ist, daß sich für einen „typischen" Parameter das Spektrum von $H(\lambda)$ in einer Umgebung der Eigenwerte des Operators H_S befindet. Nach [GGH$^+$88] ist dieser „Pinning"-Effekt ein experimentell beobachteter Effekt in der Halbleiter-Physik (für Referenzen auf die Physik-Literatur siehe [GGH$^+$88]).

Wegen des Satzes von Picard-Lindelöf haben die Eigenwerte von $H(\lambda)$ für $\nu = 1$ die Vielfachheit 1, und die Eigenwertzweige können sich nicht überschneiden. Zusammen mit dem „Trapping and Cascading"-Muster läßt sich die Analyse der Eigenwertzweige noch verfeinern.

Die Kenntnis des asymptotischen Verlaufs der Eigenwertzweige vermittelt ein tiefes Verständnis des mathematischen Modells und damit der quantenmechanischen Natur von Kristallen.
Die mathematische Deutung des „Pinning"-Effekts aus der Halbleiterphysik ist ein Hinweis darauf.

Ergebnisse

Neben der physikalischen Motivation ist die Analyse von Eigenwertzweigen in einer Spektrallücke des wesentlichen Spektrums ebenfalls eine mathematisch interessante Aufgabe, denn einige Standardargumente bzw. –vorgehensweisen sind

nicht anwendbar.
Die Übertragung der anhand von eindimensionalen Modellproblemen gewonnenen Einsichten auf rotationsymmetrische Schrödinger-Operatoren im $\mathbb{R}^\nu$ ist nicht möglich, denn es gibt nach [HHK87, Wei87, HHHK91] keine dergleichen Schrödinger-Operatoren mit Lücken im wesentlichen Spektrum. Die Komplexität einer mehrdimensionalen Liouville-Green-Approximation macht die Hoffnung zunichte, zumindest Beweisschritte übernehmen zu können.
Sucht man sein Heil in der Abstraktion, so findet man, daß unter funktionalanalytischen Gesichtspunkten die Problemstellung ebenfalls singulär ist.
Weil sich im allgemeinen ober– und unterhalb der Spektrallücke von H wesentliches Spektrum befindet, ist das Minmaxprinzip ([RS78]) nicht anwendbar. Lassen wir Störpotentiale mit wechselnden Vorzeichen zu, gibt es im allgemeinen keinen Grenzoperator, durch dessen Eigenwerte das Spektrum von $H(\lambda)$ im Grenzwert $\lambda \to \infty$ beschrieben wird. Selbst im Fall einer Potentialbarriere $W \geq 0$ wird von singulärer Störungstheorie gesprochen. In diesem Fall ist zwar durch einen geeigneten Schrödinger-Operator H_S mit Dirichlet-Randdaten auf — grob gesprochen — dem Träger der Barriere (siehe [HZ88]) ein Grenzoperator gegeben, doch entzieht sich dieses Problem einer Anwendung der asymptotischen Störungstheorie à la Hunziker und Pillet [Hun89, HP83], weil die zweite Resolventengleichung resp. die Raleigh-Schrödinger-Reihe wegen der Dirichlet– und der Trägerbedingung nicht anwendbar sind.

Betrachtet man vor dem Hintergrund der obigen Einschränkungen die Rechnungen in [GGH$^+$88], so sieht man, daß die Autoren zwar zu ihren Ergebnissen durch eine asymptotische Analyse der Anschlußbedingungen der Eigenfunktionen gekommen sind, daß sich aber Einzelaspekte aus der Struktur der Eigenwertgleichung und der Gestalt des Störpotentials ableiten lassen.
Angesichts der weit entwickelten Theorie der elliptischen Differentialgleichungen bzw. der Theorie der Schrödinger-Operatoren finden wir hier einen Ansatzpunkt. Versteht man die Teilaspekte besser, kann man schließlich einfach zusammengesetzte Modellprobleme für $\nu \geq 2$ konstruieren.

Ein entscheidender Unterschied zu der eindimensionalen Situation ist der, daß die Eigenwerte sehr wohl Vielfachheiten größer als 1 haben können, mit dem Effekt, daß sich Eigenwertzweige überschneiden und überlagern können. Gerade Konfigurationen mit hoher Symmetrie, die sich in der Regel leichter analysieren lassen, implizieren im allgemeinen auch hohe Vielfachheiten der Eigenwerte.
Als Ersatz für den Satz von Picard-Lindelöf im Eindimensionalen zeigen wir in den Theoremen 4.1 und 4.2, daß wir eine bestehende Degenerierung von Eigenwerten resp. Eigenwertzweigen durch eine weitere Modifikation von V resp. W aufheben können. Wir haben dabei die Möglichkeit die Größe und Position des

Trägers dieser weiteren Störung festzulegen. Die Potentiale, mit denen dieses möglich ist, bilden eine residuale Teilmenge eines geeigneten Banachraums.

Quantenmechanische Teilchen können – im Gegensatz zu klassischen Teilchen – in Potentialbarrieren eindringen. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines solchen Teilchens im klassisch verbotenen Bereich hängt von der Höhe der Barriere ab und konvergiert gegen Null, wenn die Barrierenhöhe gegen Unendlich divergiert. Im Grenzwert werden die quantenmechanischen Teilchen aus der Barriere vertrieben, und es stellen sich klassische Bedingungen ein. Die Unterdrückung des Tunneleffekts wird in der semiklassischen Analysis von Schrödinger-Operatoren ausgenutzt.
Die Überlagerung der beiden Bilder für Brunnen und Barriere im Fall eines Störpotentials mit gemischten Vorzeichen in [GGH$^+$88] läßt sich als ein Ergebnis des unterdrückten Tunneleffekts deuten.
Wir beschreiben in Theorem 3.12 wie sich die Unterdrückung des Tunneleffekts in unserer Situation ausnutzen läßt. Die auftretenden spektralen Größen sind bis auf exponentiell kleine Fehler durch Größen eines Systems gegeben, daß auf einer Teilmenge des Trägers der Barriere Dirichlet-Bedingungen erfüllt.
Unter geeigneten Voraussetzungen an das Störpotential wird das Spektrum von $H(\lambda)$ asymptotisch durch vollständig entkoppelte Schrödinger-Operatoren beschrieben, die etwas Restbarriere und u.U. einen Potentialbrunnen besitzen. Das Spektrum des entkoppelten Systems ist die Überlagerung der Spektren der Einzelsysteme.

Während Eigenfunktionen im Innern der Barriere auf Mengen, die einen gewissen Sicherheitsabstand zum Rand des Barrierenträgers einhalten, praktisch verschwinden, beeinflußt deren Verhalten am Rande der Potentialbarriere maßgeblich den Verlauf der zugehörigen Eigenwerte in Abhängigkeit von λ.
Eine entsprechende Modellrechnung findet sich für $\nu = 1$ in [AH82]. Unter der Voraussetzung, daß die Potentialbarriere für ein $p \geq 0$ wie das Polynom x^p in 0 am Rande ihres Trägers verschwindet, finden die Autoren eine asymptotische Puisieux-Reihe in $\lambda^{-1/(p+2)}$ für die Eigenwertzweige bei $\lambda = \infty$.
Unter der Voraussetzung, daß die Potentialbarriere am Rande ihres Trägers wie $\operatorname{dist}(\,\cdot\,, \mathbb{R}^\nu \setminus \operatorname{supp} W)^p$ verschwindet, bestätigen wir in Theorem 5.14 die Entwicklung aus der eindimensionalen Modellrechnung bis zur ersten Ordnung.

Mit Hilfe der gleichen Idee zeigen wir, daß im Fall des Potentialbrunnens die Energieniveaus eines geeigneten Schrödinger-Operators H_S mit Dirichlet-Randdaten auf dem Träger S des Brunnens attraktiv für die Eigenwerte von $H(\lambda)$ sind (Theorem 5.15). Attraktiv heißt, daß sich für einen „typischen" Kopplungsparameter Spektrum in der Nähe dieser Eigenwerte befinden muß. Diese Beobachtung ist verträglich mit der, durch eine Asymptotik vom Weyl-Typ gegebenen, Anzahl von Eigenwertzweigen in der Lücke, so daß wir im allgemeinen nicht wie [GGH+88] von der Ausbildung von Plateaus ausgehen können. Wir bestätigen in einem schwachen Sinne das Auftreten eines „Pinning“-Effekts.

Anhand der Modelle Beispiel 3.13 und Beispiel 3.14 studieren wir das Zusammenspiel von Brunnen und Barriere. In beiden Beispielen handelt es sich um rotationssymmetrische Störpotentiale. Es wird jeweils ein Potentialbrunnen durch eine Potentialbarriere umschlossen.
Während die Potentialbarriere für ein Einfangen („Trapping“) von Eigenwertzweigen zuständig ist, können sich absteigende Eigenwertzweige nur in einer Umgebung von Eigenwerten eines Vergleichsproblems mit dem Potentialbrunnen befinden. Wir zeigen abstrakt, daß die Eigenwertzweige dieser Vergleichsprobleme entweder absteigen oder daß die Spektrallücke frei von Eigenwerten ist (Lemma 6.1).
Beide Modelle sind Kandidaten für „Trapping and Cascading“ in höheren Raumdimensionen. Wir stellen in den Abschnitten 6.2 und 6.3 fest, daß die Modelle unterschiedliche Qualitäten haben.
Im Fall von Beispiel 3.14 bilden die absteigenden Eigenwertzweige Cluster mit in λ steigender Vielfachheit. Auf Parameterintervallen der Ordnung $O(1)$ passieren diese Cluster die Spektrallücke (a,b). Die Abstände zwischen diesen Intervallen wachsen mindestens wie $\sqrt{\lambda}$ und wir erhalten ein „Trapping and Cascading“-Muster. Für große Kopplungen kann man die Eigenwertzweige nur schwer auseinanderhalten und eine detailliertere Beschreibung des Verhaltens der Zweige wie in [GGH+88] ist erschwert.
Im Fall des Beispiel 3.13 lassen sich die Eigenwertzweige des Vergleichsproblems mit der Potentialbarriere verschiedenen, unabhängigen Drehimpulsräumen zuordnen. Das Verhalten eines einzelnen Eigenwertzweiges läßt sich durch das Vergleichsproblem fast explizit bestimmen. Die Unabhängigkeit der Drehimpulsräume sorgt aber anscheinend dafür, daß sich nicht deutlich Plateaus und Bereiche, in denen das Spektrum simultan in Bewegung ist, herausbilden.

Organisation der Arbeit

Die obige allgemeine Darstellung unserer Ergebnisse deutet bereits die Struktur der vorliegenden Arbeit an.

Wir beginnen mit einem einführenden Kapitel 2. Dort legen wir die Grundlagen für die weitere Arbeit, definieren Schrödinger-Operatoren mit und ohne Dirichletbedingungen und erinnern in diesem Zusammenhang an einige hilfreiche Sätze.

Wir nutzen dieses Kapitel, um die Stabilität des wesentlichen Spektrums unter Gebietsstörungen und H-kompakten Potential-Störungen zu beweisen (Korollar 2.7). Die Hauptidee besteht darin, daß auf einem Kompaktum lokalisierte Störungen H-kompakt sind. Wir schließen das Kapitel 2 mit einer Aussage über die Stabilität des diskreten Spektrums unter kleinen Gebietsstörungen (Korollar 2.16), die in Kapitel 5 eine Anwedung findet.

In Kapitel 3 studieren wir die Unterdrückung des Tunneleffekts im Kopplungsgrenzwert λ gegen ∞. Theorem 3.12 ist das Hauptergebnis dieses Abschnitts. Es besagt, daß sich in einem schwachen Sinne Dirichlet-Randwerte auf dem Barrierenträger einstellen, und daß sich die spektralen Größen des Operators $H(\lambda)$ nur um exponentiell kleine Fehler von denen geeigneter Vergleichsoperatoren unterscheiden.

Das Kapitel 4 ist dem Beweis eines parametrischen Transversalitätssatzes gewidmet.
Der Hauptgedanke der Transversalitätstheorie ist, daß transversales Schneiden von hinreichend glatten Funktionen stabil in einer geeigneten Topologie ist, und daß sich nichttransversales Schneiden durch eine kleine Störung aufheben läßt.
Betrachten wir die Gleichung 1.1 in Abhängigkeit vom Parameter W, so können wir die Frage nach der Einfachheit der Lösungen auf eine Frage zurückführen, die sich mit dem Transversalitätssatz 4.16 beantworten läßt. Wir haben die Haupttheoreme 4.1 und 4.2 dem Kapitel vorangestellt.

Ausgehend von der Liouville-Green-Approximation und dem exponentiellen Lokalisieren von Eigenfunktionen in der Potentialbarriere entwickeln wir in Kapitel 5 einen Ansatz, um aus Eigenfunktionen eines Schrödinger-Operators mit Dirichlet-Randdaten im Innern der Barriere approximative Eigenfunktionen zu bestimmen.
Der Leitgedanke ist, daß für große Kopplungen in der Nähe des Randes der Barriere der Anteil des Schrödinger-Operators $-\Delta + \lambda W$ in Normalenrichtung das Verhalten der Eigenfunktionen bestimmt. Weil sich in einem gewissen Sinne Dirichlet-Bedingungen einstellen, erscheint es sinnvoll, mit speziellen Funktionen die Eigenfunktionen geeigneter Dirichlet-Schrödinger-Operatoren in die Barriere zu extrapolieren.
Satz 5.8 faßt das Ergebnis unserer Bemühungen zusammen. In den Abschnitten 5.2.1 und 5.2.2 extrapolieren wir je nach Problemstellung mit geeigneten speziellen Funktionen. Zu unserer Überraschung läßt sich die für die Barriere entwickelte Methode auf den Brunnenfall übertragen. Die Hauptresultate sind die Theoreme 5.14 und 5.15.

Wir zeigen in Lemma 6.1, daß unter den Bedingungen der Beispiele 3.13 und

3.14 das Vergleichsproblem mit dem Potentialtopf für große Kopplungen keine aufsteigende Eigenwertzweige besitzen kann.
Mit einer Diskussion der beiden Beispiele schließen wir die Arbeit.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen danken, die mich während meiner Promotionsarbeit unterstützt haben.
Danken möchte ich Herrn Prof. Dr. Jürgen Voigt für die Förderung, die er mir im Anschluß an mein Diplom angedeihen ließ.
Zu besonderem Dank bin ich meinem Mentor Herrn Prof. Dr. Rainer Hempel verpflichtet, der sich immer Zeit für ein Gespräch genommen hat und niemals um einen fachlichen Rat verlegen war.

2 Hilfsmittel und Bezeichnungen

In diesem Kapitel wollen wir einige wichtige Hilfsmittel und Begriffe zusammenstellen, die wir in der folgenden Argumentation benötigen. Als Nebeneffekt werden wir unsere Notation fixieren und den Rahmen abstecken, in dem wir uns bewegen werden. Für alle vorkommenden Begriffe aus der Theorie der Sobolevräume und selbstadjungierten Operatoren verweisen wir auf [Ada75, EE89, GT77, RS80, RS78].

2.1 Bezeichnungen

Mit $K(x_0,r) \subset \mathbb{R}^\nu$ werde die offene Kugel um x_0 mit Radius $r > 0$ bezeichnet. Wir schreiben $B(x_0,r)$ für die abgeschlossene Kugel $\overline{K(x_0,r)}$. Ist $x_0 = 0$ bzw. $r = 1$ verkürzen wir die Notation zu B für $\overline{K(0,1)}$ bzw. rB für $\overline{K(0,r)}$. Die Buchstaben S, M und $K \subset \mathbb{R}^\nu$ stehen für abgeschlossene Mengen, Ω steht für eine offene Menge des $\mathbb{R}^\nu$. Mit K bezeichnete Mengen sind gleichzeitig kompakte Teilmengen des Grundraumes. Die charakteristische Funktion einer Menge M heißt χ_M.
Die Funktionenräume $C^{k,\alpha}$, C^∞, C_c^∞, L_2 und L_∞ seien in der üblichen Weise definiert.
Die Menge aller beschränkten Funktionen mit kompaktem Träger bezeichnen wir mit $L_{\infty,c}$ und den Abschluß von $L_{\infty,c}$ in L_∞ mit $L_{\infty,0}$.
Wir wollen mit $\mathscr{H}^k(\Omega)$ den Sobolevraum der Funktionen aus $L_2(\Omega)$ bezeichnen, deren distributionelle Ableitungen bis zur Ordnung $k \in \mathbb{N}$ ebenfalls in $L_2(\Omega)$ liegen. Der lineare Raum aller meßbaren Funktionen u, so daß für alle $\varphi \in C_c^\infty(\Omega)$ die Funktion φu in $\mathscr{H}^k(\Omega)$ liegen, bezeichnen wir mit $\mathscr{H}^k_{\mathrm{loc}}(\Omega)$. Ist $\Omega = \mathbb{R}^\nu$ schreiben wir kurz $\mathscr{H}^k$ bzw. $\mathscr{H}^k_{\mathrm{loc}}$.
Mit $\mathring{\mathscr{H}}^k(\Omega)$ werde der Abschluß von $C_c^\infty(\Omega)$ in $\mathscr{H}^k$ bezeichnet. Es gilt $\mathring{\mathscr{H}}^k(\mathbb{R}^\nu) = \mathscr{H}^k$.

Sofern nicht explizit etwas anderes vorausgesetzt wird, sind Funktionen u, v, w, h aus L_2, mit V, W bezeichnen wir reellwertige meßbare Funktionen und die griechischen Buchstaben φ, η bzw. ψ sind für unendlich oft differenzierbare Funktionen reserviert.
Positiv– und Negativteil der reellwertigen Funktion W sind durch

$$W_+ = \tfrac{1}{2}(W + |W|), \quad W_- = -\tfrac{1}{2}(W - |W|).$$

definiert.
Wir werden durchgängig $0 \le V \in L_\infty$ voraussetzen. Es gelte immer $W_- \in L_\infty$ und

$W_+ \in L_{\infty,\text{loc}}$. An verschiedenen Stellen werden wir $W \in L_{\infty,c}$ bzw. $W \in L_{\infty,0}$ annehmen.

Für φ, η und ψ gelte zusätzlich $\operatorname{supp}\varphi$, $\operatorname{supp}\eta \subset \mathbb{R}^\nu$ kompakt, und daß die Funktionen η, ψ eine Partition der Eins bilden, d.h.

$$0 \le \eta, \psi \le 1, \quad 1 = \eta + \psi.$$

Es sei A ein selbstadjungierter Operator in einem Hilbertraum. Die Resolventenmenge von A ist die Menge

$$\rho(A) = \{z \in \mathbb{C}; A - z \text{ besitzt eine beschränkte Inverse}\}.$$

Das Spektrum $\sigma(A)$ von A ist das Komplement $\mathbb{C} \setminus \rho(A)$. Die Menge $\sigma_d(A)$ aller isolierten Eigenwerte endlicher Vielfachheit heißt diskretes Spektrum und $\sigma_e(A) = \sigma(A) \setminus \sigma_d(A)$ ist das wesentliche Spektrum von A.
Für $J \subset \mathbb{R}$ Borel-meßbar sei $P_J(A)$ die zu A gehörende Spektralprojektion auf J. Liegt der Definitionsbereich $D(A)$ von A nicht dicht im Hilbertraum so betrachten wir A als Operator im Abschluß seines Definitionsbereichs. Die durch den Nulloperator auf dem Komplement fortgesetzte Resolvente bezeichnen wir wieder mit $(A-z)^{-1}$. Entsprechend beziehen sich $\rho(A)$, $\sigma(A)$, $\sigma_d(A)$, $\sigma_e(A)$ und $P_J(A)$ auf A als Operator in $\overline{D(A)}$.

Das folgende Lemma wird sich als hilfreich erweisen, um das Spektrum näherungsweise zu bestimmen.

Lemma 2.1 *Sei A ein selbstadjungierter Operator in einem Hilbertraum. Seien $u \in D(A)$, $E \in \mathbb{R}$ und $\delta > 0$ mit*

$$\|(A-E)u\| < \delta\|u\|.$$

Dann gilt

$$\sigma(A) \cap (E-\delta, E+\delta) \neq \emptyset.$$

(Beweis siehe [HS96, Thm. 5.9].)

2.2 Eigenlösungen

Unter unseren Voraussetzungen an V und W können wir die formalen Schrödinger-Operatoren

$$L = -\Delta + V, \quad L(\lambda) = L + \lambda W$$

als Abbildung vom Raum der lokal integrierbaren Funktionen $L_{1,\mathrm{loc}}$ in den Raum der Distributionen auffassen.

In den folgenden Kapiteln werden wir unsere Aufmerksamkeit auf Lösungen der Gleichung $(L(\lambda)-E)u=0$ richten. Wir wollen für Lösungen dieser Gleichung in L_2 eine Sprech– und Schreibweise vereinbaren.

Definition 2.2 Seien $\Omega\subset\mathbb{R}^\nu$ offen, $E\in\mathbb{C}$ und $\lambda\in\mathbb{R}$. Eine Funktion $u\in\mathscr{H}^1(\Omega)$ mit $(L(\lambda)-E)u=0$ heißt *Eigenlösung (zum Eigenwert E und zur Kopplung λ) auf Ω.*
Es bezeichne $\mathscr{E}ig(E,\lambda,\Omega)$ die Menge aller Eigenlösungen auf Ω. Für $S\subset\mathbb{R}^\nu$ abgeschlossen setzen wir

$$\mathscr{E}ig(E,\lambda,S)=\bigcup\{\mathscr{E}ig(E,\lambda,\Omega);\,S\subset\Omega=\mathring{\Omega}\}.$$

Die Bedingung $u\in\mathscr{H}^1(\Omega)$ rührt daher, daß wir Aussagen über Eigenlösungen auf Eigenelemente bzw. Eigenfunktionen verschiedener selbstadjungierter Realisierungen von $L(\lambda)$ anwenden möchten.
Aufgrund der elliptischen Regularität [GT77, Thm. 8.8] gilt sogar

$$\mathscr{E}ig(E,\lambda,\Omega)\subset\mathscr{H}^2_{\mathrm{loc}}(\Omega). \tag{2.1}$$

Wir werden hier nicht den entsprechenden Satz über lokale elliptische Regularität zitieren, sondern eine stärkere Aussage wiedergeben, die wir in Kapitel 5 benötigen.

Satz 2.3 (Globale elliptische Regularität) *Seien $\Omega\subset\mathbb{R}^\nu$ offen und beschränkt, $V\in L_\infty$, $h\in L_2$ und $u\in\mathring{\mathscr{H}}^1(\Omega)$ eine distributionelle Lösung von $Lu=h$ auf Ω.*

Es sei $k\in\mathbb{N}_0$ und es gelte zusätzlich

1. *$V\in C^{k-1,1}$, falls $k>0$;*
2. *$\partial\Omega$ ist eine C^{k+2}-Mannigfaltigkeit;*
3. *$h\in\mathscr{H}^k(\Omega)$.*

Dann ist $u\in\mathscr{H}^{k+2}(\Omega)$ und es existiert eine Konstante $C\geq 0$ mit

$$\|u\|_{2,k+2}\leq C\left(\|u\|_2+\|h\|_{2,k}\right).$$

Die Konstante C hängt nur von der Raumdimension und oberen Schranken für die Normen des Potentials V und Normen der Karten einer Parametrisierung von $\partial\Omega$ ab.

Der obige Satz ist im wesentlichen ein Spezialfall von [GT77, Thm. 8.13]. Im Beweis von [GT77, Thm. 8.13] wird nur von dem Sachverhalt Gebrauch gemacht, daß die entsprechenden Abbildungen und ihre Ableitungen durch ihre Supremumsnorm abgeschätzt werden können. Im Anwendungsfall von Kapitel 5 werden wir diese Beobachtung benutzen, um die Konstante C gleichmäßig für eine Familie von Potentialen zu wählen.

Wir demonstrieren kurz die Anwendung von Satz 2.3 auf Eigenwertprobleme und leiten die Aussage (2.1) aus 2.3 her.
Seien $u \in \mathscr{E}ig(E,\lambda,\Omega)$ und $K(x_0,r) \subset \Omega$. Wir wählen eine Abschneidefunktion $\eta \in C_c^\infty(K(x_0,r))$. Es gilt offenbar $\eta u \in \mathring{\mathscr{H}}^1(\Omega)$ und

$$\begin{aligned} (L(\lambda)-E)\eta u &= \eta(L(\lambda)-E)u - 2\nabla\eta\cdot\nabla u - (\Delta\eta)u \\ &= -2\nabla\eta\cdot\nabla u - (\Delta\eta)u \\ &= -[\Delta,\eta]\,u, \end{aligned}$$

wobei $[\Delta,\eta] = (\Delta\eta - \eta\Delta)$ der Kommutator der Operatoren Δ, η auf dem Raum der Distributionen ist.
Aus Satz 2.3 können wir $\eta u \in \mathscr{H}^2(K(x_0,r))$ und die Existenz eines $C_\eta \geq 0$ folgern mit

$$\|\eta u\|_{2,2} \leq C_\eta \|u\|_{2,1}. \tag{2.2}$$

Mit Hilfe einer geeigneten Partition der Eins können wir von (2.2) auf (2.1) schließen.

Neben der elliptischen Regularität gibt es eine weitere wichtige Eigenschaft von $L(\lambda)$, die wir in Kapitel 4 und 5 ausnützen werden:

> Ist eine Eigenlösung in der Umgebung eines Punktes bekannt, so läßt sie sich nur in eindeutiger Weise fortsetzen.

Wir wollen dies in dem folgenden Satz genauer fassen:

Satz 2.4 (Eindeutige Fortsetzbarkeit) *Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^\nu$ offen und zusammenhängend. Zu der Eigenlösung $u \in \mathscr{E}ig(E,\lambda,\Omega)$ gebe es einen Punkt $x_0 \in \Omega$ und eine offene Umgebung $U \subset \Omega$ von x_0 mit $u \equiv 0$ auf U. Dann gilt bereits $u \equiv 0$ auf Ω.*

Beweis siehe [RS78, Thm. XIII.63, Probl. 111, 112].

2.3 Spektrum von Schrödinger-Operatoren

Im Folgenden werden wir das Spektrum verschiedener selbstadjungierter Realisierungen von L und $L(\lambda)$ in L_2 betrachten.

Es sei $S \subset \mathbb{R}^\nu$ abgeschlossen und wir definieren H_S und $H_S(\lambda)$ als Friedrichsfortsetzung von L bzw. $L(\lambda)$ auf $C_c^\infty(\mathbb{R}^\nu \setminus S)$, d.h. als darstellende Operatoren der Abschließungen der halbbeschränkten Formen

$$\begin{aligned} h_S[\varphi] &= \langle L\varphi\,,\,\varphi\rangle = \int |\nabla\varphi|^2 + V|\varphi|^2\,dx, \\ h_S(\lambda)[\varphi] &= \langle L(\lambda)\varphi\,,\,\varphi\rangle \\ &= \int |\nabla\varphi|^2 + V|\varphi|^2\,dx + \lambda\int W|\varphi|^2\,dx \quad (\varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^\nu \setminus S)). \end{aligned}$$

Einen Beweis des Formdarstellungssatzes kann man in [Kat95] finden.

Die Definitionsbereiche der Abschließungen von h_S bzw. $h_S(\lambda)$ liegen im Sobolevraum $\mathscr{H}_S^1 = \mathring{\mathscr{H}}^1(\mathbb{R}^\nu \setminus S)$. Die Funktionen aus dem Definitionsbereich erfüllen also in einem schwachen Sinne Dirichlet-Randdaten 0 auf dem Rande von S, so daß wir H_S, $H_S(\lambda)$ als Schrödinger-Operatoren mit Dirichlet-Randdaten auf S deuten können.
Wir setzen $H = H_\emptyset$ und $H(\lambda) = H_\emptyset(\lambda)$. Der Operator H stimmt dann mit dem Graphenabschluß von $L\big|_{C_c^\infty}$ überein.

Unser Interesse gilt dem Spektrum der Operatoren $H(\lambda)$ in einer Lücke des wesentlichen Spektrums von H. Statt hinreichende Bedingungen an V zu formulieren, die die Existenz einer solchen Spektrallücke sichern, werden wir im Weiteren voraussetzen:

Voraussetzung 2.5 Es seien $0 \le V \in L_\infty$ reellwertig und a, $b \in \mathbb{R}$ mit $a < b$, mit der Eigenschaft:

$$[a,b] \cap \sigma(H) = \emptyset, \quad \inf \sigma_e(H) < a.$$

2.3.1 Störung des wesentlichen Spektrums

Genauer werden wir für große λ das diskrete Spektrum von $H(\lambda)$ in (a,b) mit dem von Operatoren $H_S(\lambda)$ vergleichen. Wir brauchen also hinreichende Bedingungen, unter denen (a,b) frei von wesentlichem Spektrum ist.
Zum Beispiel ist dies gewährleistet, wenn das wesentliche Spektrum stabil unter der Störung W bzw. S ist, oder wenn das Intervall (a,b) für hinreichend große λ unterhalb des wesentlichen Spektrums liegt.

Wenden wir uns zunächst der angesprochenen Stabilität des wesentlichen Spektrums zu. Nach dem Weylschen Theorem [RS78, Thm. XIII.14] ist das wesentliche Spektrum zweier selbstadjungierter Operatoren gleich, wenn die Differenz ihrer Resolventen in einem gemeinsamen Punkt der Resolventenmengen ein kompakter Operator ist. In dem folgenden Lemma halten wir zwei hinreichende Bedingungen für die Kompaktheit der Resolventendifferenz fest.

Lemma 2.6 *Seien $0 \le V \in L_\infty$, $W_- \in L_\infty$, $W_+ \in L_{\infty,loc}$ reellwertig, $S \subset \mathbb{R}^\nu$ abgeschlossen und $\lambda \ge 0$.*

1. *Ist $S \subset \mathbb{R}^\nu$ kompakt, so ist für alle $z \in \rho(H(\lambda)) \cap \rho(H_S(\lambda))$*

$$(H(\lambda)-z)^{-1} - (H_S(\lambda)-z)^{-1} \text{ kompakt;}$$

2. *Ist $W \in L_{\infty,0}$, so ist für alle $z \in \rho(H_S) \cap \rho(H_S(\lambda))$*

$$(H_S-z)^{-1} - (H_S(\lambda)-z)^{-1} \text{ kompakt.}$$

Beweis Wir beweisen nur den Fall $S \subset \mathbb{R}^\nu$ kompakt und $\lambda = 0$. Für positives λ bzw. $W \in L_{\infty,c}$ ist die Argumentation ganz analog.
Für Potentiale $W \in L_{\infty,0}$ aus dem Abschluß von $L_{\infty,c}$ in L_∞ ist dann die Resolventendifferenz Grenzwert von kompakten Operatoren in der Operatorennorm und damit kompakt.

Unsere Annahme $V \ge 0$ impliziert $H, H_S \ge 0$ und somit $\sigma(H), \sigma(H_S) \subset [0,\infty)$.
Sei zunächst $z = -1$. Weiter sei $r > 0$ mit $S \subset rB$. Wir wählen Abschneidefunktionen $\eta \in C_c^\infty$ und $\psi \in C^\infty$ mit

$$0 \le \eta, \psi \le 1, \quad \eta\big|_{(r+1)B} = 1, \quad \eta\big|_{\mathbb{R}^\nu \setminus (r+2)B} = 0, \quad \eta + \psi = 1.$$

Die Menge $\Omega = [\eta > 0] \subset \mathbb{R}^\nu$ ist offen und beschränkt.
Für $h \in L_2$ und $u = \big((H+1)^{-1} - (H_S+1)^{-1}\big)\, h$ gilt auf $\mathbb{R}^\nu \backslash S$:

$$\begin{aligned}
(L+1)u &= (L+1)\big((H+1)^{-1} - (H_S+1)^{-1}\big)\, h \\
&= (H+1)(H+1)^{-1}h - (H_S+1)(H_S+1)^{-1})h \\
&= 0
\end{aligned}$$

Wegen der lokalen elliptischen Regularität [GT77] ist also

$$\operatorname{ran}((H+1)^{-1} - (H_S+1)^{-1}) \subset \mathscr{E}ig(-1,0,\mathbb{R}^\nu \backslash S) \subset \mathscr{H}^2_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^\nu \backslash S)$$

und die folgende Abbildung stetig:

$$[\Delta, \psi]\big((H+1)^{-1} - (H_S+1)^{-1}\big) : L_2 \longrightarrow \mathring{\mathscr{H}}^1(\Omega).$$

Nach Definition sind die Operatoren

$$\eta(H+1)^{-1}, \eta(H_S+1)^{-1} : L_2 \longrightarrow \mathring{\mathscr{H}}^1(\Omega)$$

beschränkt.

Aus dem Satz von Rellich-Kondrachov (siehe [Ada75]) folgt, daß die obigen Operatoren als Operatoren in L_2 kompakt sind.
Wegen

$$\begin{aligned}
&\psi\big((H+1)^{-1} - (H_S+1)^{-1}\big) = \\
&\qquad = (H+1)^{-1}(L+1)\psi\big((H+1)^{-1} - (H_S+1)^{-1}\big) \\
&\qquad = -(H+1)^{-1}[\Delta, \psi]\ \big((H+1)^{-1} - (H_S+1)^{-1}\big)
\end{aligned}$$

und der Idealeigenschaft kompakter Operatoren ist

$$\begin{aligned}
&(H+1)^{-1} - (H_S+1)^{-1} = \\
&\quad = \eta(H+1)^{-1} + \psi\big((H+1)^{-1} - (H_S+1)^{-1}\big) - \eta(H_S+1)^{-1}
\end{aligned}$$

eine Summe kompakter Operatoren, und die Behauptung für $z = -1$ bewiesen.

Es sei $A = \sigma(H) \cup \sigma(H_S)$ und $C_0(A)$ die Menge aller stetigen Funktionen auf A, die im Unendlichen verschwinden.
Die Menge

$$\mathscr{F} = \{F \in C_0(A); F(H) - F(H_S) \text{ ist kompakt}\}$$

ist eine abgeschlossene Unteralgebra, die wegen $(t+1)^{-1} \in \mathscr{F}$ die Punkte von A trennt. Nach dem Satz von Stone-Weierstraß gilt dann $\mathscr{F} = C_0(A)$, und aus

$$(t-z)^{-1} \in C_0(A) \quad (z \in \rho(H) \cap \rho(H_S))$$

folgt die Behauptung. □

Korollar 2.7 *Seien* $0 \leq V \in L_\infty$, $W_- \in L_\infty$, $W_+ \in L_{\infty,loc}$ *reellwertig,* $S \subset \mathbb{R}^\nu$ *abgeschlossen.*

1. *Ist* $S \subset \mathbb{R}^\nu$ *kompakt, so gilt für alle* $\lambda \geq 0$*:* $\quad \sigma_e(H(\lambda)) = \sigma_e(H_S(\lambda))$;

2. *Ist* $W \in L_{\infty,0}$*, so gilt für alle* $\lambda \geq 0$*:* $\quad \sigma_e(H_S) = \sigma_e(H_S(\lambda))$.

Wir können ein erstes Korollar über die Abwesenheit des wesentlichem Spektrums von $H_S(\lambda)$ im Beobachtungsintervall (a,b) ableiten.

Korollar 2.8 *Zu* $0 \leq V \in L_\infty$ *gebe es reelle Zahlen* $a, b \in \mathbb{R}$ *mit* $[a,b] \cap \sigma_e(H) = \emptyset$*. Seien* $S \subset \mathbb{R}^\nu$ *abgeschlossen mit kompakten Rand und* $W \in L_{\infty,0}$*. Dann gilt*

$$[a,b] \cap \sigma_e(H_S(\lambda)) = \emptyset \quad (\lambda > 0).$$

Beweis Der Beweis ist eine einfache Fallunterscheidung. Weil ∂S kompakt ist, ist entweder $\mathbb{R}^\nu \setminus S$ kompakt oder S kompakt. Im ersten Fall hat $H_S(\lambda)$ kompakte Resolvente, und das wesentliche Spektrum ist leer. Im zweiten Fall können wir aus Korollar 2.7 die Mengengleichheit

$$\sigma_e(H_S(\lambda)) = \sigma_e(H_S) = \sigma_e(H)$$

folgern. Nach Vorausetzung ist damit der Schnitt von $[a,b]$ mit $\sigma_e(H_S(\lambda))$ leer. □

Im vorherigen Korollar verschwindet W im Unendlichen. Im nächsten Lemma lassen wir $\liminf_{|x|\to\infty} W(x) > 0$ zu.

Proposition 2.9 *Seien* $0 \leq V \in L_\infty$, $S \subset \mathbb{R}^\nu$ *abgeschlossen und* $W \in L_{\infty,loc}$*. Existiert ein* $c > 0$ *mit* $(W-c)_- \in L_{\infty,c}$*, dann gilt für alle* $b \in \mathbb{R}$ *und* $\lambda > \frac{b}{c}$

$$(-\infty, b] \cap \sigma_e(H_S(\lambda)) = \emptyset.$$

Beweis Wir können ohne Einschränkungen annehmen, daß $\sigma_e(H_S(\lambda)) \neq \emptyset$ ist. Machen wir für diesen Beweis die Abhängigkeit des Operators $H_S(\lambda)$ von W explizit, so gilt mit $(W-c)_- \in L_{\infty,c}$ und Korollar 2.7

$$\sigma_e(H_S(\lambda;W)) = \sigma_e(H_S(\lambda;W-c)) + \lambda c = \sigma_e(H_S(\lambda;(W-c)_+)) + \lambda c.$$

Aus $0 \leq V + \lambda(W-c)_+$ folgt für $\frac{b}{c} < \lambda$ die Ungleichung

$$b < c\lambda \leq \inf \sigma_e(H_S(\lambda;W)).$$

□

Wir fassen unsere Überlegungen zu einem Satz zusammen.

Satz 2.10 *Seien $0 \leq V \in L_\infty$ und a, $b \in \mathbb{R}$ mit $[a,b] \cap \sigma_e(H) = \emptyset$. Weiter seien $S \subset \mathbb{R}^\nu$ abgeschlossen und $W_- \in L_\infty$, $W_+ \in L_{\infty,loc}$ reellwertig.*
Dann folgt

1. *falls ein $c > 0$ existiert mit $(W-c)_- \in L_{\infty,c}$ und $\frac{b}{c} < \lambda$ ist, oder*
2. *falls $W \in L_{\infty,0}$, der Rand von S kompakt und $0 < \lambda$ ist,*

die Gleichheit

$$[a,b] \cap \sigma_e(H_S(\lambda)) = \emptyset.$$

2.3.2 Analytische Störungen

Ist $W \in L_\infty$, so ist $D(H_S(\lambda)) = D(H_S)$ und die Familie $\left(H_S(\lambda)\right)$ eine selbstadjungierte analytische Familie vom Typ (A) im Sinne von Kato. Wir können damit die reguläre Störungstheorie auf isolierte Eigenwerte endlicher Vielfachheit anwenden.
Wir wollen nur zwei wichtige Aussagen aus dieser Theorie herausgreifen und verweisen deshalb auf [HS96, Kat95, RS78].

Der folgende Satz ist eine Folgerung aus [HS96, Thm. 15.11], [RS78, Thm. XII.12] und [Kat95, II.6.2]. Die Formulierung ist [Hem87, Thm. 3.2] entlehnt.

Lemma 2.11 *Seien $0 \leq V \in L_\infty$, $W \in L_\infty$ reellwertig und $S \subset \mathbb{R}^\nu$ abgeschlossen. Für $\lambda_0 > 0$ sei E_0 ein diskreter Eigenwert von $H_S(\lambda_0)$ mit Vielfachheit m. Dann existiert in einer Umgebung von λ_0 eine Familie $(E_i(\lambda))_{i=1}^m$ von nicht notwendig verschiedenen Funktionen und ein zugehöriges Orthonormalsystem von Eigenfunktionen $(u_i(\lambda))_{i=1}^m \subset D(H_S)$ mit den folgenden Eigenschaften:*

1. *Es ist $E_i(\lambda_0) = E_0$ für alle $i = 1, \dots, m$. Für λ nahe λ_0 sind $E_1(\lambda), \dots, E_m(\lambda)$ die einzigen Eigenwerte von $H_S(\lambda)$ nahe bei E_0, wobei Eigenwerte entsprechend ihrer spektralen Vielfachheit mehrfach gezählt werden;*

2. *Die Eigenfunktionen $u_i(\lambda)$ von $H_S(\lambda)$ zu den Eigenwerten $E_i(\lambda)$ lassen sich in einer Umgebung von λ_0 holomorph in die komplexe Zahlenebene fortsetzen;*

3. *Der i-te Eigenwertzweig E_i ist nahe λ_0 reell-analytisch und läßt sich analytisch fortsetzen, solange $E_i(\lambda)$ zu $\sigma_e(H_S(\lambda))$ positiven Abstand hat. Die Werte $E_i(\lambda)$ der Fortsetzung sind wieder diskrete Eigenwerte von $H_S(\lambda)$.*

Ist nun $[a,b] \cap \sigma(H_S) = \emptyset$ und $W \in L_{\infty,0}$, so können wegen Satz 2.7 in der Spektrallücke (a,b) von H_S nur diskrete Eigenwerte von $H_S(\lambda)$ liegen. Aufgrund des vorherigen Satzes sind all diese Werte in (a,b) Funktionswerte reell-analytischer Funktionen. Zeichnet man das Spektrum $\sigma_d(H_S(\lambda))$ in (a,b) in Abhängigkeit von λ, so kann man die Menge als Vereinigung von Funktionsgraphen darstellen, die in den durch a und b begrenzten Streifen eintreten, um darin gefangen zu werden oder ihn nach einer Weile wieder zu verlassen.

Die Steigung eines einzelnen Eigenwertzweiges läßt sich mit Hilfe des Feynman-Hellmann-Theorems berechnen [Kat95, VII.3.4, II.6.5].

Proposition 2.12 *Seien $0 \leq V \in L_\infty$, $W \in L_\infty$ reell und $S \subset \mathbb{R}^\nu$ abgeschlossen. Für $\lambda_0 > 0$ sei $E_0 \in \sigma_d(H_S(\lambda))$ ein diskreter Eigenwert von $H_S(\lambda_0)$ mit Vielfachheit m. Auf einer Umgebung von λ_0 seien weiter die Funktionen $E_1(\lambda), \dots, E_m(\lambda)$ mit zugehörigen orthonormalen Eigenfunktionen $u_1(\lambda), \dots, u_m(\lambda)$ wie im vorherigen Satz gegeben.*
Es gilt

$$E_i'(\lambda_0) = \int W |u_i(\lambda_0)|^2 \, dx, \quad (i = 1, \dots, m)$$

2.3.3 Stetigkeit des diskreten Spektrums unter Gebietsstörungen

Am Ende dieses Kapitels wollen wir uns der Störung des diskreten Spektrums von H_S unter kleinen Variationen der Menge S zuwenden. Klein soll heißen, daß wir S von einem Parameter abhängig machen und die Störung des diskreten Spektrums unter kleiner Variation des Parameters betrachten.
Unter hinreichend starken Voraussetzungen hängen die Eigenwerte analytisch vom Parameter ab (siehe [Kat95, VII.6.5]). Wir stellen aber keine zu restriktiven Voraussetzungen an V und beschreiten einen anderen Weg. Das wesentliche Argument des folgenden Lemmas ist der Satz 4.8 aus [Wei84]. Dieser Satz ist eine Folgerung aus den monotonen Konvergenztheoremen für Formen [RS80].

Lemma 2.13 *Sei $0 \leq V \in L_\infty$. Die Menge $S \subset \mathbb{R}^\nu$ sei kompakt und $\Omega = \mathbb{R}^\nu \setminus S$ erfülle die Segmentbedingung.*
Wir setzen

$$S(\varkappa) = \begin{cases} [\operatorname{dist}(\,\cdot\,,\Omega) \geq \varkappa] & ; \quad \varkappa > 0 \\ S & ; \quad \varkappa = 0 \\ [\operatorname{dist}(\,\cdot\,,S) \leq -\varkappa] & ; \quad \varkappa < 0 \end{cases} .$$

Dann gilt

$$\|(H_{S(\varkappa)} + 1)^{-1} - (H_S + 1)^{-1}\| \longrightarrow 0 \quad (\varkappa \longrightarrow 0)$$

Bemerkungen 2.14

1. Nach Edmunds und Evans [EE89] ist die Segmentbedingung für $\partial\Omega$ äquivalent zu $\partial\Omega \in C$. Insbesondere läßt sich der Rand $\partial\Omega$ lokal als Graph einer stetigen Funktion darstellen und hat damit Lebesgue-Maß Null.

2. Für eine monoton fallende Folge $\varepsilon_n \searrow 0$ gelten die folgenden Gleichungen:

$$\overset{\circ}{S} = \bigcup_{n\in\mathbb{N}} S(\varepsilon_n); \quad \overline{S} = \bigcap_{n\in\mathbb{N}} S(-\varepsilon_n).$$

   Nach 1. ist $\operatorname{vol}(\partial S) = 0$, und die Operatoren können im Normresolventensinne konvergieren.

Beweis von Lemma 2.13
Seien $\varepsilon_0 \geq \varepsilon > 0$. Es sind

$$S(\varepsilon) \subset S \subset S(-\varepsilon) \subset \mathbb{R}^\nu \quad \text{kompakt}.$$

Entsprechend der Mengeninklusionen gilt

$$C_c^\infty(\mathbb{R}^\nu \setminus S(-\varepsilon)) \subset C_c^\infty(\mathbb{R}^\nu \setminus S) \subset C_c^\infty(\mathbb{R}^\nu \setminus S(\varepsilon)),$$

und es folgen die Ungleichungen

$$0 \leq H_{S(-\varepsilon)} \leq H_S \leq H_{S(\varepsilon)}$$

im Formsinne. Nach [RS80, Thm. S.17] gilt damit

$$(H_{S(\varepsilon)}+1)^{-1} \leq (H_S+1)^{-1} \leq (H_{S(-\varepsilon)}+1)^{-1}.$$

Es ist also

$$\begin{aligned} 0 &\leq (H_S+1)^{-1} - (H_{S(-\varepsilon)}+1)^{-1} \leq (H+1)^{-1} - (H_{S(-\varepsilon_0)}+1)^{-1}; \\ 0 &\leq (H_{S(\varepsilon)}+1)^{-1} - (H_S+1)^{-1} \leq (H+1)^{-1} - (H_S+1)^{-1}. \end{aligned}$$

Die Resolventendifferenzen werden nach Lemma 2.6 durch kompakte Operatoren majorisiert, so daß es wegen [Kat95, Thm. VIII-3.5] reicht, die starke Konvergenz der Differenzen gegen 0 zu zeigen.
Nach der obigen Bemerkung folgt aus der Segmentbedingung, daß der Rand $\partial\Omega$ Lebesgue-Maß Null hat. Damit sind alle Voraussetzungen von [Wei84, Satz 4.8] erfüllt, und es folgt die starke Resolventenkonvergenz. □

Nach Lemma 2.13 konvergieren die Operatoren $H_{S(\varkappa)}$ für $\varkappa \to 0$ gegen H_S im Normresolventensinne. Mit einem Stone-Weierstraß-Argument, wie im Beweis des Lemmas 2.6 (vgl. [RS80, Thm. VIII.20]), folgt

$$\lim_{\varkappa\to 0} \|F(H_{S(\varkappa)}) - F(H_S)\| = 0 \quad (F \in C_0([0,\infty))).$$

Durch Testen mit geigneten Funktionen $F \in C_0([0,\infty))$ sieht man, daß die Spektralscharen $E_{S(\varkappa)}(\cdot) = P_{(-\infty,\cdot]}(H_{S(\varkappa)})$ in allen Stetigkeitspunkten von $E_S(\cdot) = P_{(-\infty,\cdot]}(H_S)$ gegen E_S konvergieren.
Wegen Lemma 2.6 und unserer Überlegung gilt:

Lemma 2.15 *Sei $0 \leq V \in L_\infty$. Die Menge $S \subset \mathbb{R}^\nu$ sei kompakt und $\Omega = \mathbb{R}^\nu \setminus S$ erfülle die Segmentbedingung.*
Es sei $S(\varkappa)$ wie in Lemma 2.13 definiert.
Dann folgt

1. *für $\varkappa \in \mathbb{R}$ die Mengengleichheit:*

$$\sigma_e(H_S) = \sigma_e(H_{S(\varkappa)}) = \sigma_e(H);$$

2. *für $E \in \mathbb{R}$ und $\delta > 0$ mit $\sigma(H_S) \cap [E-\delta, E+\delta] = \{E\}$ die Konvergenz:*

$$\|P_{(E-\delta,E+\delta)}(H_{S(\varkappa)}) - P_{\{E\}}(H_S)\| \longrightarrow 0 \quad (\varkappa \longrightarrow 0).$$

Nach [Kat95, Thm. I-6.32] folgt für orthogonale Projektionen P, Q aus $\|P-Q\| < 1$ die unitäre Äquivalenz, d.h. die Existenz eines unitären Operators $U : \operatorname{ran} P \longrightarrow \operatorname{ran} Q$ mit $P = U^*QU$.

Für $0 < \delta < \operatorname{dist}(E, \sigma(H_S) \setminus \{E\})$ und $\varkappa$ hinreichend klein gilt dann wegen der zweiten Aussage des Lemmas 2.15

$$\dim P_{(E-\delta,E+\delta)}(H_{S(\varkappa)}) = \dim P_{\{E\}}(H_S) =: m.$$

Weil wir δ gegen Null gehen lassen können, konvergieren die entsprechend ihrer Vielfachheit aufgezählten Eigenwerte

$$E_1(\varkappa) \leq \cdots \leq E_m(\varkappa)$$

gegen E.

Ein Beispiel von Rellich (siehe [Kat95, II.5.3]) zeigt, daß man im allgemeinen nicht damit rechnen kann, ein Orthonormalsystem von Eigenfunktionen von $H_{S(\varkappa)}$ zu finden, das gegen ein entsprechendes Orthonormalsystem in $\operatorname{ran} P_{\{E\}}(H_S)$ konvergiert.
Ist hingegen $m = 1$, so lassen sich mit Hilfe der Spektralprojektionen normierte Eigenfunktionen zu $E_1(\varkappa)$ angeben:

$$v_{S(\varkappa)} = \|P_{(E-\delta,E+\delta)}(H_{S(\varkappa)})v\|_2^{-1} P_{(E-\delta,E+\delta)}(H_{S(\varkappa)})v.$$

Hierbei ist v der normierte Eigenvektor von E und $\varkappa$ hinreichend klein gewählt.
Durch die Definition der Mengen $S(\varkappa)$ mit Hilfe von Abstandsfunktionen, erfüllen die Mengen

$$\Omega(\varkappa) = \mathbb{R}^\nu \setminus S(\varkappa)$$

die Segmentbedingung. Nach Lemma 2.15 sind die Projektionen

$$P_{E_1(\varkappa)} = P_{(E-\delta,E+\delta)}(H_{S(\varkappa)})$$

stetig. Insbesondere ist auf einer Nullumgebung die Trajektorie $v_{S(\varkappa)}$ stetig im Parameter $\varkappa$.

Wir haben damit das folgende Korollar bewiesen:

Korollar 2.16 *Sei $0 \leq V \in L_\infty$. Die Menge $S \subset \mathbb{R}^\nu$ sei kompakt und $\Omega = \mathbb{R}^\nu \setminus S$ erfülle die Segmentbedingung.*
Es sei $S(\varkappa)$ wie in Lemma 2.13 definiert.
Sei $E \in \sigma_d(H_S)$ mit Vielfachheit 1 und zugehörigen Eigenelement v. Dann existiert in einer Umgebung von 0 eine stetige Familie $\left(E_{S(\varkappa)}, v_{S(\varkappa)}\right)$ von Eigenwerten und zugehörigen normierten Eigenvektoren $v_{S(\varkappa)} \in D(H_{S(\varkappa)})$ mit

$$E_{S(0)} = E, \quad v_{S(0)} = v.$$

Unter Berücksichtigung der Vielfachheit ist für $\varkappa$ nahe bei Null $E_{S(\varkappa)}$ der einzige Eigenwert von $H_{S(\varkappa)}$ in der Nähe von E.

3 Exponentielles Lokalisieren

In diesem Kapitel erarbeiten wir uns ein technisches Hilfsmittel, um $H(\lambda)$ für $W \in L_{\infty,c}$ mit wechselndem Vorzeichen zu behandeln. Obwohl im Grenzwert λ gegen Unendlich nicht die Existenz eines Grenzoperators zu erwarten ist, werden wir $\sigma_d(H(\lambda))$, für geeignete Störpotentiale W, mit vollständig entkopplten Eigenwertproblemen vergleichen können.
Eigenwerte und Vielfachheiten der entkoppelten Operatoren lassen sich zum Teil wieder mit denen von Schrödinger-Operatoren $H(\lambda)$ mit $\liminf_{|x|\to\infty} W(x) \geq c > 0$ beschreiben.

Die grundlegende Idee ist, daß für große Kopplungen das Tunneln von Eigenlösungen zu Eigenwerten $|E| \leq b$ im klassisch verbotenen Bereich

$$\left[V - E + \lambda W > 0\right]$$

unterdrückt wird. Unterdrückt heißt, daß die L_2-Norm von Eigenlösungen auf Teilmengen von $\operatorname{supp} W_+$ exponentiell klein im Kopplungsparameter wird und so praktisch nicht von Null unterschieden werden kann.
Naiv entsprechen Eigenwerte, Eigenlösungen und Eigenprojektionen von $H(\lambda)$, denen eines Schrödinger-Operators mit Dirichletbedingungen auf einer Teilmenge S von $\operatorname{supp} W_+$. Hat S die entsprechende Gestalt, ist der Vergleichsoperator eine direkte Summe von Dirichlet-Schrödinger-Operatoren.

Der entkoppelnde Effekt einer Potentialbarriere wurde unter anderem im Zusammenhang der Analyse „tiefliegender Eigenwerte von Schrödinger-Operatoren mit mehrfachen Brunnen “ benutzt. Siehe [Sim84, HS84, HS96], um nur eine Auswahl zu nennen.
Daß die Fehlerschranken vom exponentiellen Typ sind, läßt sich durch die Liouville-Green-Approximation von Lösungen der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung motivieren (siehe [HS96]). In höheren Raumdimensionen kann man diese Schranken mit Hilfe von Techniken von Agmon [Agm82] beweisen (siehe [Sim84, HS84, HS96]). Die Ergebnisse von [Sim84, HS84, HS96] lassen sich leider nicht einfach zitieren, so daß wir mit einem technischen Abschnitt unsere Argumentation beginnen.

3.1 Lokalisierung von Eigenlösungen

Bevor wir beginnen, erinnern wir an unsere Voraussetzungen aus dem vorherigen Kapitel:

$$0 \leq V \in L_\infty, \quad W_- \in L_\infty, \quad W_+ \in L_{\infty,\mathrm{loc}}.$$

Das folgende Lemma ist die technische Grundlage unserer Argumentation. Erst im Korollar 3.4 werden wir zu einer strukturierteren Aussage kommen.

Lemma 3.1 *Es sei $0 \leq f \in L_\infty$, mit beschränkten schwachen Gradienten. Weiter sei $\eta \in C^\infty$ mit $\|\eta\|_\infty + \|\nabla\eta\|_\infty < \infty$.*
Dann folgt für alle $u \in \mathscr{E}ig(E, \lambda, \operatorname{supp}\eta)$, $S \subset \mathbb{R}^\nu$ abgeschlossen und $\gamma > 0$ aus

$$\inf_{\operatorname{supp}\eta} \Big(V - E + \lambda(W - |\nabla f|^2)\Big) \geq \gamma \tag{3.1}$$

die Ungleichung:

$$\begin{aligned} \|\chi_S \eta u\|_2^2 + \|\chi_S \nabla(\eta u)\|_2^2 \leq & \\ \leq \quad & \gamma^{-1}\left(1 + 2(\gamma + \|V - E\|_\infty + \lambda \|\nabla f|_{\operatorname{supp}\eta}\|_\infty^2)\right) \\ & \cdot \|\nabla\eta\|_\infty \Big(2\sqrt{\lambda}\|\eta\|_\infty \|\nabla f\big|_{\operatorname{supp}\nabla\eta}\|_\infty + \|\nabla\eta\|_\infty\Big) \\ & \cdot \exp\left(-2\sqrt{\lambda}\big(\inf_S f - \sup_{\operatorname{supp}\nabla\eta} f\big)\right) \|u\big|_{\operatorname{supp}\nabla\eta}\|_2^2. \end{aligned}$$

Beweis Die folgenden Beweisschritte sind im wesentlichen den Beweisen von [HS96, La. 3.6, La. 3.7] entnommen. Wir verweisen für weitere Erläuterungen auf [HS96].

Sei zunächst $g \in C_b^1$, der Menge aller beschränkten C^1-Funktionen mit beschränkten Gradienten.
Wir suchen eine Abschätzung für $\eta e^g u$. Neben der Ungleichung (3.1) haben wir in einer Umgebung von $\operatorname{supp}\eta$ die Eigenwertgleichung $(L(\lambda) - E)u = 0$ zur Verfügung.
Mit der Setzung $L_g(\lambda) = e^g L(\lambda) e^{-g}$ folgt

$$(L_g(\lambda) - E)\eta e^g u = e^g (L(\lambda) - E)\eta u = e^g[-\Delta, \eta]u \in L_2. \tag{3.2}$$

Es ist

$$[\Delta, \eta]u = (\Delta\eta)u + 2\nabla\eta\nabla u = \nabla\eta\nabla u + \operatorname{div}(u\nabla\eta).$$

Für alle v, $w \in \mathscr{H}^1$ gilt nach einer partieller Integration

$$-\big\langle \partial_i w, v \big\rangle = \big\langle w, \partial_i v \big\rangle \quad (i = 1, \dots, \nu),$$

und wegen $w\partial_i\eta \in \mathscr{H}^1$ für $i = 1\ldots,\nu$ folgt die Gleichung

$$-\big\langle\, \operatorname{div}(w\nabla\eta)\,,\, v\,\big\rangle = \big\langle\, w\nabla\eta\,,\, \nabla v\,\big\rangle.$$

Multiplizieren wir die Gleichung (3.2) skalar mit $\eta e^g u \in \mathscr{H}^1$, so ist nach dem Vorherigen:

$$\begin{aligned}
\big\langle\, (L_g(\lambda)-E)\eta e^g u\,,\, \eta e^g u)\,\big\rangle &= -\big\langle\, \nabla\eta\nabla u + \operatorname{div}(u\nabla\eta)\,,\, \eta e^{2g}u\,\big\rangle = \\
&= -\big\langle\, \nabla\eta\nabla u\,,\, \eta e^{2g}u\,\big\rangle + \big\langle\, u\nabla\eta\,,\, \nabla(\eta e^{2g}u)\,\big\rangle \\
&= -\big\langle\, \nabla\eta\nabla u\,,\, \eta e^{2g}u\,\big\rangle + \big\langle\, u\nabla\eta\,,\, (\nabla\eta)e^{2g}u + \eta e^{2g}((2\nabla g)u + \nabla u)\,\big\rangle \\
&= \big\langle\, e^{2g}(|\nabla\eta|^2 + 2\eta\nabla\eta\nabla g)u\,,\, u\,\big\rangle + \big\langle\, e^{2g}\eta u\,,\, \nabla\eta\nabla u\,\big\rangle - \big\langle\, \nabla\eta\nabla u\,,\, \eta e^{2g}u\,\big\rangle,
\end{aligned}$$

wobei wir in der letzten Gleichung $\nabla\eta$ reell ausgenutzt haben.
Aufgrund der Symmetrie-Eigenschaften des Skalarprodukts $\langle\cdot,\cdot\rangle$ gilt damit:

$$\begin{aligned}
\operatorname{Re}\big\langle\, (L_g(\lambda)-E)\eta e^g u\,,\, \eta e^g u\,\big\rangle &= \big\langle\, e^{2g}(|\nabla\eta|^2 + 2\eta\nabla\eta\cdot\nabla g)u\,,\, u\,\big\rangle \\
&\leq \big\langle\, e^{2g}(|\nabla\eta|^2 + 2\eta|\nabla g||\nabla\eta|)u\,,\, u\,\big\rangle.
\end{aligned}$$

Die linke Seite der Gleichung kann man als symmetrischen Teil einer quadratischen Form deuten. Wir leiten eine Koerzitivitäts-Ungleichung für diese Form in unserem Spezialfall her.
Für $w = \eta e^g u \in \mathscr{H}^1$ ist $e^g\Delta e^{-g}w \in L_2$ und für alle $\varphi \in C_c^\infty$ gilt:

$$\begin{aligned}
-\big\langle\, e^g\Delta e^{-g}w\,,\, \varphi\,\big\rangle &= \big\langle\, \nabla(e^{-g}w)\,,\, \nabla(e^g\varphi)\,\big\rangle \\
&= \big\langle\, (\nabla w - w\nabla g)\,,\, (\nabla\varphi + \varphi\nabla g)\,\big\rangle \\
&= \big\langle\, \nabla w\,,\, \nabla\varphi\,\big\rangle - \big\langle\, |\nabla g|^2 w\,,\, \varphi\,\big\rangle + \big\langle\, \nabla w\,,\, \varphi\nabla g\,\big\rangle - \big\langle\, w\nabla g\,,\, \nabla\varphi\,\big\rangle
\end{aligned}$$

Rechte und linke Seite der Gleichung sind stetig in $\mathscr{H}^1$ und wir können φ durch w ersetzen.

Setzen wir $v = e^g u$, so folgt aus dem Vorherigen:

$$\begin{aligned}
\operatorname{Re}\big\langle\, (L_g(\lambda)-E)\eta v\,,\, \eta v\,\big\rangle &= \int |\nabla(\eta v)|^2 + (V - E + \lambda W - |\nabla g|^2)|\eta v|^2\,dx \\
&\geq \int (V - E + \lambda W - |\nabla g|^2)|\eta v|^2\,dx
\end{aligned}$$

Insgesamt haben wir die folgende Ungleichung für $g \in C_b^1$ und $\eta e^g u$ bewiesen:

$$\int (V - E + \lambda W - |\nabla g|^2)|\eta e^g u|^2\,dx \leq \big\langle\, e^{2g}(|\nabla\eta|^2 + 2\eta|\nabla g||\nabla\eta|)u\,,\, u\,\big\rangle.$$

Wir wollen in der Ungleichung g durch $\sqrt{\lambda} f$ ersetzen. Ist f nicht bereits in C^1, so können wir die Funktion f durch ihre Friedrichssche Glättung (siehe [Ada75]) approximieren. Die Glättung bzw. der Gradient der Glättung konvergieren punktweise fast überall gegen f bzw. ∇f. Aus dem Satz von Lebesgue folgt im Grenzfall die nachstehende Ungleichung:

$$\begin{aligned}
&\int (V - E + \lambda(W - |\nabla f|^2))|\eta e^{\sqrt{\lambda} f} u|^2 \, dx \leq \\
&\qquad \leq \left\langle e^{2\sqrt{\lambda} f}(|\nabla \eta|^2 + 2\eta\sqrt{\lambda}|\nabla f||\nabla \eta|)u \, , u \right\rangle
\end{aligned}$$

Aus der Bedingung (3.1) folgt:

$$\|e^{\sqrt{\lambda} f} \eta u\|_2^2 \leq \frac{1}{\gamma} \left\langle e^{2\sqrt{\lambda} f}(|\nabla \eta|^2 + 2\eta\sqrt{\lambda}|\nabla f||\nabla \eta|)u \, , u \right\rangle \tag{3.3}$$

Für $g \in C_b^1$ ist $\nabla(e^g \eta u) = e^g(\nabla(\eta u) + \eta u \nabla g)$, und es gilt die Abschätzung:

$$\begin{aligned}
&\|e^g \nabla(\eta u)\|_2^2 \leq \left(\|\nabla(e^g \eta u)\|_2 + \|e^g \eta u \nabla g\|_2\right)^2 \\
&\leq 2\left(\|\nabla(e^g \eta u)\|_2^2 + \|e^g \eta u \nabla g\|_2^2\right) \\
&\leq 2\left(\|V - E\|_\infty \|e^g \eta u\|_2^2 + \operatorname{Re}\left\langle (L_g(\lambda)) - E)e^g \eta u \, , e^g \eta u \right\rangle \; + \|e^g \eta u \nabla g\|_2^2\right) \\
&= 2\left(\|V - E\|_\infty \|e^g \eta u\|_2^2 + \left\langle e^{2g}(|\nabla \eta|^2 + 2\eta \nabla \eta \cdot \nabla g)u \, , u \right\rangle \; + \|e^g \eta u \nabla g\|_2^2\right)
\end{aligned}$$

Mit dem gleichen Approximationsargument wie oben folgt aus der Abschätzung (3.3) die Gültigkeit von:

$$\begin{aligned}
\|e^{\sqrt{\lambda} f} \nabla(\eta u)\|_2^2 \quad &\leq \quad \gamma^{-1} 2\left(\|V - E\|_\infty + \gamma + \lambda \|\nabla f|_{\operatorname{supp} \eta}\|_\infty^2\right) \\
&\qquad \cdot \left\langle e^{2\sqrt{\lambda} f}(|\nabla \eta|^2 + 2\eta\sqrt{\lambda}|\nabla f||\nabla \eta|)u \, , u \right\rangle
\end{aligned} \tag{3.4}$$

Es ist

$$\begin{aligned}
&\left\langle e^{2\sqrt{\lambda} f}(|\nabla \eta|^2 + 2\eta\sqrt{\lambda}|\nabla f||\nabla \eta|)u \, , u \right\rangle \leq \\
&\qquad \leq \quad \|\nabla \eta\|_\infty \left(2\sqrt{\lambda}\|\eta\|_\infty \|\nabla f|_{\operatorname{supp} \nabla \eta}\|_\infty + \|\nabla \eta\|_\infty\right) \\
&\qquad\qquad \cdot \sup_{\operatorname{supp} \nabla \eta} e^{-2\sqrt{\lambda} f} \, \|u|_{\operatorname{supp} \nabla \eta}\|_2^2
\end{aligned} \tag{3.5}$$

Kombinieren wir (3.3), (3.4) und (3.5) mit den Ungleichungen

$$\inf_S e^{2\sqrt{\lambda} f} \|\chi_S \eta u\|_2^2 \leq \|e^{\sqrt{\lambda} f} \eta u\|_2^2, \; \inf_S e^{2\sqrt{\lambda} f} \|\chi_S \nabla(\eta u)\|_2^2 \leq \|e^{\sqrt{\lambda} f} \nabla(\eta u)\|_2^2$$

folgt die Behauptung des Lemmas. □

Im Folgenden reduzieren wir die in Lemma 3.1 enthaltenen Freiheitsgrade. Insbesondere werden wir f und η geeignet wählen.
Weil wir nur an oberen Fehlerschranken interessiert sind, liegt hier die Betonung auf „geeignet “. Es soll aber nicht verschwiegen werden, daß es eine optimale Wahl von f gibt. Definiert man die *Agmon-Metrik*

$$\rho(x,y) = \inf\{\int W_+^{1/2}\,d\gamma;\, \gamma \in AC([0,1]),\, \gamma(0) = x,\, \gamma(1) = y\} \quad (x,y \in \mathbb{R}^\nu)$$

und setzt für ein $\varepsilon > 0$

$$f(x) = (1-\varepsilon)\inf\{\rho(x,y); y \notin \operatorname{supp} W_+\},$$

so ist nach [HS96, Prop. 3.3] die Ungleichung $|\nabla f|^2 \le (1-\varepsilon)W_+$ erfüllt. Die Bedingung 3.1 ist damit nur dann erfüllbar, wenn der Träger von η im klassisch verbotenen Bereich liegt. Die Behauptung von Lemma 3.1 läßt sich somit als eine Abschätzung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines quantenmechanischen Teilchens im klassisch verbotenen Bereich deuten. Es lassen sich mit dieser Wahl von f sogar punktweise gültige obere Schranken für u herleiten, die mit der Liouville-Green-Approximation im Fall einer Raumdimension übereinstimmen (siehe [HS96, 3.1, Thm. 3.10]).
Die Agmon-Metrik ist eine Pseudometrik auf dem $\mathbb{R}^\nu$. Man kann $\rho(x,y)$ als Abstand zwischen x und y deuten, wie er sich für ein quantenmechanisches Teilchen unter dem Einfluß des Potentials W darstellt.
Wir wollen die Idee von Agmon aufgreifen, weil aber die euklidische Geometrie unserer Anschauung zugänglicher ist, machen wir die folgende geometrische Annahme über die Gestalt von W_+.

Voraussetzung 3.2 Es gebe eine abgeschlossene Menge $M \subset \mathbb{R}^\nu$ und reelle Zahlen $d_0 > 0$, $p \ge 0$ mit

$$W_+ \ge d_0(\operatorname{dist}(\cdot, M))^p(1-\chi_M).$$

Im Fall $p = 0$ gilt also $W_+ \ge d_0(1-\chi_M)$.

Lemma 3.3 *Unter der Voraussetzung 3.2 gibt es für alle* $b > 0$ *ein* $C = C(b, \|V\|_\infty)$, *so daß für alle* $d \in (0,1)$, $S \subset [\operatorname{dist}(\cdot, M) > d]$ *abgeschlossen und Eigenlösungen* $u \in \mathscr{E}ig(E, \lambda, [\operatorname{dist}(S,\cdot) < d])$ *mit*

$$|E| \le b, \quad d_0\lambda d^{p+2} \ge 4^p(1 + \|V\|_\infty + b)$$

die folgende Ungleichung gilt

$$\begin{aligned}\|\chi_S u\|_2^2+\|\chi_S\nabla u\|_2^2 \le & C\left(\sqrt{d_0}\sqrt{\lambda}\, d^{(p+2)/2)}\right)^3 d^{-4}\\ & \cdot\exp\left(-\tfrac{2}{p+2}\,(1-d^2)\sqrt{d_0}\sqrt{\lambda}\, d^{(p+2)/2}\right)\|u\|_2^2.\end{aligned}$$

Beweis Der Beweis ist eine Anwendung des Lemmas 3.1. Die Idee ist $\eta\in C^\infty$ mit $\eta=1$ in einer Umgebung von S zu wählen. Die Funktion f werden wir als Funktion des Abstands $\operatorname{dist}(\,\cdot\,,N)$ für ein N mit $M\subset N$ ansetzen. Der Übergang von M zu N ist notwendig damit wir

$$\inf_S f-\sup_{\operatorname{supp}\nabla\eta} f>0$$

garantieren können.

Wir setzen $N=\left[\,\operatorname{dist}(S,\cdot\,)\ge d\,\right]$. Dann gilt

$$\inf_S \operatorname{dist}(\,\cdot\,,N)=\operatorname{dist}(S,N)=\inf_N \operatorname{dist}(S,\cdot\,)=d.$$

Nach Voraussetzung ist $M\subset\left[\,\operatorname{dist}(S,\cdot\,)>d\,\right]\subset N$ und wir können $\operatorname{dist}(\,\cdot\,,N)\le\operatorname{dist}(\,\cdot\,,M)$ folgern.

Die C^∞-Funktion η definieren wir mit Hilfe der Friedrichsschen Glättung einer geeigneten charakteristischen Funktion (siehe [Ada75]). Sei dazu $j\in C_c^\infty(K(0,1))$ mit $0\le j\le 1$ und $\|j\|_1=1$. Es sei

$$\psi=\left(\tfrac{8}{d}\right)^\nu j\left(\tfrac{8}{d}\,\cdot\right)*\chi_{\left[\operatorname{dist}(\,\cdot\,,N)\le d3/8\right]},\quad \eta=1-\psi.$$

Die Funktionen η und ψ sind unendlich oft differenzierbar und es gilt

$$0\le\eta,\,\psi\le 1,\quad |\nabla\eta|=|\nabla\psi|\le\tfrac{8}{d}\|\nabla j\|_1.$$

Weiter sind die folgenden Trägerbedingungen erfüllt:

$$\begin{aligned}\operatorname{supp}\eta\subset\ & \overline{\left[\psi<1\right]} && \subset\left[\operatorname{dist}(\,\cdot\,,N)\ge\tfrac{d}{4}\right],\\ \operatorname{supp}\nabla\eta=\ & \operatorname{supp}\nabla\psi && \subset\left[\operatorname{dist}(\,\cdot\,,N)\le\tfrac{d}{2}\right].\end{aligned}$$

Machen wir für f den Ansatz

$$f(x)=2(1-d^2)\sqrt{d_0}\,\frac{\sqrt{\lambda}(\min(d,\operatorname{dist}(\,\cdot\,,N)))^{(p+2)/2}}{p+2},$$

folgt aus der Wahl von N und der obigen Trägerbedingungen die Ungleichung

$$\begin{aligned}\inf_S f - \sup_{\operatorname{supp}\nabla\eta} f &\geq (1-d^2)\,2\left(1-\left(\tfrac{1}{2}\right)^{(p+2)/2}\right)\frac{\sqrt{d_0}\sqrt{\lambda}\,d^{(p+2)/2}}{p+2}\\ &\geq (1-d^2)\,\frac{\sqrt{d_0}\sqrt{\lambda}\,d^{(p+2)/2}}{p+2}.\end{aligned}$$

Damit wir das Lemma 3.1 anwenden können muß f hinreichend regulär sein. Betrachten wir zunächst $g = \min(d, \operatorname{dist}(\cdot, N))$. Die Funktion g ist nach Konstruktion global Lipschitz-stetig mit Lipschitz-Konstante 1. Identifiziert man nach Evans ([Eva98, 5.8.b, Thm. 4]) die global Lipschitz-stetigen Funktionen mit den beschränkten Funktionen mit beschränktem Gradienten, so können wir folgern, daß g einen schwachen Gradienten besitzt mit $|\nabla g| \leq 1$.
Aufgrund der Kettenregel ist f ebenfalls schwach differenzierbar. Aus $(1-d^2) \in (0,1)$ folgt

$$|\nabla f| \leq \sqrt{d_0}\sqrt{\lambda}(\min(d, \operatorname{dist}(\cdot, N)))^{p/2}$$

Wir brauchen nun nur noch die Voraussetzungen des Lemmas 3.1 zu verifizieren. Auf $\operatorname{supp}\eta \subset \left[\operatorname{dist}(\cdot, N) \geq \frac{d}{4}\right]$ gilt nach Voraussetzung:

$$\begin{aligned}&(V-E) + \lambda W - |\nabla f|^2 \geq\\ &\quad\geq -\|V\|_\infty - b + \lambda\, d_0 \operatorname{dist}(\cdot, M)^p - (1-d^2) d_0 \lambda \operatorname{dist}(\cdot, N)^p\\ &\quad\geq -\|V\|_\infty - b + d_0\,\lambda\,(1-(1-d^2)) \operatorname{dist}(\cdot, N)^p\\ &\quad\geq -\|V\|_\infty - b + d_0\,\lambda\, d^2 d^p 4^{-p}\\ &\quad\geq -(\|V\|_\infty + b)\, 4^{-p}(4^p(\|V\|_\infty + b + 1)) \geq 1.\end{aligned}$$

Folglich ist die Ungleichung (3.1) mit $\gamma = 1$ erfüllt. Weil nach Konstruktion $\operatorname{supp}\eta \subset \mathbb{R}^\nu \setminus N = \left[\operatorname{dist}(S, \cdot) < d\right]$ ist, ist u eine Eigenlösung in $\mathscr{E}ig(E, \lambda, \operatorname{supp}\eta)$.

Mit der vorherigen Abschätzung von $|\nabla f|$ folgt:

$$\begin{aligned}&\|\chi_S u\|_2^2 + \|\chi_S \nabla u\|_2^2 \leq\\ &\quad\leq \left(1 + 2\,(1 + \|V\|_\infty + b + \lambda d_0 d^p)\right)\\ &\qquad\cdot\left(2\tfrac{8}{d}\|\nabla j\|_1 \sqrt{d_0}\sqrt{\lambda} d^{p/2} + \left(\tfrac{8}{d}\right)^2 \|\nabla j\|_1^2\right)\\ &\qquad\cdot\exp\left(-\tfrac{2}{p+2}(1-d^2)\sqrt{d_0}\sqrt{\lambda}\, d^{(p+2)/2}\right)\\ &\quad\leq \frac{A_1 d^2 + d_0 \lambda d^{p+2}}{d^2} \cdot \frac{A_2 \sqrt{d_0}\sqrt{\lambda} d^{(p+2)/2} + A_3}{d^2}\\ &\qquad\cdot\exp\left(-\tfrac{2}{p+2}(1-d^2)\sqrt{d_0}\sqrt{\lambda}\, d^{(p+2)/2}\right),\end{aligned}$$

mit Konstanten A_1, A_2 und A_3. Wegen $d \le 1$ und $1 \le \lambda d_0 d^{p+2}$ erhalten wir die Behauptung nach Ausmultiplizieren der Vorfaktoren. $\square$

Nach Lemma 3.3 wird die $\mathscr{H}^1$-Norm der Eigenlösung u auf $S \subset \mathbb{R}^\nu \setminus M$ gleichermaßen vom Randabstand d und dem Kopplungsparameter λ bestimmt. Möchte man unter Beibehaltung der exponentiellen Fehlerschranken $\mathbb{R}^\nu \setminus M$ durch eine Familie von Mengen S_d mit Abstand d zu M ausschöpfen, so reicht es nicht, daß für λ gegen Unendlich der Abstand gegen Null konvergiert. Denn z.B. mit

$$d = d(\lambda) = (c \ln \lambda)^{2/(p+2)} \lambda^{-1/(p+2)}$$

folgt je nach Wahl von $c > 0$ die Konvergenz oder die Divergenz von

$$\left(\sqrt{\lambda}\, d^{(p+2)/2)}\right)^3 d^{-4} \exp\left(-\tfrac{2}{p+2}\,(1-d^2)\sqrt{d_0}\sqrt{\lambda}\, d^{(p+2)/2}\right).$$

Mit diesem Beispiel im Sinn sondern wir einige günstigere Fälle aus:

Korollar 3.4 *Seien $b > 0$, $\alpha \in [0,1)$, $\beta = 1 - \alpha$ und $d \in (0,1)$. Unter der Voraussetzung* 3.2 *existieren*

$$\delta = \delta(d, d_0, p) > 0, \quad C = C(\delta, d, d_0, \alpha, p, b, \|V\|_\infty) \ge 0,$$

so daß für alle abgeschlossene Mengen $S \subset \left[\, \mathrm{dist}(\,\cdot\,, M) \ge d\lambda^{-\alpha/(p+2)} \right]$ und Eigenlösungen $u \in \mathscr{E}ig(E, \lambda, \left[\, \mathrm{dist}(S, \cdot) < d\lambda^{-\alpha/(p+2)} \right])$ mit

$$|E| \le b, \quad d_0 d^{p+2} \lambda^\beta \ge 4^p (1 + \|V\|_\infty + b)$$

die folgende Ungleichung gilt:

$$\|\chi_S u\|_2, \|\chi_S \nabla u\|_2 \le C \exp(-\delta\, \lambda^{\beta/2}) \|u\|_2.$$

Beweis Die Rolle des d im vorherigen Lemma übernimmt in diesem Korollar der Term $d\lambda^{\alpha/(p+2)}$. Wegen der Ungleichung

$$d_0 \lambda (d\lambda^{-\alpha/(p+2)})^{p+2} = d_0 d^{p+2} \lambda^{1-\alpha} \ge 4^p (1 + \|V\|_\infty + b)$$

existiert ein $C = C(b, \|V\|_\infty)$, so daß mit $d_1 = \sqrt{d_0}\, d^{(p+2)/2}$ folgt:

$$\|\chi_S u\|_2, \|\chi_S \nabla u\|_2 \le C \frac{(d_1\, \lambda^{\beta/2}))^3}{\left(d\lambda^{-\alpha/(p+2)}\right)^4} \exp\left(-\tfrac{1-d^2}{p+2} d_1\, \lambda^{\beta/2}\right) \|u\|_2.$$

Für alle $\gamma \in \mathbb{R}$ und $\delta \in (0, \frac{d_1(1-d^2)}{p+2})$ gilt

$$\lambda^\gamma \exp\left(-\tfrac{d_1(1-d^2)}{p+2}\,\lambda^{\beta/2}\right) = O\left(\exp\left(-\delta\,\lambda^{\beta/2}\right)\right) \quad (\lambda \to \infty),$$

womit die Behauptung bewiesen ist. □

Die Aussage des Korollars 3.4 hat den Charakter eines Kalküls, der es erlaubt, unbeachtet der Herkunft einer Eigenlösung die L_2-Norm dieser Funktion auf Teilmengen des Trägers der Potentialbarriere, die einen gewissen Sicherheitsabstand zum Komplement des Trägers haben, durch exponentielle Fehlerschranken zu ersetzen.
In der Tat ist man versucht, die Ungleichung in der Behauptung von 3.4 durch die O-Notation zu ersetzen. Die linke Seite dieser Ungleichung ist aber keine Funktion in λ, sondern hängt von den verschiedenen Eigenlösungen ab.

3.2 Lokalisierung des Spektrums

Die gleichmäßigen Fehlerschranken von Korollar 3.4 erlauben es uns, mit Hilfe von Lemma 2.1 das diskrete Spektrum von $H(\lambda)$ mit dem von Schrödinger-Operatoren mit Dirichlet-Randdaten zu vergleichen. Damit wir sichergehen können, daß sich für große λ in einer Lücke des wesentlichen Spektrums nur diskrete Eigenwerte befinden, gelte die folgende Voraussetzung:

Voraussetzung 3.5 Es sei $W \in L_{\infty,\mathrm{loc}}$, so daß entweder $(W-c)_- \in L_{\infty,c}$ für ein $c > 0$ oder $W \in L_{\infty,0}$ gilt.

Dort, wo wir im Grenzwert die Eigenfunktionen nicht von der Nullfunktion unterscheiden können, modifizieren wir sie mit einer Abschneidefunktion, so daß sie dort zu Null werden und wir eine approximative Eigenfunktion des jeweiligen Vergleichsoperators erhalten.
Dies geht mit Hilfe von Korollar 3.3 auf abgeschlossenen Mengen, die zu M einen gewissen Abstand wahren. Wir schließen den Fall, daß $\mathbb{R}^\nu \setminus M$ durch eine Familie $(S(\lambda))$ ausgeschöpft wird, mit ein.

Satz 3.6 *Das Potential W erfülle die geometrische Voraussetzung 3.2. Es seien M wie in 3.2, $\alpha \in [0,1)$, $d \in (0,1)$ und $(S(\lambda))_{\lambda>0} \subset \mathbb{R}^\nu$ eine Familie von abgeschlossenen Teilmengen mit $\partial S(\lambda)$ kompakt und*

$$S(\lambda) \subset [\operatorname{dist}(\cdot, M) \geq d\lambda^{-\alpha/(p+2)}] \quad (\lambda > 0).$$

Weiter seien die Voraussetzungen 2.5 und 3.5 erfüllt, so daß für a, b aus 2.5 und λ hinreichend groß nach Satz 2.10 gilt:

$$[a,b]\cap\sigma_e(H(\lambda)) = [a,b]\cap\sigma_e(H_{S(\lambda)}(\lambda)) = \emptyset.$$

Dann existiert ein $\delta > 0$, so daß mit $\beta = 1-\alpha \in (0,1]$ für λ gegen ∞ folgt:

$$\operatorname{dist}(\,\sigma(H(\lambda))\cap(a,b),\,\sigma(H_{S(\lambda)}(\lambda))\,) = O\left(\exp(-\delta\,\lambda^{\beta/2})\right),$$
$$\operatorname{dist}(\,\sigma(H(\lambda)),\,\sigma(H_{S(\lambda)}(\lambda))\cap(a,b)\,) = O\left(\exp(-\delta\,\lambda^{\beta/2})\right).$$

Beweis Wir definieren eine geeignete Abschneidefunktion. Sei dazu $j \in C_c^\infty(K(0,1))$ mit $0 \le j \le 1$ und $\|j\|_1 = 1$. Durch die Definition

$$\psi_\varepsilon = \left(\tfrac{8}{\varepsilon}\right)^\nu j\left(\tfrac{8}{\varepsilon}\,\cdot\right) * \chi_{\left[\operatorname{dist}(\,\cdot\,,M)\le\varepsilon 3/8\right]} \qquad (\varepsilon > 0).$$

erhalten wir eine C^∞-Funktion mit den Eigenschaften

$$0 \le \psi_\varepsilon \le 1, \quad |\nabla\psi_\varepsilon| \le 8\varepsilon^{-1}\|\nabla j\|_1, \quad |\Delta\psi_\varepsilon| \le \left(8\varepsilon^{-1}\right)^2\|\Delta j\|_1.$$

Der Gradient von ψ_ε erfüllt die Trägerbedingung

$$\operatorname{supp}\nabla\psi_\varepsilon \subset \left[\tfrac{\varepsilon}{4} \le \operatorname{dist}(\,\cdot\,,M) \le \tfrac{\varepsilon}{2}\right] = R(\varepsilon).$$

Seien $\lambda > 0$ und $E \in (a,b)\cap\sigma(H(\lambda))$ mit Eigenelement $u \in D(H(\lambda))$. Die Funktion $\psi_\varepsilon u$ liegt in $\mathring{\mathscr{H}}^1\left(\left[\operatorname{dist}(\,\cdot\,,M) < \tfrac{\varepsilon}{2}\right]\right)$ und man rechnet leicht nach:

$$\big(L(\lambda)-E\big)\psi_\varepsilon u = -[\Delta,\psi_\varepsilon]u = -(\Delta\psi_\varepsilon)u - 2\nabla\psi_\varepsilon\nabla u \in L_2.$$

Offenbar ist

$$\|\big(L(\lambda)-E\big)\psi_\varepsilon u\|_2 \le 64\|\Delta j\|_1\varepsilon^{-2}\|\chi_{R(\varepsilon)}u\|_2 + 16\|\nabla j\|_1\varepsilon^{-1}\|\chi_{R(\varepsilon)}\nabla u\|_2.$$

Mit $\varepsilon = \varepsilon(\lambda) = d\lambda^{-\alpha/(p+2)}$ ist nach dem Formdarstellungssatz (siehe [Kat95]) $\psi_\varepsilon u \in D(H_{S(\lambda)}(\lambda))$ mit $H_{S(\lambda)}(\lambda)\psi_\varepsilon u = L(\lambda)\psi_\varepsilon u$. Aus dem Korollar 3.4 folgt die Existenz eines $\delta > 0$ und $C \ge 0$, so daß wir weiter schließen können:

$$\begin{aligned}\|\big(H_{S(\lambda)}(\lambda)-E\big)\psi_\varepsilon u\|_2 \quad &\le \quad \left(64\|\Delta j\|_1\frac{\lambda^{2\alpha/(p+2)}}{d^2} + 16\|\nabla j\|_1\frac{\lambda^{\alpha/(p+2)}}{d}\right)\\ &\qquad \cdot C\exp(-\delta\,\lambda^{\beta/2})\|u\|_2.\end{aligned}$$

Für alle $0 < \delta' < \delta$ gilt

$$\Big(64\|\Delta j\|_1 \tfrac{\lambda^{2\alpha/(p+2)}}{d^2} + 16\|\nabla j\|_1 \tfrac{\lambda^{\alpha/(p+2)}}{d}\Big) \exp(-\delta\,\lambda^{\beta/2}) = \\ = O\big(\exp\big(-\delta'\,\lambda^{\beta/2}\big)\big).$$

Zu $0 < \delta' < \delta$ existiert also ein $C' \geq 0$, so daß mit Lemma 2.1 folgt:

$$\operatorname{dist}(E, \sigma(H_{S(\lambda)}(\lambda))) \leq C' \exp\big(-\delta'\,\lambda^{\beta/2}\big).$$

Der erste Teil der Behauptung ist damit bewiesen. Der zweite Teil folgt ganz analog mit den gleichen C^∞-Multiplikatoren ψ_ε. □

3.3 Spektrum und Vielfachheiten

Der Beweis des Satzes 3.6 beruht auf der Konstruktion von approximativen Eigenfunktionen.
Die folgende Proposition ist ein Beweisdetail von Lemma 3.8 und dient gleichzeitig zur Motivation, daß wir von approximativen Eigenelementen auf Spektralprojektionen und damit auf die spektrale Vielfachheit schließen können.

Proposition 3.7 *Es sei A ein selbstadjungierter Operator in einem Hilbertraum. Es gebe $u \in D(A)$, $E \in \mathbb{R}$ und ein $\delta > 0$ mit*

$$\|(A-E)u\| < \delta\|u\|.$$

Dann gilt für alle $\varepsilon > 0$:

$$\|(I - P_{(E-\varepsilon,E+\varepsilon)}(A))u\| < \tfrac{\delta}{\varepsilon}\|u\|.$$

Beweis Es ist

$$(\cdot - E)^2 \geq (\cdot - E)^2(1 - \chi_{(E-\varepsilon,E+\varepsilon)}) \geq \varepsilon^2(1 - \chi_{(E-\varepsilon,E+\varepsilon)}).$$

Aus dem Spektralkalkül und der Voraussetzung folgt

$$\begin{aligned} \delta^2\|u\|^2 &\geq \big\langle (A-E)^2 u\,, u \big\rangle \\ &\geq \varepsilon^2 \big\langle (I - P_{(E-\varepsilon,E+\varepsilon)}(A))u\,, u \big\rangle \\ &= \varepsilon^2 \|(I - P_{(E-\varepsilon,E+\varepsilon)}(A))u\|. \end{aligned}$$

□

Lemma 3.8 *Die Voraussetzungen von Satz 3.6 seien erfüllt. Mit den dortigen Bezeichnungen gilt:*
Es existiert ein $\delta > 0$, so daß für alle selbstadjungierten Projektionen $P(\lambda)$, $P_{S(\lambda)}(\lambda)$ mit

$$\begin{aligned} \operatorname{ran} P(\lambda) \subset \operatorname{ran} P_{(a,b)}(H(\lambda)), \quad \operatorname{ran} P_{S(\lambda)}(\lambda) \subset \operatorname{ran} P_{(a,b)}(H_{S(\lambda)}(\lambda)), \\ P(\lambda)H(\lambda) = H(\lambda)P(\lambda), \qquad P_{S(\lambda)}H_{S(\lambda)}(\lambda) = H_{S(\lambda)}(\lambda)P_{S(\lambda)} \end{aligned}$$

und $1 > \varepsilon > 0$ mit $[a-\varepsilon, b+\varepsilon] \cap \sigma_e(H(\lambda)) = \emptyset$ im Grenzwert λ gegen ∞ gilt

$$\begin{aligned} \|(I - P_{(a-\varepsilon,b+\varepsilon)}(H(\lambda)))P_{S(\lambda)}(\lambda)\| = O\left(\varepsilon^{-1} \exp(-\delta\lambda^{\beta/2}) \dim P_{S(\lambda)}(\lambda)\right), \\ \|(I - P_{(a-\varepsilon,b+\varepsilon)}(H_{S(\lambda)}(\lambda))P(\lambda)\| = O\left(\varepsilon^{-1} \exp(-\delta\lambda^{\beta/2}) \dim P(\lambda)\right). \end{aligned}$$

Beweis Sei $\lambda > 0$. Um die Formeln einfach zu halten, werden wir die λ-Abhängigkeit nicht explizit machen.

Es bezeichne

$$Q = P_{(a-\varepsilon,b+\varepsilon)}(H).$$

Nach Voraussetzung ist $\operatorname{ran} P_S \subset \operatorname{ran} P_{(a,b)}(H_S)$ und die Projektion P_S reduziert den Operator H_S. Weil $\sigma_e(H_S) \cap (a,b) = \emptyset$ ist, existiert ein Orthonormalsystem von Eigenelementen $\{u_1, \ldots, u_N\}$ zu Eigenwerten $\{E_1, \ldots, E_N\} \subset (a,b)$ von H_S mit

$$P_S = \sum_{i=1}^{N} \langle \cdot \, , u_i \rangle u_i.$$

Falls es eine reelle Zahl $\delta > 0$ und eine Partition der Eins ψ, η gibt mit

$$\psi u_i \in D(H), \quad \|(H - E_i)u_i\|_2 < \delta\|u_i\|_2, \quad \|\eta u_i\|_2 < \delta\|u_i\|_2,$$

für alle $i = 1, \ldots, N$, folgt mit der vorherigen Proposition und

$$\left(I - P_{(a-\varepsilon,b+\varepsilon)}(H)\right) \leq \left(I - P_{(E_i-\varepsilon,E_i+\varepsilon)}(H)\right)$$

die Ungleichungskette

$$\begin{aligned}
\|\big(I-Q\big)P_S\| &\leq \sum_{i=1}^{N} \|\big(I-Q\big)\langle\,\cdot\,,u_i\,\rangle u_i\| \\
&\leq \sum_{i=1}^{N} \left(\|\big(I-Q\big)\psi u_i\|_2 + \|\big(I-Q\big)\eta u_i\|_2 \right) \\
&\leq 2N\left(\frac{\delta}{\varepsilon} + \varepsilon\frac{\delta}{\varepsilon}\right) = 2(1+\varepsilon)N\frac{\delta}{\varepsilon}.
\end{aligned}$$

Mit $\psi \in C^\infty$ ist

$$\begin{aligned}
\|\big(H-E_i\big)\psi u\|_2 &= \|[-\Delta,\psi]u_i\|_2 = \|(\Delta\psi)u + 2\nabla\psi\nabla u_i\|_2 \\
&\leq \|\Delta\psi\|_\infty \|u\big|_{\operatorname{supp}\nabla\psi}\|_2 + 2\|\nabla\psi\|_\infty \|\nabla u_i\big|_{\operatorname{supp}\nabla\psi}\|_2.
\end{aligned}$$

Wählen wir ψ wie im Beweis von Satz 3.6 sowie $\eta = 1-\psi$ können wir nach Korollar 3.4 in dem Vorherigen δ durch $C\exp(-\delta\,\lambda^{\beta/2})$ ersetzen, womit die erste Gleichung bewiesen ist. Die Zweite folgt in entsprechender Weise.

□

Unser Interesse gilt dem Fall, in dem $P(\lambda)$ und $P_{S(\lambda)}(\lambda)$ aus Lemma 3.8 mit $P_{(a,b)}(H(\lambda))$ bzw. $P_{(a,b)}(H_{S(\lambda)}(\lambda))$ übereinstimmen.
Sind $\dim P_{(a,b)}(H(\lambda))$ resp. $\dim P_{(a,b)}(H_{S(\lambda)}(\lambda))$ polynomiell beschränkt, können wir auf Kosten eines kleineren δ den Approximationsfehler exponentiell beschränken.
Polynomielle Schranken sind für $\dim P_{(a,b)}(H(\lambda))$ in einem anderen Kontext bewiesen worden. Wir nutzen Lemma 3.8, um sie auch für $\dim P_{(a,b)}(H_{S(\lambda)}(\lambda))$ zu etablieren.

Ein wichtiges Argument ist das folgende Lemma, das aus einer Zusammenfassung zweier Theoreme von Kato hervorgeht (siehe [Kat95, Thm. I-6.32, Thm. I-6.34]).

Lemma 3.9 *Seien P und Q selbstadjungierte Projektionen in einem Hilbertraum mit $\|(I-Q)P\| = \delta < 1$. Dann existiert eine selbstadjungierte Projektion Q_0 auf einen Teilraum von $\operatorname{ran} Q$ mit*

$$\|P - Q_0\| = \delta.$$

Insbesondere sind P und Q_0 unitär äquivalent und es gilt $\dim P \leq \dim Q$.

Satz 3.10 *Die Voraussetzungen von Satz 3.6 seien erfüllt. Insbesondere gilt dann die Voraussetzung 3.5, und wir fordern im Fall $W \in L_{\infty,0}$ zusätzlich die Existenz eines $c > 0$ und $\gamma > 0$ mit*

$$|W(x)| \leq c(1+|x|)^{-\gamma} \quad (x \in \mathbb{R}^\nu).$$

Dann folgt die Existenz eines $q \geq \frac{\nu}{2}$, so daß mit den Bezeichnungen aus 3.6 gilt

$$\dim P_{(a,b)}(H(\lambda)),\ \dim P_{(a,b)}(H_{S(\lambda)}(\lambda)) = O(\lambda^q) \quad (\lambda \longrightarrow \infty).$$

Beweis Wir beweisen zuerst die Behauptung für $\dim P_{(a,b)}(H(\lambda))$.
Sei zunächst $W \in L_{\infty,0}$ mit $|W(x)| \leq c(1+|x|)^{-\gamma}$. Weil nach Voraussetzung 2.5 $\sigma(H) \cap (a,b) = \emptyset$ und $H(\lambda) = H + \lambda W$ eine analytische Störung von H ist, gehören alle Eigenwerte von $H(\lambda)$ in (a,b) zu Eigenwertzweigen, die zuvor die Energieniveaus a oder b passiert haben müssen. Durch

$$\dim P_{(a,b)}(H(\lambda)) \leq \sum_{0<\mu<\lambda} \dim\ker(H(\mu)-a) + \dim\ker(H(\mu)-b)$$

erhalten wir also eine grobe obere Abschätzung für die Eigenwerte und ihre Vielfachheiten von $H(\lambda)$ in (a,b). Die rechte Seite der Ungleichung ist die Summe zweier Zählfunktionen, die unter unserer Voraussetzung in [Hem92a] untersucht wurden. Mit [Hem92a, Thm. 3.2] gilt für alle $q > \nu/\min(2,\gamma)$

$$\sum_{0<\mu<\lambda} \dim\ker(H(\mu)-a),\ \sum_{0<\mu<\lambda} \dim\ker(H(\mu)-b) = O(\lambda^q)\,.$$

Im zweiten Fall von Voraussetzung 3.5 existiert ein $c > 0$ mit $(W-c)_- \in L_{\infty,c}$. Aus dem min-max-Prinzip (siehe [RS78]) und der Nichtnegativität von V folgt die nachstehende Ungleichungskette für $\mathrm{supp}(W-c)_- \subset RB$ und λ hinreichend groß:

$$\begin{aligned}
\dim P_{(a,b)}(H(\lambda)) &= \dim P_{(a-c\lambda,b-c\lambda)}(H(\lambda)-c\lambda) \\
&\leq \dim P_{(-\infty,0)}(H-\lambda(W-c)_-) \\
&\leq \dim P_{(-\infty,0)}(H-\lambda\chi_{RB}\|(W-c)_-\|_\infty).
\end{aligned}$$

Nach Majorisierung von χ_{RB} durch eine nichtnegatives Potential aus C_c^∞ ist nach [RS78, Thm. XIII.79] die rechte Seite der Ungleichung, wegen der Weylschen Asymptotik, von der Ordnung $O\left(\lambda^{\nu/2}\right)$.

Die Behauptung für $\dim P_{(a,b)}(H_{S(\lambda)}(\lambda))$ beweisen wir indirekt.
Sei $0 < \varepsilon < \min\big(\mathrm{dist}((a,b),\sigma_e(H)),1\big)$. Es bezeichne $a' = a-\varepsilon$ und $b' = b+\varepsilon$. Wir wissen bereits, daß es ein $q \geq \frac{\nu}{2}$ und ein $C \geq 0$ gibt mit

$$\dim P_{(a',b')}(H(\lambda)) \leq C\lambda^q \quad (\lambda > 0)$$

und nehmen an, daß eine streng monotone Folge $\lambda_n \to \infty$ existiert mit

$$\dim P_{(a,b)}\big(H_{S(\lambda_n)}(\lambda_n)\big) \geq \lfloor (C+1)\lambda_n^q \rfloor \quad (n \in \mathbb{N}).$$

Mit $\lfloor x \rfloor$ werde dabei die größte ganze Zahl bezeichnet, die kleiner als x ist.

Durch die Wahl von Orthonormalsystemen von Eigenfunktionen und Fortsetzung durch den 0-Operator, können wir eine Familie von orthogonalen Projektionen $P_{S(\lambda)}(\lambda)$ konstruieren mit den Eigenschaften

$$\begin{aligned} \operatorname{ran} P_{S(\lambda)}(\lambda) &\subset \operatorname{ran} P_{(a,b)}(H_{S(\lambda)}(\lambda)) && (\lambda > 0), \\ P_{S(\lambda)}(\lambda) H_{S(\lambda)}(\lambda) &= H_{S(\lambda)}(\lambda) P_{S(\lambda)}(\lambda) && (\lambda > 0), \\ \dim P_{S(\lambda_n)}(\lambda_n) &= \lfloor (C+1)\lambda_n^q \rfloor && (n \in \mathbb{N}). \end{aligned}$$

Aus den Lemmata 3.8 und 3.9 folgt für große n

$$\lfloor (C+1)\lambda_n^q \rfloor = \dim P_{S(\lambda_n)}(\lambda_n) \leq \dim P_{(a',b')}(H(\lambda_n)) \leq C\lambda_n^q.$$

Diese Ungleichung steht aber im Widerspruch zu

$$1 = \lim_{n\to\infty} \frac{\lfloor (C+1)\lambda_n^q \rfloor}{(C+1)\lambda_n^q}$$

□

Satz 3.11 *Die Voraussetzungen von Satz 3.6 und 3.10 seien erfüllt. Mit den dortigen Bezeichnungen gilt:*
Es existiert ein $\delta > 0$, so daß für

$$J = (a,b), \quad J(\lambda,\delta) = \Big(a - \exp(-\delta\,\lambda^{\beta/2}), b + \exp(-\delta\,\lambda^{\beta/2})\Big)$$

im Grenzwert λ gegen ∞ gilt

$$\|(I - P_{J(\lambda,\delta)}(H(\lambda)))P_J(H_{S(\lambda)}(\lambda))\| = O\Big(\exp(-\delta\,\lambda^{\beta/2})\Big),$$

$$\|(I - P_{J(\lambda,\delta)}(H_{S(\lambda)}(\lambda)))P_J(H(\lambda))\| = O\Big(\exp(-\delta\,\lambda^{\beta/2})\Big).$$

Beweis Wir beweisen wieder nur die erste Gleichung.
Setzen wir $P_{S(\lambda)}(\lambda) = P_{(a,b)}(H_{S(\lambda)}(\lambda))$ so existieren nach Satz 3.10 reelle Zahlen $q \geq \frac{\nu}{2}$ und $C \geq 0$ mit

$$\dim P_{S(\lambda)}(\lambda) \leq C\lambda^q \quad (\lambda > 0).$$

Aus dem Lemma 3.8 können wir die Existenz eines $\delta_0 > 0$ und die Existenz einer weiteren Konstanten folgern, so daß wir mit geeigneter Wahl von C die folgende Ungleichung erhalten

$$\begin{aligned} \|\big(I - P_{(a-\varepsilon,b+\varepsilon)}(H(\lambda))\big)P_{(a,b)}(H_{S(\lambda)}(\lambda))\| \leq \\ \leq \quad C\lambda^q\varepsilon^{-1}\exp\left(-\delta_0\,\lambda^{\beta/2}\right) \quad (\lambda > 0). \end{aligned}$$

Für $\delta \in (0, \delta_0)$ und $\varepsilon = \exp\left(-\delta_0\,\lambda^{\beta/2}\right)$ folgt

$$\begin{aligned} &\|\big(I - P_{J(\lambda,\delta/2)}(H(\lambda))\big)P_J(H_{S(\lambda)}(\lambda))\| \leq \\ &\leq \|\big(I - P_{J(\lambda,\delta_0/2)}(H(\lambda))\big)P_J(H_{S(\lambda)}(\lambda))\| \\ &= O\left(\lambda^q \exp\left(-\tfrac{\delta_0}{2}\,\lambda^{\beta/2}\right)\right) = O\left(\exp\left(-\tfrac{\delta}{2}\,\lambda^{\beta/2}\right)\right), \end{aligned}$$

und die Behauptung gilt für alle δ aus $(0, \frac{\delta_0}{2})$. □

3.4 Interpretation und Modellprobleme

Wir fassen die bisherigen Voraussetzungen und Ergebnisse zu dem Haupttheorem dieses Kapitels zusammen.

Theorem 3.12 *Es seien*

1. $0 \leq V \in L_\infty$, a, $b \in \mathbb{R}$ *mit* $[a,b] \cap \sigma_e(H) = \emptyset$;
2. $W \in L_{\infty,loc}$ *und es gebe* $M \subset \mathbb{R}^\nu$ *abgeschlossen,* $d_0 > 0$ *und* $p \geq 0$, *so daß*

$$W_+ \geq d_0\,\mathrm{dist}(\cdot\,, M)^p(1 - \chi_M)$$

erfüllt ist;

3. *entweder* $c > 0$ *mit* $(W-c)_- \in L_{\infty,c}$ *oder* $c > 0$ *und* $\gamma > 0$ *mit* $|W(x)| \le c(1+|x|)^{-\gamma}$*;*
4. $d \in (0,1)$, $\alpha \in [0,1)$ *und* $S(\lambda) \subset \mathbb{R}^\nu$ *abgeschlossen mit kompaktem Rand und*

$$S(\lambda) \subset \left[\,\mathrm{dist}(\,\cdot\,,M) \ge d\lambda^{-\alpha/(p+2)}\right].$$

Dann existiert ein $\delta > 0$*, so daß mit den Bezeichnungen*

$$\begin{aligned}
&\beta = 1-\alpha,\ J = (a,b),\\
&J_-(\lambda,\delta) = \Big(a + \exp(-\delta\,\lambda^{\beta/2}), b - \exp(-\delta\,\lambda^{\beta/2})\Big),\\
&J_+(\lambda,\delta) = \Big(a - \exp(-\delta\,\lambda^{\beta/2}), b + \exp(-\delta\,\lambda^{\beta/2})\Big)
\end{aligned}$$

und λ *hinreichend groß die folgenden Behauptungen gelten:*

1. *die Operatoren* $H(\lambda)$ *und* $H_{S(\lambda)}(\lambda)$ *haben in* $[a,b]$ *kein wesentliches Spektrum,*

$$[a,b] \cap \sigma_e(H(\lambda)) = [a,b] \cap \sigma_e(H_{S(\lambda)}(\lambda)) = \emptyset;$$

2. *das diskrete Spektrum der Operatoren* $H(\lambda)$ *und* $H_{S(\lambda)}(\lambda)$ *im Intervall* (a,b) *liegt jeweils in einer exponentiell kleinen Umgebung des anderen, oder symbolisch*

$$\begin{aligned}
&\mathrm{dist}\big(\sigma(H(\lambda)) \cap J, \sigma(H_{S(\lambda)}(\lambda)) \cap J_+(\lambda,\delta)\big),\\
&\mathrm{dist}\big(\sigma(H(\lambda)) \cap J_+(\lambda,\delta), \sigma(H_{S(\lambda)}(\lambda)) \cap J\big) = O\Big(\exp(-\delta\,\lambda^{\beta/2})\Big);
\end{aligned}$$

3. *es existieren Orthogonalprojektionen*

$$P_{S(\lambda)}(\lambda) \le P_{J_+(\lambda,\delta)}(H_{S(\lambda)}(\lambda)), \quad P(\lambda) \le P_{J_+(\lambda,\delta)}(H(\lambda))$$

mit

$$\begin{aligned}
\|P_{S(\lambda)}(\lambda) - P_J(H(\lambda))\| &= O\Big(\exp(-\delta\,\lambda^{\beta/2})\Big),\\
\|P(\lambda) - P_J(H_{S(\lambda)}(\lambda))\| &= O\Big(\exp(-\delta\,\lambda^{\beta/2})\Big),
\end{aligned}$$

insbesondere ist $P_{S(\lambda)}(\lambda)$ *zu* $P_J(H(\lambda))$ *und* $P(\lambda)$ *zu* $P_J(H_{S(\lambda)}(\lambda))$ *unitär äquivalent;*

4. *die spektrale Vielfachheit im Intervall (a,b) läßt sich wechselseitig durch die Ungleichungen*

$$\begin{aligned}
&\dim P_{J_-(\lambda,\delta)}(H(\lambda)) \leq \dim P_J(H_{S(\lambda)}(\lambda)) \leq \dim P_{J_+(\lambda,\delta)}(H(\lambda)),\\
&\dim P_{J_-(\lambda,\delta)}(H_{S(\lambda)}(\lambda)) \leq \dim P_J(H(\lambda)) \leq \dim P_{J_+(\lambda,\delta)}(H_{S(\lambda)}(\lambda))
\end{aligned}$$

abschätzen.

Das Theorem 3.12 vermittelt unter den allgemeinen Voraussetzungen ein sehr komplettes Bild.
Die Ergebnisse lassen sich nur schwer verbessern, denn der Fall, in dem der Negativteil des Potentials auf einer kleinen Kugel größer als eine positive Konstante ist, ist in den Voraussetzungen enthalten. In diesem Fall gibt es keinen Grenzoperator und das diskrete Spektrum ist nicht stetig. Wir wissen sogar, daß in dieser Situation unendlich viele Eigenwertzweige von $H(\lambda)$ und also auch von $H_{S(\lambda)}(\lambda)$ das Energieniveau b passieren müssen [DH86, GS88].
In Satz 3.10 haben wir bewiesen, daß sich in dem Intervall (a,b) für große λ höchstens $O(\lambda^q)$ Eigenwerte inklusive Vielfachheiten befinden können. Verglichen mit den exponentiell kleinen Schranken in λ ist das eine sehr kleine Größe. Leider kann man von dieser polynomiellen Abschätzung nicht auf einen invers-polynomiellen Mindestabstand zwischen den diskreten Eigenwerten von z.B. $H(\lambda)$ schließen.
Wir werden sogar Situationen angeben können, in denen die Eigenwertzweige in Bündeln das Intervall (a,b) kreuzen, wobei der Abstand zwischen den individuellen Eigenwerten eines Bündels exponentiell klein in λ ist.

Unter praktischen Gesichtspunkten sind die Aussagen des voherigen Theorems sehr gut, denn die exponentiell kleinen Fehler lassen sich numerisch und experimentell nicht nachweisen. In diesem Sinne stimmen die spektralen Größen von $H(\lambda)$ mit denen von $H_{S(\lambda)}(\lambda)$ überein.

Fassen wir das Vorherige schlagwortartig zusammen, so besagt Theorem 3.12, daß man ungestraft Dirichletbedingungen in der Barriere plazieren kann, sofern man einen gewissen Sicherheitsabstand zum Rand von M beibehält. Wegen der Bedingung $S(\lambda) \nearrow \mathbb{R}^\nu \setminus M$, stellen sich für große Kopplungen Dirichletrandbedingungen auf dem Rand von M ein.

Wenn also nach der obigen Diskussion die Einführung von Dirichletbedingungen auf geeigneten Mengen S nicht stört, so stellt sich die Frage nach Bedingungen, unter denen man die Plazierung von Randdaten 0 nutzbringend einsetzen kann.

Ist z.B. $\operatorname{supp} W_-$ eine disjunkte Vereinigung von kompakten Mengen und trennt $S \subset \operatorname{supp} W_+$ und W_+ diese Brunnen und den unendlich fernen Punkt ∞ in geeigneter Weise, so ist das Spektrum von $H(\lambda)$ in (a,b) im wesentlichen durch $H_S(\lambda)$ bestimmt. Der Operator $H_S(\lambda)$ ist jedoch eine direkte Summe von Schrödinger-Operatoren mit Dirichlet-Randdaten in dem Träger der Barriere, die entweder auf einer offenen und beschränkten Umgebung der Brunnen oder auf einer offenen Umgebung des Punktes ∞ definiert sind.
Weil für unsere Argumentation die Menge S einen positiven – wenn auch sehr kleinen – Randabstand haben muß, besitzen die Vergleichsoperatoren einen Rest der Barriere in der Nähe der Dirichlet-Bedingung. Mindestens im Fall der relativ kompakten Umgebungen der Brunnen bleibt daher eine Konkurrenzsituation zwischen Brunnen und Restbarriere erhalten.

Möchte man genauere Informationen über den Verlauf von Eigenwertzweigen erhalten, so muß man die nunmehr getrennten Dirichletprobleme behandeln.
Man ist also in einer Situation, in der man einen Operator $H_S(\lambda)$ gegeben hat, und Auskunft über dessen spektrale Größen wünscht, wobei S jetzt zu einem der einzelnen Vergleichs-Operatoren passend gewählt sei. Theorem 3.12 erlaubt nun auch den umgekehrten Schluß von einem geeigneten Operator $H(\lambda)$ auf den Operator $H_S(\lambda)$, wobei wieder W nicht das Ausgangspotential zu sein braucht, sondern entsprechend modifiziert sein kann, so daß man einen Informationsgewinn erhält.

Wir haben uns also eine Vorstellung erarbeitet, wie die Eigenwertzweige von $H(\lambda)$ durch Vergleichsprobleme beschrieben werden können.
Trotz dieser konkreten Vorstellungen bleiben unsere Überlegungen vage, solange wir nicht Situationen herstellen können, in denen wir entweder Eigenwerte und deren Vielfachheiten berechnen können oder Kenntnisse von bekannten Problemen übertragen können.

Tatsächlich sind unsere Anforderungen an V und W zu diesem Zeitpunkt noch sehr allgemein, so daß wir Spielraum haben, um zu einfachen und damit berechenbaren Beispielen zu kommen.
So können wir $V = 0$ in einer Umgebung von $\operatorname{supp} W_-$ oder sogar von $\operatorname{supp} W$ annehmen, solange dies nicht periodische Potentiale V ausschließt.
Ist $W \in L_{\infty,c}$, können wir also $V = 0$ in einer Umgebung des Trägers von W voraussetzen. Gibt es eine abgeschlossene Teilmenge $S \subset \operatorname{supp} W_+$, so daß $\mathbb{R}^\nu \setminus S$ Vereinigung zweier zusammenhängender offener Mengen ist und ist W derartig, daß wir auf S Dirichletbedingungen einführen können, stellt sich im Grenzwert λ gegen Unendlich auf der beschränkten Komponente von $\mathbb{R}^\nu \setminus S$ eine Situation wie im Fall „tiefliegender Eigenwerte im semiklassischen Grenzwert“(siehe

[HS84, Sim84, HS96]) ein. Durch die Anzahl und Positionen der Brunnen von W kann man dann Einfluß auf die Vielfachheiten von Eigenwerten und das „Splitting“ von Eigenwertzweigen nehmen (siehe [HS84]).
Können wir hingegen $V = 0$ in einer Umgebung von $\operatorname{supp} W_-$ voraussetzen, hängt es nur noch von der Gestalt von W_- auf dieser Umgebung ab, wie gut sich die spektralen Größen der entsprechenden Vergleichsoperatoren berechnen lassen.

Wir stellen zwei einfache Modellprobleme heraus, bei denen ein Brunnen durch eine Barriere mit kompaktem Träger vom unendlich fernen Punkt ∞ getrennt wird. Für große Kopplungen wird dann das Spektrum von $H(\lambda)$ von zwei Vergleichsoperatoren beschrieben.
In den nachfolgenden Beispielen erfülle V die Voraussetzung 2.5. Zusätzlich sei $V = 0$ in einer Umgebung des Trägers von W. Wir listen nur W und die Vergleichsoperatoren auf.

Beispiel 3.13 Seien $p \geq 0$,

$$W = (2 - |\cdot|)_+^p \chi_{2B \setminus B} - \chi_B$$

und $r \in (1,2)$. Weiter verschwinde das Hintergrundpotential V in einer Umgebung von $\operatorname{supp} W$.
Dann wird das Spektrum von $H(\lambda)$ in (a,b) im Sinne von Theorem 3.12 für große Kopplungen λ durch die Überlagerung der Spektren der Operatoren

$$\begin{aligned} H + \lambda\,(2 - |\cdot|)^p \chi_{2B} \quad &\text{in} \quad L_2(\mathbb{R}^\nu), \\ -\Delta + \lambda\,(1 - 2\chi_B) \quad &\text{in} \quad L_2(\mathbb{R}^\nu). \end{aligned}$$

beschrieben.

Beispiel 3.14 Seien $2 > r > 1$ und $V = 0$ auf einer Umgebung von $2B$. Für $p \geq 0$ und

$$W = (2 - |\cdot|)_+^p \chi_{2B \setminus rB} + (|\cdot|^2 - 1)\chi_{rB}$$

wird das Spektrum von $H(\lambda)$ in (a,b) im Sinne von Theorem 3.12 für große Kopplungen λ durch die Überlagerung der Spektren der Operatoren

$$\begin{aligned} H + \lambda\,(\nu - |\cdot|)^p \quad &\text{in} \quad L_2(\mathbb{R}^\nu), \\ -\Delta + \lambda\,(|\cdot|^2 - 1) \quad &\text{in} \quad L_2(\mathbb{R}^\nu) \end{aligned}$$

beschrieben.

Die Störpotentiale W in den obigen Beispielen haben eine hohe Symmetrie, so daß wir im Fall, in dem V auf $\operatorname{supp} W$ verschwindet, mit entsprechend hoher Vielfachheit der Eigenwerte der Vergleichsprobleme rechnen müssen.
Im folgenden Kapitel werden wir hingegen zeigen, daß der Operator $H(\lambda)$ generisch nur einfache Eigenwerte hat.

Mit einer Diskussion des Verlaufs der Eigenwertzweige der Vergleichsprobleme werden wir diese Arbeit beschließen.

4 Ausweichen von Eigenwertzweigen

Ein wichtiger Aspekt des „Trapping and Cascading“-Bildes aus [GGH$^+$88] ist, daß die Eigenwertzweige des gestörten Schrödinger-Operators sich nicht überschneiden können.
Im Fall einer Raumdimension und gewöhnlicher Differentialgleichungen zweiter Ordnung ist dies eine Folgerung aus dem Satz von Picard-Lindelöf. In höheren Raumdimensionen ist es sehr wohl möglich, daß es zu einem Kopplungsparameter λ degenerierte Eigenwerte gibt, so daß sich die analytischen Eigenwertzweige schneiden oder sogar überlagern können bei genügend großer Symmetrie der Potentiale V und W.
Nach [Sim85] läßt sich durch eine kleine Störung der Symmetrie die Degenerierung der Eigenwerte aufheben.

Wir werden in diesem Kapitel zeigen, daß in einem geeigneten Raum die Menge der Potentiale W, für die $H(\lambda)$ degenerierte Eigenwerte in(a,b) besitzt, in einem topologischen Sinne verschwindend klein ist.
Topologisch klein soll heißen, daß sie eine höchstens abzählbare Vereinigung magerer Mengen ist, bzw. das Komplement dieser Menge eine residuale Teilmenge des Grundraums ist. Das Komplement enthält damit einen abzählbaren Schnitt von dichten offenen Mengen.

Wenn wir

$$\Phi(u,E,W) = (H-E+W)u, \quad \Phi^*(u,E,\lambda,W) = \Phi(u,E,\lambda W) \tag{4.1}$$

schreiben, so sind die entsprechenden Lösungen der Eigenwertgleichung Punkte der Banach-Mannigfaltigkeiten

$$[\Phi = 0], \quad [\Phi^* = 0].$$

Unter der Bedingung, daß wir die Störpotentiale W aus einem separablen Banachraum wählen, können wir mit Hilfe eines abstrakten Transversalitätssatzes zeigen, daß die Menge aller Parameter W, so daß

$$\Phi_W = \Phi(\cdot,\cdot,W), \quad \Phi^*_W = \Phi^*(\cdot,\cdot,\cdot,W)$$

transversal zu $\{0\}$ sind, eine residuale Teilmenge des Grundraumes sind.
Was man unter „transversal zu $\{0\}$“ zu verstehen hat, und daß dies die Einfachheit der Eigenwerte bedeutet, klären wir im folgenden Abschnitt.
Wir können damit unsere Behauptung durch eine Standard-Argumentation aus der Differentialtopologie beweisen (vergleiche [Hir76, Qui70, Uhl76]).

Unser Vorgehen orientiert sich an [Uhl76]. Der Ansatz von Frau Uhlenbeck hat den Vorteil, daß die zu überprüfenden Voraussetzungen sich in einfacher Weise aus der Struktur der Schrödinger-Operatoren ergeben, und daß sich mit den gleichen Techniken generische Eigenschaften der Eigenfunktionen beweisen lassen (siehe [Uhl76]).
Während [Uhl76] die passenden Antworten im Fall von Potentialstörungen gibt, scheint es im Fall von Gebietsstörungen angemessener, einen direkteren Zugang zu wählen [HL, Tey99]. In [Tey99] wird außerdem weiter präzisiert, wie dünn im Sinne der Differentialtopologie die Ausnahmemenge ist.

Aufgrund unserer Problemstellung können wir die weitere Argumentation ziemlich elementar halten und Begriffe aus der Theorie der Banach-Mannigfaltigkeiten vermeiden. Die Argumentationsschritte sind dennoch durch diese Theorie motiviert. Unser Beitrag läßt sich damit als eine nachträgliche Motivation für [Uhl76] interpretieren.

Wir haben einleitend von einem geeigneten Raum gesprochen, aus dem wir unsere Störpotentiale wählen.
Der geeignete Raum muß verschiedene Anforderungen erfüllen, damit wir den abstrakten Transversalitätssatz (Satz 4.16) und die eindeutige Fortsetzbarkeit von Eigenlösungen (Satz 2.4) gewinnbringend einsetzen können.
Wegen des Transversalitätssatzes muß er separabel sein. Die Eindeutige Fortsetzbarkeit gilt nach Satz 2.4 für beschränkte Potentiale. Weiter muß der Raum genügend Potentiale enthalten, damit eine Degenerierung von Eigenwerten bzw. Eigenwertzweigen aufgehoben werden kann.
Wir setzen für $W_0 \in L_{\infty,0}$, $x_0 \in \mathbb{R}^\nu$ und $\varepsilon > 0$

$$\mathscr{C}_{W_0} = \operatorname{lin}\big(\{W_0\} \cup C(B(x_0,\varepsilon))\big) \subset L_{\infty,0}.$$

In diesem Kapitel beweisen wir die folgenden Theoreme.

Theorem 4.1 *Seien $0 \leq V \in L_\infty$ und a, $b \in \mathbb{R}$ mit $\sigma_e(H) \cap [a,b] = \emptyset$. Weiter sei $W_0 \in L_{\infty,0}$.*
Dann ist für $x_0 \in \mathbb{R}^\nu$ und $\varepsilon > 0$ die Menge der Potentiale $W \in \mathscr{C}_{W_0}$, so daß alle Eigenwerte von $H+W$ in (a,b) einfach sind, residual in $\mathscr{C}_{W_0}$.

Theorem 4.2 *Seien $0 \leq V \in L_\infty$ und a, $b \in \mathbb{R}$ mit $\sigma_e(H) \cap [a,b] = \emptyset$. Weiter sei $W_0 \in L_{\infty,0}$.*
Dann liegt für $x_0 \in \mathbb{R}^\nu$ und $\varepsilon > 0$ die Menge der Potentiale $W \in \mathscr{C}_{W_0}$, so daß für alle $\lambda > 0$ die Eigenwerte von $H(\lambda)$ in (a,b) einfach sind, residual in $\mathscr{C}_{W_0}$.

Bemerkung 4.3 Die Behauptungen der Theoreme 4.1 und 4.2 sind ebenfalls wahr für Schrödinger-Operatoren $H_S(\lambda)$ mit Dirichlet-Randdaten auf einer kompakten Teilmenge $S \subset \mathbb{R}^\nu$, wenn wir zusätzlich $B(x_0, \varepsilon) \subset \mathbb{R}^\nu \setminus S$ voraussetzen und in der folgenden Argumentation $\mathscr{H}^2$ (bzw. L_2) durch $D(H_S)$ (bzw. $L_2(\mathbb{R}^\nu \setminus S)$) ersetzen.

Residuale Teilmengen sind unter anderem dichte Teilmengen. Wir erhalten aus den vorherigen Theoremen die nachstehenden Korollare.

Korollar 4.4 *Seien $0 \leq V \in L_\infty$ und a, $b \in \mathbb{R}$ mit $\sigma_e(H) \cap [a,b] = \emptyset$. Weiter sei $r > 0$.*
Dann liegt die Menge der Potentiale $W \in L_\infty(rB)$ ($L_{\infty,0}$), so daß alle Eigenwerte von $H+W$ in (a,b) einfach sind, dicht in $L_\infty(rB)$ ($L_{\infty,0}$).

Korollar 4.5 *Seien $0 \leq V \in L_\infty$ und a, $b \in \mathbb{R}$ mit $\sigma_e(H) \cap [a,b] = \emptyset$. Weiter sei $r > 0$.*
Dann liegt die Menge der Potentiale $W \in L_\infty(rB)$ ($L_{\infty,0}$), so daß für alle $\lambda > 0$ die Eigenwerte von $H(\lambda)$ in (a,b) einfach sind, dicht in L_∞ ($L_{\infty,0}$).

4.1 Reguläre Werte

In diesem Abschnitt erklären wir, was „transversal zu $\{0\}$“ oder gleichbedeutend „0 ist ein regulärer Wert“ bedeuten soll. Genauer gilt zunächst unser Interesse den regulären Werten von C^k-Abbildungen zwischen zwei Banachräumen.

Wir verweisen für die Analysis in Banachräumen auf [Lan69], und erinnern an dieser Stelle nur an einige Begriffe und Zusammenhänge.
Eine Abbildung

$$f : U \subset \mathbf{E} \longrightarrow \mathbf{F}$$

von einer offenen Teilmenge U des Banachraums $\mathbf{E}$ in den Banachraum $\mathbf{F}$ ist differenzierbar, wenn sie in jedem $x \in U$ Frechét-differenzierbar ist, mit Ableitung $Df(x)$ im Banachraum $\mathscr{L}(\mathbf{E},\mathbf{F})$ der stetigen Operatoren von $\mathbf{E}$ nach $\mathbf{F}$. Die Abbildung ist stetig differenzierbar oder in Zeichen $f \in C^1(U)$, wenn sie differenzierbar ist und

$$Df : U \longrightarrow \mathscr{L}(\mathbf{E},\mathbf{F})$$

stetig ist. Weil $\mathscr{L}(\mathbf{E},\mathbf{F})$ wieder ein Banachraum ist, kann man wie im endlichdimensionalen Fall fortfahren und den Raum der k-mal stetig differenzierbaren Funktionen $C^k(U)$ definieren.
Die k-te Ableitung von $f \in C^k(U)$ an der Stelle $x \in U$ läßt sich mit einer stetigen k-stelligen multilinearen Abbildung

$$D^k f(x) : \mathbf{E} \times \cdots \times \mathbf{E} \longrightarrow \mathbf{F}$$

identifizieren.

Wegen der Taylorformel sind alle stetigen Multilinearformen unendlich oft differenzierbar. Nach Gleichung (4.1) sind Φ und Φ^* Summe von Multilinearformen. Offenbar gilt die folgende Proposition.

Proposition 4.6 *Seien $0 \leq V \in L_\infty$ und $a, b \in \mathbb{R}$. Weiter sei $W_0 \in L_{\infty,0}$. Dann sind die Abbildungen*

$$\begin{aligned} \Phi &: \mathscr{H}^2 \times (a,b) \times \mathscr{C}_{W_0} \longrightarrow L_2, \\ \Phi^* &: \mathscr{H}^2 \times (a,b) \times (0,\infty) \times \mathscr{C}_{W_0} \longrightarrow L_2, \end{aligned}$$

mit Φ und Φ^* wie in Gleichung (4.1), unendlich oft differenzierbar.

Neben der Kenntnis der Differenzierbarkeitsordnung ist eine Darstellung der Ableitung von Interesse. Ableiten heißt dabei eine affin lineare Approximation aufzusuchen.
Ist der zugrundeliegende Banachraum die direkte Summe von Banachräumen, so läßt sich mit Hilfe des üblichen Matrix-Vektor-Produkts die Frechét-Ableitung durch die Jakobi-Matrix der partiellen Ableitungen darstellen. Wie im endlichdimensionalen Fall ist eine Abbildung genau dann k-mal stetig differenzierbar, wenn sie k-mal stetig partiell differenzierbar ist.
In unseren Fall gilt für $W_0 \in L_{\infty,0}$ und $W \in \mathscr{C}_{W_0}$:

$$\begin{aligned} &D\Phi(u,E,W) = \\ &\quad = (H - E + W, -u, u) : \mathscr{H}^2 \times \mathbb{R} \times \mathscr{C}_{W_0} \longrightarrow L_2, \\ &D\Phi^*(u,E,\lambda,W) = \\ &\quad = (H - E + \lambda W, -u, Wu, \lambda u) : \mathscr{H}^2 \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \mathscr{C}_{W_0} \longrightarrow L_2. \end{aligned}$$

Insbesondere sind bei festem $W \in \mathscr{C}_{W_0}$ die Ableitungen von Φ_W bzw. Φ^*_W gegeben durch:

$$D\Phi_W(u,E) = (H - E + W, -u) : \mathscr{H}^2 \times \mathbb{R} \longrightarrow L_2,$$
$$D\Phi_W^*(u,\mathbf{E},\lambda) = (H - E + \lambda W, -u, Wu) : \mathscr{H}^2 \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow L_2.$$

Der folgende Satz ist eine Folgerung aus dem Satz über implizite Funktionen (siehe [Lan69, VI, §2]).

Satz 4.7 *Seien* $\mathbf{E}$, $\mathbf{F}$ *Banachräume und* $U \subset \mathbf{E}$ *offen. Die Ableitung der Abbildung* $f \in C^k(U,\mathbf{F})$ *in* $x_0 \in U$ *sei surjektiv und* $\ker Df(x_0)$ *sei in* $\mathbf{E}$ *komplementiert, d.h. zu* $\mathbf{E}_1 = \ker Df(x_0)$ *gibt es einen abgeschlossenen Teilraum* $\mathbf{E}_2 \subset \mathbf{E}$ *mit* $\mathbf{E} = \mathbf{E}_1 \oplus \mathbf{E}_2$.
Dann existieren

1. *offene Teilmengen* $V_1 \subset \mathbf{E}_1$, $V_2 \subset \mathbf{E}_2$,
2. *ein* C^k*-Diffeomorphismus* $h : V_1 \times V_2 \longrightarrow U' \subset U$ *und*
3. *ein* C^k*-Diffeomorphismus* $\tilde{f} : V_2 \longrightarrow f(U')$,

so daß gilt

$$f(h(x_1,x_2)) = \tilde{f}(x_2).$$

Der Satz hat zwei für uns interessante Konsequenzen. Zum Einen ist für eine C^k-Abbildung f die Menge der Punkte x, an denen die Ableitung $Df(x)$ surjektiv ist, offen; zum Anderen gewinnt man durch diesen Satz in einer Umgebung von x_0 eine Darstellung der Menge $[f = f(x_0)]$. In der Sprechweise der Differentialgeometrie hat man eine Karte gewonnen.

Wir nehmen die vorherige Anmerkung als Anlaß für die folgende Definition.

Definition 4.8 Seien $\mathbf{E}$, $\mathbf{F}$ Banachräume, $U \subset \mathbf{E}$ offen und $f \in C^k(U,\mathbf{F})$.
Ein Punkt $x \in U$ heißt *regulärer Punkt* für f, wenn $Df(x)$ surjektiv ist und $\ker Df(x)$ in $\mathbf{E}$ komplementiert ist.
Ein $y \in \mathbf{F}$ heißt *regulärer Wert* für f, wenn $y \notin f(U)$ oder alle Urbilder von y reguläre Punkte von f sind.

Das folgende Lemma ist gleichzeitig ein Beispiel für reguläre Werte und ein Beweisschritt in den Beweisen der Theoreme 4.1, 4.2.

Satz 4.9 *Seien* $0 \leq V \in L_\infty$ *und* a, $b \in \mathbb{R}$ *mit* $\sigma_e(H) \cap [a,b] = \emptyset$. *Weiter sei* $W_0 \in L_{\infty,0}$.
Dann ist 0 *ein regulärer Wert für die Abbildungen*

$$\Phi : \mathscr{H}^2 \times (a,b) \times \mathscr{C}_{W_0} \longrightarrow L_2,$$
$$\Phi^* : \mathscr{H}^2 \times (a,b) \times (0,\infty) \times \mathscr{C}_{W_0} \longrightarrow L_2,$$

Beweis Wir beweisen zunächst, daß $D\Phi$ auf $[\Phi = 0]$ surjektiv ist.

Sei $(u,E,W) \in \mathscr{H}^2 \times (a,b) \times \mathscr{C}_{W_0}$ mit

$$\Phi(u,E,W) = (H - E + W)u = 0.$$

Weiter sei $h \in \operatorname{ran}(D\Phi(u,E,W))^\perp$. Für alle $(\tilde{u},\tilde{E},\tilde{W}) \in \mathscr{H}^2 \times \mathbb{R} \times \mathscr{C}_{W_0}$ gilt dann

$$0 = \int (H - E + W)\tilde{u}h\,dx - \tilde{E}\int uh\,dx + \int \tilde{W}uh\,dx.$$

Setzen wir $\tilde{E} = 0$, $\tilde{W} = 0$ und variieren $\tilde{u} \in D(H)$, so folgt aus der Selbstadjungiertheit von $H - E + W$:

$$h \in D(H), \quad (H + W)h = Eh.$$

Setzen wir $\tilde{u} = 0$, $\tilde{E} = 0$, so gilt

$$\int \tilde{W}uh\,dx = 0 \quad (\tilde{W} \in \mathscr{C}_{W_0}).$$

Weil $C_c^\infty(K(x_0,\varepsilon))$ eine Teilmenge von $\mathscr{C}_{W_0}$ ist, folgt punktweise fast überall auf $K(x_0,\varepsilon)$

$$uh = 0.$$

Die Funktionen u und h sind Eigenfunktionen von Schrödinger-Operatoren. Nach dem Kato-Simon-Theorem [RS78, Thm. XIII.38] sind sie damit Hölder-stetig. Aus der Stetigkeit von u und aus Satz 2.4 folgt, daß die Menge $[u \neq 0]$ offen und dicht ist. Wegen der vorherigen Gleichung und der Stetigkeit von h verschwindet h auf $B(x_0,\varepsilon)$. Aus Satz 2.4 folgt dann, daß h bereits auf dem $\mathbb{R}^\nu$ verschwindet.

Die Surjektivität von $D\Phi^*$ auf $[\Phi^* = 0]$ folgt mit der Kettenregel aus dem Vorherigen und der Surjektivität von $D(\lambda W) = (W,\lambda) \in \mathscr{L}(\mathscr{C}_{W_0} \times \mathbb{R}, \mathscr{C}_{W_0})$.

Wenden wir uns nun der Komplementiertheit von $\ker D\Phi$ auf $[\Phi = 0]$ zu. Sei $(u,E,W) \in \mathscr{H}^2 \times (a,b) \times \mathscr{C}_{W_0}$ mit $\Phi(u,E,W) = 0$.
Wir geben ein abgeschlossenes algebraisches Komplement von

$$\begin{aligned}&\ker(H-E+W,-u,u) = \\ &\quad = \{(\tilde{u},\tilde{E},\tilde{W}) \in \mathscr{H}^2 \times \mathbb{R} \times \mathscr{C}_{W_0};\, (H-E+W)\tilde{u} - \tilde{E}u = -\tilde{W}u\}\end{aligned}$$

an.

Sei $(I-P)$ die Orthogonalprojektion auf $\operatorname{ran}(H-E+W) \oplus \mathbb{R}u \subset L_2$. Aus der Surjektivität von $D\Phi(u,E,W)$ folgt die Surjektivität von

$$P(u\,\cdot\,) : \mathscr{C}_{W_0} \longrightarrow \operatorname{ran} P,\, \tilde{W} \longmapsto P(u\tilde{W}),$$

und wir können aus

$$\operatorname{codim} \ker P(u\,\cdot\,) = \dim \operatorname{ran} P < \infty$$

die Existenz abgeschlossener Teilräume $\mathbf{C}_1$, $\mathbf{C}_2 \subset \mathbf{C} = \mathscr{C}_{W_0}$ folgern mit

$$\mathbf{C}_1 = \ker P(u(\,\cdot\,)), \quad \mathbf{C} = \mathbf{C}_1 \oplus \mathbf{C}_2.$$

Der Raum $\mathbf{H} = \mathscr{H}^2 \oplus \mathbb{R}$ ist ein Hilbertraum und wir finden ebenfalls abgeschlossene Teilräume $\mathbf{H}_1$, $\mathbf{H}_2 \subset \mathbf{H}$ mit

$$\mathbf{H}_1 = \ker(H-E+W,-u), \quad \mathbf{H} = \mathbf{H}_1 \oplus \mathbf{H}_2.$$

Es ist nun leicht zu verifizieren, daß

$$\mathbf{H}_2 \times \{0\} \oplus \{0\} \times \mathbf{C}_2$$

ein algebraisches Komplement von $\ker(H-E+W,-u,u)$ und ein abgeschlossener Teilraum von $\mathbf{H} \times \mathbf{C}$ ist.

Die Komplementiertheit von $\ker D\Phi^*$ auf $[\Phi^* = 0]$ folgt ganz analog. $\square$

Nachdem wir den Begriff des regulären Wertes eingeführt haben, stellen wir in den nachstehenden Lemmata den Zusammenhang zu unserer ursprünglichen Fragestellung her.

Lemma 4.10 *Seien $0 \leq V \in L_\infty$ und a, $b \in \mathbb{R}$ mit $\sigma_e(H) \cap [a,b] = \emptyset$. Weiter sei $W \in L_{\infty,0}$.*
Dann sind äquivalent:

1. *0 ist ein regulärer Wert für* $\Phi_W : \mathscr{H}^2 \times (a,b) \longrightarrow L_2$*;*
2. *Alle Eigenwerte von* $H+W$ *in* (a,b) *sind einfach.*

Beweis Sei $0 = \Phi_W(u,E) = (H-E+W)u$. Die Ableitung von Φ_W an der Stelle (u,E) lautet $D\Phi_W(u,E) = (H-E+W,-u)$.
Der Kern von $D\Phi_W(u,E)$ ist ein abgeschlossener Teilraum eines Hilbertraumes und damit komplementiert.
Es ist

$$\operatorname{ran}(H-E+W,-u) = \operatorname{ran}(H-E+W) \oplus \mathbb{R}u.$$

Aus

$$L_2 = \operatorname{ran}(H-E+W) \oplus \operatorname{ran} P_{\{0\}}(H-E+W),$$

folgt die behauptete Äquivalenz. □

Lemma 4.11 *Seien* $0 \leq V \in L_\infty$ *und* $a,\, b \in \mathbb{R}$ *mit* $\sigma_e(H) \cap [a,b] = \emptyset$.
Für $W \in L_{\infty,0}$ *gelte:*
0 *ist ein regulärer Wert von* $\Phi_W^* : \mathscr{H}^2 \times (a,b) \times (0,\infty) \longrightarrow L_2$.
Dann gilt:
Für alle $\lambda > 0$ *sind die Eigenwerte von* $H(\lambda)$ *in* (a,b) *einfach.*

Beweis Es sei $0 = \Phi_W^*(u,E,\lambda) = (H-E+\lambda W)u$. Wir setzen die Surjektivität von

$$D\Phi_W^*(u,E,\lambda) = (H-E+\lambda W,-u,-Wu) \in \mathscr{L}(\mathscr{H}^2 \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}, L_2)$$

voraus.

Sei $P = P_{\{0\}}(H-E+\lambda W)$ die Spektralprojektion auf den Kern K des Operators $(H-E+\lambda W)$. Aufgrund der Voraussetzungen ist

$$PD\Phi_W^*(u,E,\lambda) : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \operatorname{lin}(u,Wu)$$

surjektiv und die Spektralprojektion P hat höchstens die Dimension 2.

Weil die Abbildung PWP selbstadjungiert auf $K = \operatorname{lin}(u,PWu)$ ist, besitzt sie einen Eigenvektor $u_0 \in K$. Es ist ebenfalls $0 = \Phi_W^*(u_0,E,\lambda)$. Der Wert 0 ist ein regulärer Wert für Φ_W^* und wie oben folgt die Surjektivität von

$$PD\Phi_W^*(u_0,E,\lambda) : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \operatorname{lin}(u_0,PWPu_0).$$

Es ist $K = \operatorname{lin}(u_0,PWPu_0) = \operatorname{lin}(u_0)$ eindimensional. □

4.2 Satz von Smale

Der Satz von Smale liefert ein Beweisargument für den Transversalitätssatz 4.16. Wir nutzen diesen Abschnitt um die Begriffe im Zusammenhang dieses Satzes zu klären und weitere Beweisschritte der Theoreme 4.1 und 4.2 auszuführen.

Der Satz von Smale verallgemeinert den Satz von Sard ([Hir76, Thm. 1.1.3]) auf Abbildungen zwischen Banachräumen. Smale hat nach [Abr63] zu diesem Zweck den Begriff der Fredholm-Abbildung entwickelt.

Definition 4.12 Seien $\mathbf{E}$, $\mathbf{F}$ Banachräume, $U \subset \mathbf{E}$ offen und $f \in C^k(U, \mathbf{F})$.
Wir sagen f *ist eine C^k-Fredholm-Abbildung*, wenn für jedes $x \in U$ die Ableitung $Df(x)$ ein Fredholm-Operator ist, d.h. für jedes $x \in U$ ist

1. $\operatorname{ran} Df(x) \subset \mathbf{F}$ abgeschlossen,
2. $\operatorname{codim} \operatorname{ran} Df(x)$ endlich und
3. $\dim \ker Df(x)$ endlich.

Der Index von f ist definiert durch

$$\operatorname{ind} f := \operatorname{ind} Df := \dim \ker Df - \operatorname{codim} Df.$$

Weil für eine C^k-Fredholm-Abbildung $\dim \ker Df$ und $\operatorname{codim} \operatorname{ran} Df$ endlich sind, sind $\ker Df$ und $\operatorname{ran} Df$ in den entsprechenden Banachräumen komplementiert. Der Index einer Fredholm-Abbildung ist stetig und damit konstant auf Zusammenhangskomponenten des Definitionsbereichs.

Der folgende Satz ist hilfreich bei der Bestimmung des Index einer C^k-Fredholm-Abbildung. Für den Beweis verweisen wir auf [Lan69, IX, §2, Thm. 7].

Satz 4.13 *Seien* $\mathbf{E}$, $\mathbf{F}$ *und* $\mathbf{G}$ *Banachräume. Weiter seien die linearen Operatoren* $S \in \mathscr{L}(\mathbf{E}, \mathbf{F})$ *und* $T \in \mathscr{L}(\mathbf{F}, \mathbf{G})$ *Fredholm-Operatoren.*
Dann ist $TS \in \mathscr{L}(\mathbf{E}, \mathbf{G})$ *ein Fredholm-Operator mit*

$$\operatorname{ind} TS = \operatorname{ind} T + \operatorname{ind} S.$$

Wie im vorherigen Abschnitt dient das folgende Lemma gleichzeitig der Illustration des eben eingeführten Begriffs und dem Beweis der Theoreme 4.1 und 4.2.

Lemma 4.14 *Seien* $0 \leq V \in L_\infty$ *und* $a,\ b \in \mathbb{R}$ *mit* $\sigma_e(H) \cap [a,b] = \emptyset$. *Weiter sei* $W \in L_{\infty,0}$.
Dann sind die Abbildungen

$$\begin{aligned}
&\Phi_W(u,E) : \mathscr{H}^2 \times (a,b) \longrightarrow L_2,\\
&\Phi_W^*(u,E,\lambda) : \mathscr{H}^2 \times (a,b) \times (0,\infty) \longrightarrow L_2
\end{aligned}$$

C^∞*-Fredholm-Abbildungen mit* $\operatorname{ind}\Phi_W = 1$ *und* $\operatorname{ind}\Phi_W^* = 2$.

Beweis Wir stellen die Ableitungen von Φ_w und Φ_W^* als Komposition von Fredholm-Operatoren dar und berechnen den Index.

Mit der Subtraktion minus : $L_2 \times L_2 \longrightarrow L_2$ können wir schreiben

$$\begin{aligned}
&D\Phi_W(u,E) = \operatorname{minus}((H-E+W)\times u);\\
&D\Phi_W^*(u,E,\lambda) = \operatorname{minus}(D\Phi_{\lambda W}(u,E)\times Wu).
\end{aligned}$$

Der lineare Operator minus : $L_2 \times \mathbb{R}u \longrightarrow L_2$ ist surjektiv mit Kern $\mathbb{R}(u,u)$. Er ist damit ein Fredholm-Operator mit Index 1.

Die Operatoren $H-E+W$ bzw. $H-E+\lambda W$ sind auf dem Definitionsbereich $D(H) = \mathscr{H}^2$ in L_2 selbstadjungiert und es gelten die Zerlegungen

$$\begin{aligned}
&L_2 = \operatorname{ran}(H-E+W) \oplus \ker(H-E+W),\\
&L_2 = \operatorname{ran}(H-E+\lambda W) \oplus \ker(H-E+\lambda W).
\end{aligned}$$

Weil wir $E \in (a,b)$ und $W \in L_{\infty,0}$ H-kompakt gewählt haben, sind die Kerne $\ker(H-E+W)$, $\ker(H-E+\lambda W)$ endlichdimensional. Dies und die obige Zerlegung impliziert, daß die Operatoren $H-E+W$ bzw. $H-E+\lambda W$ Fredholm-Operatoren von $\mathscr{H}^2$ nach L_2 mit Index 0 sind.

Wir haben also eine Darstellung der Ableitungen von $D\Phi_W$ und $D\Phi_W^*$ als Komposition von Fredholm-Operatoren gefunden. Nach Satz 4.13 sind die Ableitungen von Φ_W und Φ_W^* Fredholm-Operatoren mit Index

$$\begin{aligned}
\operatorname{ind} D\Phi_W(u,E) &=\\
&= \operatorname{ind}(\operatorname{minus} : L_2 \times \mathbb{R}u \longrightarrow L_2)\\
&\quad + \operatorname{ind}((H-E+W)\times u : \mathscr{H}^2 \times \mathbb{R} \longrightarrow L_2 \times \mathbb{R}u) = 1,\\
\operatorname{ind} D\Phi_W^*(u,E,\lambda) &=\\
&= \operatorname{ind}(\operatorname{minus} : L_2 \times \mathbb{R}Wu \longrightarrow L_2)\\
&\quad + \operatorname{ind}(D\Phi_W(u,E)\times Wu : \mathscr{H}^2 \times \mathbb{R}^2 \longrightarrow L_2 \times \mathbb{R}Wu) = 2.
\end{aligned}$$

□

Wir schließen diesen Abschnitt mit dem Zitat des Satzes von Smale (siehe [Abr63, §16] bzw. [Sma65]).

Satz 4.15 (Satz von Smale) *Seien* $\mathbf{E}$, $\mathbf{F}$ *Banachräume und* $U \subset \mathbf{E}$ *offen. Der Banachraum* $\mathbf{E}$ *sei zusätzlich separabel. Weiter sei* $f \in C^k(U, \mathbf{F})$ *eine* C^k*-Fredholm-Abbildung mit*

$$k > \max(\operatorname{ind} f, 0).$$

Dann ist die Menge aller regulären Werte von f *eine residuale Teilmenge von* $\mathbf{F}$.

In den angegebenen Quellen [Abr63, Sma65] findet man eine Formulierung des Satzes für C^k-Fredholm-Abbildungen zwischen Banach-Mannigfaltigkeiten. Satz 4.15 ist ein Spezialfall dieser Sätze. Die dortigen Beweise lassen sich ohne Modifikationen auf Fredholm-Abbildungen zwischen Banachräumen übertragen, weil sie auf einer lokalen Darstellung wie in Satz 4.7 beruhen.
Der zentrale Beweisgedanke ist zu zeigen, daß das Komplement der regulären Werte leeres Inneres hat. Man kann zeigen, daß Fredholm-Abbildungen lokal abgeschlossen sind. Nach Satz 4.7 ist die Menge der regulären Punkte offen. Wir stellen eine Abzählbarkeitsbedingung an die Topologie von $\mathbf{E}$, damit wir aus dem Vorherigen folgern können, daß das Komplement der regulären Werte eine abzählbare Vereinigung von mageren Mengen ist.

4.3 Parametrischer Transversalitätssatz

In diesem Abschnitt beweisen wir eine elementare Version eines Satzes aus der Transversalitätstheorie.
Die Grundidee der Transversalitätstheorie besteht darin, daß das transversale Schneiden von zwei C^k-Abbildungen stabil unter kleinen Störungen ist und daß nichttransversales Schneiden durch eine kleine Störung wieder aufgehoben werden kann (vergleiche [Abr63]).
Formuliert man die obige Idee etwas anders, so liegen die Abbildungen, die eine vorgegebene C^k-Abbildung oder Untermannigfaltigkeit transversal schneiden, dicht in der Menge der C^k-Morphismen bezüglich einer geeigneten Topologie (vergleiche [Hir76, Thm. 2.1]).
Der Zusatz „parametrisch“ in der Überschrift bezieht sich darauf, daß wir eine parametrisierte Menge von C^k-Abbildungen betrachten, und die Dichtheit von

Parametern zeigen, deren entsprechende C^k-Morphismen transversal zu $\{z\}$ sind (vergleiche [Hir76, Thm. 2.7] bzw. [Abr63, Thm. 19.1]).

Wie in den vorherigen Abschnitten verzichten wir auf eine Präzisierung des Begriffs „transversal" und vermeiden differentialtopologische Begriffe so weit wie möglich.

Satz 4.16 *Seien* $\mathbf{E}$, $\mathbf{F}$, $\mathbf{G}$ *Banachräume und* $U \subset \mathbf{E}$, $V \subset \mathbf{F}$ *offen. Zusätzlich seien* $\mathbf{E}$ *und* $\mathbf{F}$ *separabel.*
Weiter seien $F : U \times V \longrightarrow \mathbf{G}$ *eine* C^k*-Abbildung und* $z \in \mathbf{G}$ *mit*

1. z *ist ein regulärer Wert von* F*;*
2. *Für alle* $y \in V$ *ist* $F_y = F(\,\cdot\,, y)$ *eine* C^k*-Fredholm-Abbildung mit* $\operatorname{ind} F_y < k$.

Dann ist die Menge aller $y \in V$*, so daß* z *ein regulärer Wert von* F_y *ist, eine residuale Teilmenge von* V*.*

Die Beweise der Theorem 4.1 und 4.2 sind nun offensichtlich.
Im Vorfeld haben wir bereits die Gültigkeit der Voraussetzungen für Φ und Φ^* in Propositon 4.6 und Satz 4.9 bewiesen. Der Zusammenhang zwischen der Regularität des Wertes 0 für Φ_W resp. Φ_W^* und der Einfachheit des Spektrums ist Inhalt der Lemmata 4.10 und 4.11.

Wenden wir uns dem Beweis des Transversalitätssatzes zu. Die zentrale Beweisidee ist zu zeigen, daß die Einschränkung der Projektion $\Pi_{\mathbf{F}} : \mathbf{E} \times \mathbf{F} \longrightarrow \mathbf{F}$ auf $[F = z]$ die Voraussetzungen des Satzes von Smale erfüllt. Weil wir eine differentialtopologische Formulierung vermieden haben, rechnen wir in lokalen Koordinaten. Vergleicht man die Argumentation mit der aus [Qui70], so ergeben sich keine Einschränkungen, weil wir im Prinzip wie Quinn ein Pullback-Diagramm bilden.

Beweis von Satz 4.16
Nach Satz 4.7 existiert eine offene Überdeckung von $[F = z]$, so daß für U' aus dieser Überdeckung eine Zerlegung $\mathbf{E} \oplus \mathbf{F} = \mathbf{E}_1 \oplus \mathbf{E}_2$, offene Mengen $V_1 \subset \mathbf{E}_1$, $V_2 \subset \mathbf{E}_2$ und C^k-Diffeomorphismen $h : V_1 \times V_2 \longrightarrow U'$, $\tilde{F} : V_2 \longrightarrow F(U')$ existieren mit

$$F(h(x_1, x_2)) = \tilde{F}(x_2) \quad (x_1 \in V_1, x_2 \in V_2).$$

Wir können ohne Einschränkungen annehmen, daß V_1, V_2 Nullumgebungen sind und daß gilt

$$F(h(\cdot,0)) = \tilde{F}(0) = z. \tag{4.2}$$

Wir zeigen für U' wie oben, daß $\Pi_{\mathbf{F}} \circ h(\cdot,0)$ eine C^k-Fredholm-Abbildung ist mit Index kleiner k und daß die regulären Werte y von $\Pi_{\mathbf{F}} \circ h(\cdot,0)$ diejenigen Parameter sind, für die z ein regulärer Wert von F_y ist.
Die regulären Werte von $\Pi_{\mathbf{F}} \circ h(\cdot,0)$ sind dann nach Smale eine residuale Teilmenge von $\mathbf{F}$.
Weil die Topologien von $\mathbf{E}$ und $\mathbf{F}$ abzählbar erzeugt sind, ist dieses lokale Argument bereits hinreichend, denn wir können aus der obigen Überdeckung eine abzählbare Teilüberdeckung auswählen.

In den folgenden Argumentationsschritten lassen wir die Funktionsargumente weg. Der Grundraum hat zwei Darstellungen als direkte Summen. Die partiellen Ableitung indizieren wir mit 1 oder 2 und bemerken, daß aus dem Kontext die zugrundeliegende Zerlegung hervorgeht.
Wir unterscheiden weiter nicht immer zwischen äußerer und innerer direkter Summe. Formal ergibt sich damit für differenzierbares f

$$Df\big|_{\mathbf{E}} = D_1 f, \quad Df\big|_{\mathbf{F}} = D_2 f.$$

Mit diesen Vorbemerkungen können wir wegen $F(h) = \tilde{F}$ schreiben:

$$\begin{aligned} D\tilde{F} &= D_2\tilde{F} = (DF)(h)D_2h = (DF)(h)Dh\big|_{\mathbf{E}_2}, \\ 0 &= D_1\tilde{F} = (DF)(h)D_1h = (DF)(h)Dh\big|_{\mathbf{E}_1}. \end{aligned}$$

Weil nach Voraussetzung $D\tilde{F}$ und Dh Isomorphismen sind, können wir folgern

$$\ker(DF)(h) = \operatorname{ran} D_1 h. \tag{4.3}$$

Unterscheiden wir zwischen innerer und äußerer direkter Summe, so folgt aus (4.3) und

$$\{0\} \times \operatorname{ran} \Pi_{\mathbf{F}} D_1 h = \ker \Pi_{\mathbf{E}} \cap \operatorname{ran} D_1 h = \ker \Pi_{\mathbf{E}} \cap \ker(DF)(h),$$

daß $\operatorname{ran} D\Pi_{\mathbf{F}} h$ ein abgeschlossener Teilraum von $\mathbf{F}$ ist. Nach Gleichung (4.3) gilt

$$\ker \Pi_{\mathbf{F}},\, \ker(DF)(h) \subset \mathbf{E} + \operatorname{ran} D_1 h,$$

und aus der Surjektivität von $\Pi_{\mathbf{F}}$ und $(DF)(h)$ folgt weiter

$$\begin{aligned}
\operatorname{codim}_{\mathbf{E}\times\mathbf{F}}(\mathbf{E} + \operatorname{ran} D_1 h) = \\
&= \operatorname{codim}_{\mathbf{F}}(\Pi_{\mathbf{F}} \operatorname{ran} D_1 h) \\
&= \operatorname{codim}_{\mathbf{G}}((DF)(h)\big|_{\mathbf{E}}) = \operatorname{codim}_{\mathbf{G}}((D_1 F)(h)).
\end{aligned}$$

Es gilt die Identität

$$\begin{aligned}
\ker(D_1 F)(h) &= \Pi_{\mathbf{E}} \ker(D_1 F)(h) \\
&= \operatorname{ran} \Pi_{\mathbf{E}} D_1 h \\
&= \ker \Pi_{\mathbf{F}} \cap \operatorname{ran} D_1 h.
\end{aligned}$$

Weil Dh ein Isomorphismus ist, ist $D_1 h = Dh\big|_{\mathbf{E}_1}$ injektiv und es folgt aus dem Kern-Bild-Satz

$$\dim \ker(D_1 F)(h) = \dim \ker D_1 \Pi_{\mathbf{F}} h.$$

Nach Voraussetzung ist F_y eine Fredholm-Abbildung, resp. $D_1 F$ ein Fredholm-Operator. Aus den vorherigen Überlegungen folgt damit, daß $D_1 \Pi_{\mathbf{F}} h$ ein Fredholm-Operator ist mit Index

$$\operatorname{ind} D_1 \Pi_{\mathbf{F}} h = \operatorname{ind}(D_1 F)(h) < k.$$

Die Gleichheit der Kodimensionen von $D_1 \Pi_{\mathbf{F}} h$ und $(D_1 F)(h)$ impliziert, daß die Menge der Punkte, an denen $D_1 \Pi_{\mathbf{F}} h$ surjektiv ist, gerade diejenigen sind, an denen $(D_1)(F(h))$ surjektiv ist. Die Menge der regulären Werte von $\Pi_{\mathbf{F}} h(\,\cdot\,, 0)$ und der Parameter y, so daß z ein regulärer Wert von F_y ist, stimmen damit überein. $\square$

5 Einfangen von Eigenwertzweigen

Auf den folgenden Seiten wenden wir uns definiten Störungen $W \in L_{\infty,c}$ des Operators H zu. „Definit“ heißt, daß es sich bei der Störung entweder um eine Potentialbarriere $W \geq 0$ oder um einen Potentialbrunnen $W \leq 0$ handelt.
Solche Operatoren treten in Kapitel 3 als Vergleichsoperatoren nach Entkopplung durch eine Potentialbarriere auf.

Wegen des Feynman-Hellmann-Theorem (Proposition 2.12) und der Definitheit der Störung W, vereinfacht sich der Verlauf der Eigenwertzweige. Im Fall der Potentialbarriere können die Eigenwertzweige nur aufsteigen und im Fall des Potentialsbrunnen nur absteigen.

Wir entwickeln eine etwas genauere Vorstellung über das Geschehen im Intervall (a,b).
Dazu existiere eine offene Menge G, die die Segmentbedingung erfülle, so daß die symmetrische Differenz dieser Menge mit $[W \neq 0]$ eine Lebesgue-Nullmenge ist. Wir setzen $S = \overline{G}$ und fordern $\overset{\circ}{S} = G$. Mit H_S als Referenz-Operator gelten die folgenden Beschreibungen.

Ist W nichtnegativ, so konvergiert $H(\lambda)$ im Normresolventensinne gegen H_S (siehe [Hem97, HZ88]), und die Eigenwertzweige von $H(\lambda)$ konvergieren monoton wachsend gegen die diskreten Eigenwerte von H_S in (a,b). In einer Umgebung dieser Außenraum-Eigenwerte entsprechen sich Vielfachheiten der Eigenwerte und Anzahl der Eigenwertzweige von $H(\lambda)$ für große Kopplungen λ.
Ist $W \leq 0$, so sind die Eigenwertzweige außerhalb einer Umgebung des diskreten Spektrums von H_S streng monoton fallend ([Hem97]). Für jedes Eigenwertniveau $E \in (a,b)$ ist die Asymptotik der Zählfunktion

$$\mathcal{N}(\lambda) = \sum_{0<\mu<\lambda} \dim\ker(H(\lambda) - E)$$

vom Weyl-Typ ([Hem87, Hem89, Hem92b]).

In jedem der beiden Fälle spielen die Eigenwerte von H_S im Intervall (a,b) eine besondere Rolle. Diese Sonderrolle wird bestätigt durch die asymptotische Untersuchung von eindimensionalen Schrödinger-Operatoren [AH82, GGH$^+$88].
Im Barrierenfall sind die Eigenwerte von H_S die nullte Approximation einer asymptotischen Entwicklung in $\lambda = \infty$ und das Verschwinden des Potentials am Rande seines Trägers spiegelt sich in der asymptotischen Entwicklung der Eigenwertzweige in $\lambda = \infty$ wieder (siehe [AH82]).

Im Fall des Potentialbrunnens ist die Situation komplexer. Die absteigenden Eigenwerte zeigen ein ausgeprägtes „Trapping and Cascading“ Muster. Sie verweilen auf ausgedehnten Parameterintervallen in der Nähe von Eigenwerten von H_S, um schließlich simultan in wiederkehrenden „Korridoren“ in der λ, E-Ebene von einem Energieniveau des Operators H_S zum darauffolgenden tiefergelegenen Energieniveau zu kaskadieren (siehe [GGH$^+$88]).

Unser Ziel ist es, entsprechende Modellprobleme in Raumdimension $\nu \geq 2$ zu finden. Die naheliegende Idee, rotationssymmetrische Schrödinger-Operatoren zu betrachten, scheitert daran, daß solche Operatoren keine Lücken im wesentlichen Spektrum besitzen (siehe [HHK87, Wei87, HHHK91]).
Wir entwickeln im nächsten Abschnitt eine Methode, um einfache Problemstellungen zu behandeln. Mit ihrer Hilfe können wir bei polynomiellen Verschwinden im Randabstand der Potentialbarriere am Rande ihres Trägers, die aufsteigenden Eigenwertzweige asymptotisch entwickeln. Eine weitere Anwendung ist die Attraktivität der Energieniveaus von H_S für Eigenwertzweige von $H(\lambda)$ im Brunnenfall.

die es uns gestattet, eine asymptotische Entwicklung der Eigenwertzweige bei homogenem Verschwinden der Potentialbarriere am Rande des Trägers und im Brunnenfall die Attraktivität der Energieniveaus von H_S herzuleiten.

5.1 Extrapolationsansatz

Unser Extrapolationsansatz ist motiviert durch die Liouville-Green-Approximation von Lösungen gewöhnlicher Differentialgleichungen zweiter Ordnung. Die punktweise Approximation der Lösungen gibt im Wesentlichen das lokale Verhalten der Differentialgleichungen wieder (siehe [Olv74, 6.1]).
Für große Kopplungen dominiert das Störpotential W das Hintergrundpotential V, und aufgrund der Liouville-Green-Approximation sind die Lösungen der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung asymptotisch durch die Gestalt von W bestimmt (siehe [Olv74, 6.5]).
Die punktweise gültige Asymptotik und die Anschlußbedingungen an den Grenzen des Trägers des Störpotentials führen auf asymptotische transzendente Gleichungen [Olv74, 1.5] für Kopplungsparameter und Eigenwerte, deren Lösungen für das „Trapping and Cascading“-Muster der Eigenwertzweige verantwortlich sind (siehe [GGH$^+$88]).

Aufgrund der Komplexität einer mehrdimensionalen Liouville-Green-Approximation ersetzen wir die asymptotische Analysis durch einen Ansatz. Wir

nehmen die asymptotische Entwicklung im eindimensionalen Fall als Motivation und suchen die dominierenden Faktoren heraus.
Durch das exponentielle Lokalisieren im Barrierenfall erhalten wir erste Anhaltspunkte. Weil die Eigenlösungen im Innern der Barriere praktisch Dirichlet-Bedingungen erfüllen, ist nur das Verhalten der Eigenlösungen in der Nähe des Randes des Barrierenträgers entscheidend. Lokal separiert dort der Laplace-Operator in einen Anteil in Normalenrichtung und einen weiteren Differentialoperator zweiter Ordnung. Entsprechend sollten die Eigenfunktionen des Schrödinger-Operators lokal durch ein Tensorprodukt von Eigenlösungen dargestellt werden, so daß man sie sich als modulierte Eigenlösungen des Schrödinger-Operators in Normalenrichtung vorstellen kann.

Aus der gewonnenen Vorstellung der Eigenfunktionen leiten wir einen Ansatz ab. Wählen wir Eigenfunktionen zu Dirichlet-Schrödinger-Operatoren $H_{S(\varkappa)}$ mit Dirichlet-Randdaten auf Mengen $S(\varkappa)$, die den die gegen den Träger der Barriere aufsteigen, und ersetzen diese Funktionen in der Barriere durch eine Approximationen des Anteils von $-\Delta+\lambda W$ in Normalenrichtung, erhalten wir eine Extrapolation der Eigenfunktion in die Barriere hinein.
Die Extrapolationslösung ist eine approximative Eigenfunktion, wenn sie hinreichend regulär ist. Wie im eindimensionalen Fall ist dies gleichbedeutend mit der Gültigkeit von Anschlußbedingungen auf dem Barrierenrand. Diese Bedingungen setzen die Parameter λ, $\varkappa$ und die Eigenwerte in Relation.

Eine Idee für den Ansatz ist schnell gefunden. Weil für $\nu \geq 2$ die Geometrie des Störpotentials komplexer sein kann als im Fall $\nu = 1$, ergibt sich ein zu absolvierendes Programm von Teilaufgaben.
Wir müssen klären, unter welchen Bedingungen auf verschiedenen Mengen definierte Funktionen zu einer Funktion im Definitionsbereich des Operators $H(\lambda)$ zusammengesetzt werden können.
Die Dirichlet-Eigenfunktionen können komplexe Knotengebilde besitzen. Die Anschlußbedingung für die extrapolierende Funktion und die Eigenfunktion wird deshalb u.U. komplizierter als erwartet. Durch eine weitere Approximation vereinfachen wir die Eigenfunktion. Diese Approximation und die punktweise Konstruktion erfordern eine hohe Differenzierbarkeit der Eigenfunktion. Wir brauchen Bedingungen unter denen die Funktionen in einer Umgebung des Barrierenrandes hinreichend regulär sind. Für die Fehleranalyse sind gleichmäßige Abschätzungen der Ableitungen unter Gebietsstörungen erforderlich.

In der folgenden Argumentation werden wir weitere Annahmen über die Regularität von V und die Symmetrie von W machen. Unser Ziel ist es ohnehin, Modellprobleme aufzusuchen, so daß uns weitere Einschränkungen nicht stören.

Mit Satz 5.8 haben wir schließlich ein Instrument in der Hand, um Eigenwerte von $H_{S(\varkappa)}$ mit denen von $H(\lambda)$ zu vergleichen. Die Verbindung zu Eigenwerten von H_S stellen wir erst im darauf folgenden Abschnitt her.

5.1.1 Anschlußbedingung und Randregularität

Aufgrund der lokalen elliptischen Regularität ist $D(H(\lambda)) \subset \mathscr{H}^2_{\mathrm{loc}}$. Eine Funktion $u \in C^1(\mathbb{R} \setminus \{0\})$ ist dann in $\mathscr{H}^2_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R})$, falls die einseitigen Grenzwerte von u und u' in 0 existieren und die folgende Bedingung erfüllen

$$\lim_{x \to 0+} \left(\frac{d}{dx}\right)^i u(x) = \lim_{x \to 0-} \left(\frac{d}{dx}\right)^i u(x) \quad (i = 0, 1).$$

Entsprechende Aussagen gelten für $\nu \geq 2$, wenn man die Ableitungen und die Grenzwerte richtig deutet.

Proposition 5.1 (Spuroperator) *Seien $\Omega \subset \mathbb{R}^\nu$ offen und $k \in \mathbb{N}$. Der Rand $\partial\Omega$ von Ω sei eine kompakte C^k-Mannigfaltigkeit.*
Dann besitzt die Spur

$$\tau : \begin{cases} C_c^k(\overline{\Omega}) & \longrightarrow \quad \mathscr{H}^{k-1}(\partial\Omega) \\ \quad u & \longmapsto \quad u\big|_{\partial\Omega} \end{cases}$$

eine stetige Fortsetzung auf $\mathscr{H}^k(\Omega)$.

Beweis siehe [Gri85, Thm. 1.5.1.2].

Die Spurbildung ist linear. Aus $\tau\big|_{C_c^\infty(\Omega)} = 0$ folgt für $k \in \mathbb{N}$

$$\mathring{\mathscr{H}}^1(\Omega) \cap \mathscr{H}^k(\Omega) \subset \ker \tau\,. \tag{5.1}$$

Tatsächlich gilt die Gleichheit in der obigen Mengeninklusion (siehe [Gri85, Cor. 1.5.1.6]).

Ist $\partial\Omega$ eine C^2-Mannigfaltigkeit, so besitzt Ω auf dem Rand ein stetig differenzierbares äußeres Einheits-Normalenfeld $\mathbf{n}$. Der Rand von Ω besitzt die Fortsetzungseigenschaft, so daß eine C_c^1 Fortsetzung Ψ des Normalenfeldes existiert. Für hinreichend glatte Funktionen u stimmt dann die Spur von $\Psi \cdot \nabla u$ auf $\partial\Omega$ mit der Normalableitung $\partial_{\mathbf{n}} u$ überein.

Proposition 5.2 *Seien Ω_-, $\Omega_+ \subset \mathbb{R}^\nu$ offene disjunkte Mengen. Die Menge Ω_- sei beschränkt und habe einen C^2-Rand. Es gelte*

$$\partial\Omega_- = \partial\Omega_+ = \partial(\Omega_- \cup \Omega_+).$$

Weiter sei Ψ eine C_c^1-Fortsetzung des äußeren Einheits-Normalenfeldes von Ω_-. Für $u \in \mathscr{H}^2(\Omega_- \cup \Omega_+)$ gilt dann:

$$u \in \mathscr{H}^2 \Leftrightarrow \tau_-\left((\Psi\cdot\nabla)^i u\right) = \tau_+\left((\Psi\cdot\nabla)^i u\right) \quad (i = 0,1),$$

wobei $\tau_\pm$ die Spuren auf $\mathscr{H}^1(\Omega_\pm)$ sind.

Beweisskizze Die Argumentation ist Standard [Ada75, Eva98, EE89, GT77, Gri85]. Wir fassen uns deshalb kurz.
Weil $\partial\Omega$ eine kompakte C^2-Mannigfaltigkeit ist, können wir $\partial\Omega$ durch eine offene Überdeckung überdecken, u durch eine untergeordnete Partition der Eins zerlegen und u auf den einzelnen offenen Teilmengen durch einen C^2 Diffeomorphismus so transformieren, daß wir annehmen können

$$\Omega_- = \left[x_\nu < 0\right], \quad \Omega_+ = \left[x_\nu > 0\right],$$

sowie

$$\tau_-\,(\partial_\nu)^i\, u = \tau_+\,(\partial_\nu)^i\, u \quad (i = 0,1).$$

Wir nehmen zunächst $u \in C^1 \cap \mathscr{H}^1(\Omega_- \cup \Omega_+)$ an. Sei u_ν die partielle Ableitung von u in x_ν-Richtung. Aufgrund des Hauptsatzes der Differential- und Integralrechnung gilt dann für alle $\varphi \in C_c^\infty$

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega_-} (u_\nu)\varphi\, dx + \int_{\Omega_-} u(\partial_\nu\varphi)\, dx = \\
&= \int \int_{-\infty}^{0} (u_\nu)\varphi\, dx_\nu + \int_{-\infty}^{0} u(\partial_\nu\varphi)\, dx_\nu\, d\widehat{x}_\nu \\
&= \int_{\left[x_\nu = 0\right]} \tau_-(u)\,\tau_-(\varphi)\, d\widehat{x}_\nu.
\end{aligned}$$

Entsprechend gilt

$$\int_{\Omega_+} (u_\nu)\varphi\, dx + \int_{\Omega_+} u(\partial_\nu\varphi)\, dx = -\int_{x_\nu = 0} \tau_+(u)\,\tau_+(\varphi)\, d\widehat{x}_\nu.$$

Summiert man die beiden Gleichungen, so folgt unter der Voraussetzung $\tau_- u = \tau_+ u$, daß u in x_ν-Richtung schwach differenzierbar ist mit $u_\nu = \partial_\nu u$.

Die Übereinstimmung der Ableitungen $\partial_j u$ mit den klassischen Ableitungen u_j kann man einfach testen.

Die Behauptung für $u \in \mathscr{H}^1(\Omega_- \cup \Omega_+)$ folgt aus der Dichtheit von $C^1 \cap \mathscr{H}^1(\Omega_\pm)$ in $\mathscr{H}^1(\Omega_\pm)$ und der Stetigkeit der Spurbildung.

Aus $u \in \mathscr{H}^1$ folgt die Behauptung durch die wiederholte Anwendung der vorherigen Argumentation auf $\partial_i u$, wobei

$$\tau_- \partial_i u = \tau_+ \partial_i u \quad (i \neq \nu)$$

bereits aus $\tau_- u = \tau_+ u$ folgt. □

Wir haben $H(\lambda)$ als Friedrichsfortsetzung von $L(\lambda)$ definiert. Um zu entscheiden, ob ein $u \in \mathscr{H}^1 \cap \mathscr{H}^2_{\text{loc}}$ im Definitionsbereich des Operators $H(\lambda)$ liegt mit $H(\lambda)u = h \in L_2$, reicht es wegen des Formdarstellungssatzes [Kat95], $L(\lambda)u = h$ im Distributionensinne auf einer hinreichend großen, offenen Menge zu zeigen.

Korollar 5.3 *Sei $W \in L_{\infty,c}$. Mit den Bezeichnungen und unter den Voraussetzungen von Proposition 5.2 sind für alle $u \in \mathscr{H}^1(\Omega_- \cup \Omega_+)$ und alle $h \in L_2$ äquivalent:*

1. *Es ist $u \in D(H(\lambda))$ mit $H(\lambda)u = h$;*
2. *Für alle $\eta \in C_c^\infty$ gilt $\eta u \in \mathscr{H}^2(\Omega_- \cup \Omega_+)$, im distributionellen Sinne ist $L(\lambda)u = h$ auf $\Omega_- \cup \Omega_+$, und es gelten die Anschlußbedingungen*

$$\tau_- \big((\Psi \cdot \nabla)^i u\big) = \tau_+ \big((\Psi \cdot \nabla)^i u\big) \quad (i = 0, 1).$$

5.1.2 Approximation in Normalenrichtung

Nach unseren einleitenden Überlegungen stellen wir uns den Laplace-Operator in lokalen Variablen am Rande des Trägers des Störpotentials in separierter Form vor, wobei eine Koordinate durch die Normalenrichtung gegeben ist. Entsprechend machen wir den Separationsansatz

$$w(\rho, \theta) = f(\rho) g(\theta),$$

um eine Dirichlet-Eigenfunktion v in das Störpotential zu extrapolieren.

Wir brauchen also Koordinaten $x = \Phi(\rho,\theta)$, so daß $\partial_\rho \Phi(r_0,\cdot)$ ein äußeres Einheits-Normalenfeld für die Mannigfaltigkeit $\Phi(r_0,\cdot)$ ist. Ist auf $\Phi(r_0,\cdot)$ die Anschlußbedingung

$$v(r_0,\cdot)\,f'(r_0) - \partial_\rho v(r_0,\cdot)\,f(r_0) = 0 \tag{5.2}$$

erfüllt, so sind die Bedingungen aus Korollar 5.3 mit einem geeigneten g erfüllbar. Weil f eine Lösung einer linearen gewöhnlichen Differentialgleichung zweiter Ordnung ist, ist $(f(r_0), f'(r_0))$ von Null verschieden. Die Wahl der Transformation Φ ist damit durch eine weitere Nebenbedingung eingeschränkt, denn nur wenn auf dem Nullstellengebilde von v die Ungleichung $\partial_\rho v \neq 0$ gilt, ist die Bedingung (5.2) erfüllbar.

Wir sehen uns mit einer Reihe technischer Probleme konfrontiert. Insbesondere ist die Abhängigkeit der Koordinaten vom Knotengebilde der Eigenfunktion v unerwünscht.
Wir halten am Separationsansatz fest und ersetzen auf Kosten eines Approximationsfehlers die Funktion v durch eine Näherung in Normalenrichtung in einer Umgebung des Randes von $\operatorname{supp} W$. Dadurch vereinfachen sich die Anschlußbedingungen, und die Konstruktion hängt nur von der Geometrie von $\partial \operatorname{supp} W$ ab.
Nehmen wir außerdem noch

$$\operatorname{supp} W = B \tag{5.3}$$

an, so können wir in Polarkoordinaten rechnen

$$x = |x|\frac{x}{|x|} = \rho\theta = \Phi(\rho,\theta) \quad (\rho > 0, \theta \in \mathbb{S}_{\nu-1}).$$

Die Vergleichsoperatoren der Beispiele auf Seite 42 mit dem Barrierenanteil fallen in diese Klasse von Operatoren.

Wir suchen also nach Approximationen von Funktionen in einer Umgebung der Oberfläche $r_0\mathbb{S}_{\nu-1}$.
Seien zunächst $r_0 > 0$ und $\varphi \in C_c^\infty$. Setzen wir $\theta = |x|^{-1}x$, so sind durch $x_0 = r_0\theta$ und $v_0 = \theta$ der Fußpunkt von x auf $r_0\mathbb{S}_{\nu-1}$ und der äußeren Einheits-Normalenvektor von $r_0 B$ in x_0 gegeben. Der Punkt x liegt auf der Geraden durch

x_0 in Richtung v. Die eindimensionale Taylor-Entwicklung lautet

$$\begin{aligned}\varphi(x) &= \varphi\left(x_0+(|x|-r_0)v\right)\\ &= \sum_{k=0}^{n}\frac{1}{k!}\partial_v^k\varphi\left(x_0\right)(|x|-r_0)^k+\frac{1}{n!}\int_{r_0}^{|x|}(|x|-t)^n\partial_v^{n+1}\varphi\left(tv\right)dt\\ &= \sum_{k=0}^{n}\frac{1}{k!}\partial_\rho{}^k\varphi\left(r_0\theta\right)(|x|-r_0)^k+\frac{1}{n!}\int_{r_0}^{|x|}(|x|-t)^n\partial_\rho{}^{n+1}\varphi\left(t\theta\right)dt.\end{aligned}$$

Die radialen Ableitungen $\partial_\rho{}^m$ haben die Darstellung

$$\partial_\rho{}^m=\sum_{|\alpha|=m}\frac{m!}{\alpha!}\left(\frac{x}{|x|}\right)^\alpha\partial^\alpha.$$

Die Operatoren $\partial_\rho{}^m$ und das Taylorpolynom in radialer Richtung sind damit für alle Testfunktionen aus $C_c^\infty(\mathbb{R}^\nu\setminus\{0\})$ definiert.
Für $r_0-\varepsilon<|x|<r_0+\varepsilon$ hat das Restglied die folgende Abschätzung

$$\begin{aligned}&\left|\frac{1}{n!}\int_{r_0}^{|x|}(|x|^n-t)^n\partial_\rho{}^{n+1}\varphi(t\theta)\,dt\right|^2\leq\\ &\leq\frac{1}{(n!)^2}\left|\int_{r_0}^{|x|}\left(|x|-t\right)^{2n}dt\right|\left|\int_{r_0}^{|x|}\left|\partial_\rho{}^{n+1}\varphi(t\theta)\right|^2\left(\frac{t}{|r_0-\varepsilon|}\right)^{\nu-1}dt\right|\\ &\leq\frac{(n+1)^2}{|r_0-\varepsilon|^{(\nu-1)}}\frac{\varepsilon^{2n+1}}{(n+1)!}\int_{r_0-\varepsilon}^{r_0+\varepsilon}|\partial_\rho{}^{n+1}\varphi(t\theta)|^2t^{\nu-1}\,dt.\end{aligned}$$

Die rechte Seite der Ungleichung ist unabhängig von $r=|x|$. Integrieren wir die obige Ungleichung über $||x|-r_0|<\varepsilon$ bezüglich Polarkoordinaten, so können wir mit der Setzung

$$\chi_{r,\varepsilon}(x)=\chi_{[-2,2]}\left((|x|-r)\varepsilon^{-1}\right)\quad(x\in\mathbb{R}^\nu),$$

das Quadrat der L_2-Norm des Restgliedes abschätzen durch

$$\frac{(n+1)^2}{|r_0-\varepsilon|^{(\nu-1)}}\frac{\varepsilon^{2n+1}}{(n+1)!}\left\|\chi_{r_0,\varepsilon}\right\|^2_{L_2(r^{\nu-1}dr)}\left\|\chi_{r_0,\varepsilon}\partial_\rho{}^{n+1}\varphi\right\|_2^2.$$

Lemma 5.4 (Radiale Taylorapproximation) *Sei $r_0>0$ und $n\in\mathbb{N}$.*
Dann gilt:

1. *Für* $0 \leq m \leq n$ *besitzen die für* $\varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^\nu \setminus \{0\})$ *definierten Abbildungen*

$$\begin{aligned} \tau_{r_0}\varphi &= \varphi(r_0\,\cdot)\big|_{\mathbb{S}_{\nu-1}}, \\ \partial_\rho{}^m\varphi &= \sum_{|\alpha|=m} \frac{m!}{\alpha!}\left(\frac{x}{|x|}\right)^\alpha \partial^\alpha\varphi, \\ T_n(r_0)\varphi &= \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{k!}\left(|\cdot|-r_0\right)^k \tau_{r_0}\,\partial_\rho{}^k\varphi \end{aligned}$$

   stetige Fortsetzungen auf $\mathscr{H}_{loc}^{n+1}(\mathbb{R}^\nu \setminus \{0\})$*;*

2. *Es existiert eine Konstante* $C = C(n,\nu)$ *mit*

$$\begin{aligned} \left\|\chi_{r_0,\varepsilon}(I - T_n(r_0))u\right\|_2 &\leq C\,\frac{\varepsilon^{n+1}}{(n+1)!}\left\|\chi_{r_0,\varepsilon}\partial_\rho{}^{n+1}u\right\|_2 \\ \left\|\chi_{r_0,\varepsilon}\partial_\rho{}^{n+1}u\right\|_2 &\leq C\sqrt{\varepsilon}\left\|\chi_{r_0,\varepsilon}u\right\|_{2,n+2} \end{aligned}$$

   für $u \in \mathscr{H}_{loc}^{n+1}(\mathbb{R}^\nu \setminus \{0\})$ *bzw.* $\mathscr{H}_{loc}^{n+2}(\mathbb{R}^\nu \setminus \{0\})$.

Beweis Für $m \in \mathbb{N}$ liegt $C_c^\infty(\mathbb{R}^\nu \setminus \{0\})$ dicht in $\mathscr{H}_{\text{loc}}^m(\mathbb{R}^\nu \setminus \{0\})$. Aus Proposition 5.1 und den Vorüberlegungen folgt die stetige Fortsetzbarkeit der Operatoren.

Mit dem gleichen Dichtheitsargument und Auswertung von $\|\chi_{r_0,\varepsilon}\|_{L_2(r^{\nu-1}dr)}$ folgt die Abschätzung des Fehlers der Approximation von u durch $T_n(r_0)u$.

Mit $T_0(r_0) = \tau_{r_0}$ ist

$$\chi_{r_0,\varepsilon}\partial_\rho{}^{n+1}u = \chi_{r_0,\varepsilon}\,\tau_{r_0}\,\partial_\rho{}^{n+1}u + \chi_{r_0,\varepsilon}(I - T_0(r_0))\partial_\rho{}^{n+1}u.$$

Aus $u \in \mathscr{H}^{n+2}(\mathbb{R}^\nu \setminus \{0\})$ folgt $\partial_\rho{}^{n+1}u \in \mathscr{H}^1(\mathbb{R}^\nu \setminus \{0\})$. Nach Proposition 5.1 und der ersten Ungleichung existiert eine Konstante $C \geq 0$ mit

$$\begin{aligned} \|\tau_{r_0}\,\partial_\rho{}^{n+1}u\|_{L_2(\mathbb{S}_{\nu-1})} &\leq C\|\partial_\rho{}^{n+1}u\|_{2,1}, \\ \|\chi_{r_0,\varepsilon}(I - T_0(r_0))\partial_\rho{}^{n+1}u\|_2 &\leq \varepsilon C\|\chi_{r_0,\varepsilon}\partial_\rho{}^{n+2}u\|_2. \end{aligned}$$

Aus

$$\|\chi_{r_0,\varepsilon}\,\tau_{r_0}\,\partial_\rho{}^{n+1}u\|_2 = \|\chi_{r_0,\varepsilon}\|_{L_2(r^{\nu-1}dr)}\,\|\tau_{r_0}\,\partial_\rho{}^{n+1}u\|_{L_2(\mathbb{S}_{\nu-1})}$$

folgt die behauptete zweite Ungleichung. □

5.1.3 Modifikation von Eigenfunktionen

Im vorherigen Abschnitt haben wir, um technische Probleme zu vermeiden, den Träger der Barriere rotationsinvariant gewählt.
Für $\operatorname{supp} W = B$ gewinnen wir, passend zur Rotationssymmetrie von B, Approximationen der Eigenfunktionen von $H(\lambda)$ aus Eigenelementen von H_{rB}. Ist $W = W_+$, so ist, wegen des exponentiellen Lokalisierens von Eigenlösungen in der Barriere, $r < 1$ zu wählen. Im Brunnenfall $W = -W_-$ müssen wir r nahe bei 1 zulassen können.

In jedem Fall haben wir es mit einer Vielzahl von Eigenwertproblemen mit Dirichlet-Randbedingungen zu tun. Um die Eigenfunktionen in der Nähe von $\mathbb{S}_{\nu-1}$ durch eine Taylorapproximation in radialer Richtung ersetzen zu können und trotzdem den Approximationsfehler gleichmäßig beschränken zu können, brauchen wir gleichmäßige Schranken für die höheren Ableitungen der Eigenfunktionen am Rande der Kugel rB.
Wir leiten aus Lemma 2.3 aus Kapitel 2 die folgende Aussage ab.

Lemma 5.5 *Seien $0 \leq V \in L_\infty$ und $b > 0$. Weiter seien $|1-r| < 1$ und v eine Eigenfunktion von H_{rB} zum Eigenwert E mit $|E| \leq b$. Es sei $k \in \mathbb{N}$ und es gelte zusätzlich $V \in C^{k-1,1}$, falls $k > 0$.*
Mit der Bezeichnung

$$\Omega = \{x \in \mathbb{R}^\nu; 1 < |x| < 2\}$$

folgt $v \in \mathscr{H}^{k+2}(r\Omega)$ und die Existenz eines $C = C(\nu, \|V\|_{C^{k-1,1}}, b) \geq 0$ mit

$$\|v\|_{\mathscr{H}^{k+2}(r\Omega)} \leq C\|v\|_2.$$

Das entscheidende Detail ist die Unabhängigkeit der Konstante C von v und der Menge rB, auf der v Dirichlet-Bedingungen erfüllt.

Beweis Sei zunächst $r = 1$. Aus der Eigenwertgleichung $H_B v = Ev$ folgt

$$\int |\nabla v|^2 + (V-E)|v|^2\, dx = 0.$$

Lösen wir nach $\|\nabla v\|_2^2$ auf, so erhalten wir

$$\|v\|_{2,1}^2 = \|\nabla v\|_2^2 + \|v\|_2^2 \leq (\|V\|_\infty + b + 1)\|v\|_2^2.$$

Für $0 \le l \le k$ seien $\eta_l \in C_c^\infty$ mit $\operatorname{supp}\eta_l \subset K(0,3+k-l)$, $0 \le \eta_l \le 1$ und $\eta\big|_{(2+k-l)B} = 1$. Es ist $\eta_l\eta_{l-1} = \eta_l$.

Ist für $1 \le l \le k$ die Funktion $\eta_{l-1}v$ aus $\mathscr{H}^l$, so gilt

$$(H-E)\eta_l v = -[\Delta,\eta_l]v = -[\Delta,\eta_l]\eta_{l-1}v \in \mathscr{H}^{l-1}.$$

Offenbar ist in diesem Fall $\eta_l v \in \mathring{\mathscr{H}}^1(K(0,3+k-l)\setminus B)$, und für $l \le k$ folgt wegen der Regularität von V aus Satz 2.3 die Existenz eines von l unabhängigen $C \ge 0$ mit

$$\begin{aligned}\|\eta_l v\|_{2,l+2} &\le C(\|\eta_l v\|_2 + \|[\Delta,\eta_l]\eta_{l-1}v\|_{2,l}) \\ &\le C(\|\eta_l v\|_2 + C_l\|\eta\|_{\infty,l+2}\|\eta_{l-1}v\|_{2,l}),\end{aligned}$$

wobei $\|\cdot\|_{\infty,l}$ die Summe der Supremumsnormen der partiellen Ableitung bis zur Ordnung l sind und C_l eine geeignete Konstante bezeichnet.
Für $l = 0$ gilt mit der vorherigen Beobachtung

$$\|[\Delta,\eta_l]v\|_2 \le C_0\|\eta_l\|_{\infty,2}\,\|v\|_2.$$

Nach höchstens k Iterationsschritten findet man eine Konstante, die wir ohne Einschränkungen ebenfalls C nennen, mit

$$\|\eta_k v\|_{2,k+2} \le C\|v\|_2.$$

Wegen $\eta_k = 1$ auf Ω folgt die Behauptung.

Sei nun $|1-r| < 1$. Wir führen den Beweis auf den Fall $r = 1$ zurück.

Unter der unitären Fortsetzung von

$$U(r)\varphi(x) = r^{\nu/2}\varphi(rx) \quad (r > 0,\ \varphi \in C_c^\infty,\ x \in \mathbb{R}^\nu)$$

ist der Schrödinger-Operator H_{rB} mit Dirichlet-Bedingungen auf rB unitär äquivalent zu $-r^{-2}\Delta + V(r\,\cdot)$ mit Dirichlet-Bedingungen auf B. Die Eigenfunktionen von H_{rB} transformieren sich entsprechend zu Eigenfunktionen von $-r^{-2}\Delta + V(r\,\cdot)$.
Mit $u = U(r)v$ gilt dann

$$-\Delta u + r^{-2}V(r\,\cdot)u = r^{-2}Eu.$$

Nach dem Vorherigen existiert eine Konstante C, so daß die Sobolevnorm von u in $\mathscr{H}^{k+2}(\Omega)$ durch $C\|u\|_2$ abgeschätzt wird. Aufgrund der Zusatzbemerkung in

Satz 2.3 hängt die Konstante C nur von einer oberen Schranke für $\|V(r\cdot)\|_{\infty,k-1}$ ab, und wir können C gleichmäßig in r wählen.
Machen wir die Skalierung rückgängig erhalten wir die behauptete Ungleichung. $\square$

Wir stellen Δ in lokalen Koordinaten dar. Im Vorfeld haben wir uns auf Störpotentiale mit Trägerbedingung $\operatorname{supp} W = B$ eingeschränkt, so daß wir Δ in Polarkoordinaten darstellen. Es gilt

$$\Delta = {\partial_\rho}^2 + \frac{\nu-1}{r}\partial_\rho + \frac{1}{r^2}\Delta_\theta,$$

mit ${\partial_\rho}^m$ wie in Lemma 5.4 und

$$\Delta_\theta = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{\nu}(x_i\partial_j - x_j\partial_i)^2.$$

Wie im Fall der Taylorentwicklung ist diese Gleichung zunächst für alle Funktionen aus $C_c^\infty(\mathbb{R}^\nu \setminus \{0\})$ gerechtfertigt. Die Gleichheit der Operatoren auf $\mathscr{H}^{k+2}_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^\nu \setminus \{0\})$, folgt aus der Dichtheit von $C_c^\infty(\mathbb{R}^\nu \setminus \{0\})$ in $\mathscr{H}^{k+2}_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^\nu \setminus \{0\})$.

Mit dem gleichen Argument sehen wir, daß der Operator

$$\Delta_\theta : \mathscr{H}^{k+2}_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^\nu \setminus \{0\}) \longrightarrow \mathscr{H}^{k}_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^\nu \setminus \{0\})$$

stetig ist, und daß mit τ_{r_0} aus Lemma 5.4 die folgenden Vertauschungsregeln gelten:

$$\begin{aligned} {\partial_\rho}^k\Delta_\theta u &= \Delta_\theta{\partial_\rho}^k u \quad (k\in\mathbb{N}, u \in \mathscr{H}^{k+2}_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^\nu \setminus \{0\}), \\ \tau_{r_0}\Delta_\theta u &= \Delta_\theta\,\tau_{r_0} u \quad (u \in \mathscr{H}^{3}_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^\nu \setminus \{0\}). \end{aligned}$$

In der letzten Gleichung stellen wir uns die Funktion $\tau_{r_0} u$ konstant auf vom Ursprung ausgehenden Strahlen vor.

Aufgrund der letzten Vertauschungsregel nimmt die Entwicklung $T_2(r)v$ von Eigenfunktionen $v \in D(H_{rB})$ eine einfache Form an.

Proposition 5.6 *Seien $0 \le V \in C^{1,1}$. Weiter sei v eine Eigenfunktion von H_{rB} mit $|1-r| \le 1$.*
Dann gilt

1. $\tau_r\,\partial_\rho v \neq 0,$
2. $T_2(r)v = \left((|\cdot|-r) - \frac{\nu-1}{2r}(|\cdot|-r)^2\right)\tau_r\,\partial_\rho v.$

Beweis Das Potential V ist aus $C^{2-1,1}$. Die Eigenfunktion v ist nach Lemma 5.5 aus $\mathscr{H}^4(r\Omega)$ mit Ω wie in 5.5. Wir können also auf der linken und der rechten Seite der Eigenwertgleichung

$$-\partial_\rho{}^2 v - \frac{\nu-1}{r}\partial_\rho v - \frac{1}{r^2}\Delta_\theta v + Vv = Ev$$

den Spuroperator τ_r anwenden.
Die Funktion v liegt ebenfalls in $\mathring{\mathscr{H}}^1(\mathbb{R}^\nu \setminus B) \subset \ker \tau_r$ und es gilt

$$\Delta_\theta\, \tau_r\, v = \tau_r\, V\, \tau_r\, v = E\, \tau_r\, v = 0.$$

Aus der Vertauschungsregel $\Delta_\theta\, \tau_r = \tau_r\, \Delta_\theta$ folgt

$$\tau_r\, \partial_\rho{}^2 v = -\frac{\nu-1}{r}\, \tau_r\, \partial_\rho v,$$

und wir erhalten die zweite Aussage.

Wäre nun $\tau_r\, \partial_\rho v = \tau_r\, v = 0$, so könnten wir mit Korollar 5.3 die Eigenfunktion v durch die Nullfunktion auf rB zu einer Eigenfunktion von H fortsetzen, die auf einer offenen Umgebung des Ursprungs verschwindet. Nach Satz 2.4 müßte dann v bereits auf dem ganzen $\mathbb{R}^\nu$ verschwinden. □

Wir ersetzen nun Eigenfunktionen in einer Umgebung des Randes durch die radiale Taylorapproximation.

Proposition 5.7 *Seien $0 \le V \in C^{2,1}$ und $b > 0$. Es seien $|1-r| < \frac{1}{2}$ und v eine Eigenfunktion von H_{rB} zum Eigenwert E mit $|E| \le b$.*
Für $r > 2\varepsilon > 0$ und $\eta \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ mit

$$0 \le \eta \le 1, \quad \eta\big|_{[-1,1]} = 1, \quad \eta\big|_{\mathbb{R}\setminus[-2,2]} = 0,$$

setzen wir

$$\eta_{r,\varepsilon}(x) = \eta\left((|x|-r)\varepsilon^{-1}\right) \quad (x \in \mathbb{R}^\nu).$$

Dann liegt die modifizierte Eigenfunktion

$$v_{r,\varepsilon} = \eta_{r,\varepsilon} T_2(r) v + (1-\eta_{r,\varepsilon}) v$$

im Definitionsbereich des Operators H_{rB}, und es existiert ein $C = C(\nu, \|V\|_{C^{2,1}}, b) \ge 0$, so daß die folgenden Ungleichungen erfüllt sind:

$$\|v_{r,\varepsilon} - v\|_2 \le C\varepsilon^{7/2}\|v\|_2, \quad \|(H_{rB}-E)v_{r,\varepsilon}\|_2 \le C\varepsilon^{3/2}\|v_{r,\varepsilon}\|_2.$$

Für $\varepsilon > 1-r$ stimmt in einer Umgebung von $\mathbb{S}_{\nu-1}$ die Funktion $v_{r,\varepsilon}$ mit $T_2(r)v$ überein.

Auch hier ist das entscheidende Detail die Unabhängigkeit der Konstanten C von v und r.
Die modifizierte Eigenfunktion ist wegen der zweiten Ungleichung eine approximative Eigenfunktion. Der Approximationsfehler wird durch die ε-Umgebung von $\mathbb{S}_{\nu-1}$ kontrolliert, auf der v durch $T_2(r)v$ ersetzt wird.

Beweis Es sei

$$u = v - v_{r,\varepsilon} = \eta_{r,\varepsilon}(v - T_2(r)v).$$

Wir berechnen und schätzen zunächst

$$(L-E)u = -\Delta u + (V-E)u$$

ab. Im Anschluß zeigen wir $u \in D(H_{rB})$.

Mit $\Omega = [1 < |\cdot| < 2]$ folgt aus $V \in C^{3-1,1}$ und Lemma 5.5 $v \in \mathscr{H}^5(r\Omega)$. Weiter gilt für ein geeignetes $C_1 \geq 0$ die Ungleichung $\|v\|_{\mathscr{H}^5(r\Omega)} \leq C_1 \|v\|_2$.

Es sei $\chi_{r,\varepsilon}$ wie in Lemma 5.4. Es gilt $\eta_{r,\varepsilon} \leq \chi_{r,\varepsilon}$ und aus Lemma 5.4 folgt

$$\|u\|_2 = \|v - v_{r,\varepsilon}\|_2 \leq \|\chi_{r,\varepsilon}(I - T_2(r))v\|_2 \leq C_1 \varepsilon^{7/2} \|v\|_2.$$

Wir haben damit die erste Ungleichung bewiesen und indirekt eine Abschätzung für $(V-E)u$ gewonnen.

Bevor wir den Differentialausdruck Δu auswerten, diskutieren wir die Regularität von u.
Der Träger von $\eta_{r,\varepsilon}$ liegt in $r\Omega$, so daß $\eta_{r,\varepsilon} v \in \mathscr{H}^5$ gilt. Aus $v \in \mathscr{H}^5(r\Omega)$ folgt weiter $\tau_r\,\partial_\rho v \in \mathscr{H}^3(\mathbb{S}_{\nu-1})$. Nach der vorherigen Proposition ist $T_2(r)v$ ein durch $\tau_r\,\partial_\rho v$ moduliertes Polynom in $|\cdot|$, und wir können $T_2(r)v \in \mathscr{H}^3_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^\nu \setminus \{0\})$ annehmen.

Die Funktion u ist also hinreichend regulär. Mit

$$\nabla \eta_{r,\varepsilon}(x) \cdot \nabla \;=\; \eta'((|x|-r)\varepsilon^{-1})\varepsilon^{-1} \frac{x}{|x|} \cdot \nabla = \varepsilon^{-1} \eta'((|x|-r)\varepsilon^{-1})\,\partial_\rho$$

berechnet sich Δu zu

$$\begin{aligned}
\Delta u &= \Delta(\eta_{r,\varepsilon} v - T_2(r)v) \\
&= (v - T_2(r)v)\Delta\eta_{r,\varepsilon} + 2\nabla\eta_{r,\varepsilon}\cdot\nabla(v - T_2(r)v) + \eta_{r,\varepsilon}\Delta(v - T_2(r)v) \\
&= (v - T_2(r)v)\Delta\eta_{r,\varepsilon} \\
&\quad + 2\varepsilon^{-1}\eta'((|\cdot| - r)\varepsilon^{-1})\partial_\rho\,(v - T_2(r)v) \\
&\quad + \eta_{r,\varepsilon}(\partial_\rho{}^2 + \frac{\nu-1}{r}\partial_\rho + \frac{1}{r^2}\Delta_\theta)\,(v - T_2(r)v).
\end{aligned}$$

Die Darstellung des Laplace-Operators in Polarkoordinaten hat den Vorteil, daß wir die Vertauschungsregeln

$$\begin{aligned}
\Delta_\theta(v - T_2(r)v) &= \Delta_\theta v - T_2(r)\Delta_\theta v, \\
\partial_\rho{}^i(v - T_2(r)v) &= \partial_\rho{}^i v - T_2(r)\partial_\rho{}^i \quad (i = 0,1),
\end{aligned}$$

anwenden können, wobei die Erste aus der Vertauschbarkeit von Δ_θ und τ_r folgt. Führen wir unsere obige Rechnung mit diesen Regeln fort, so gilt

$$\begin{aligned}
\Delta u &= (v - T_2(r)v)\Delta\eta_{r,\varepsilon} \\
&\quad + 2\varepsilon^{-1}\eta'((|\cdot| - r)\varepsilon^{-1})\big(\partial_\rho v - T_1(r)\partial_\rho v\big) \\
&\quad + \eta_{r,\varepsilon}\Bigg((I - T_0(r))\partial_\rho{}^2 v + \frac{\nu-1}{r}(I - T_1(r))\partial_\rho v) + \frac{1}{r^2}(I - T_2(r))\Delta_\theta v)\Bigg).
\end{aligned}$$

Wir schätzen die L_2-Normen der einzelnen Summanden mit Hilfe von Lemma 5.4 ab. Wir machen uns dabei die Regularität und die obige Abschätzung der Sobolevnorm von v durch die L_2-Norm der Funktion zunutze.
Doch zuerst verschaffen wir uns eine Abschätzung der L_∞-Norm von $\Delta\eta_{r,\varepsilon}$. Mit $r > 2\varepsilon$ gilt

$$\|\Delta\eta_{r,\varepsilon}\|_\infty = \|(\partial_\rho{}^2 + \frac{\nu-1}{r}\partial_\rho)\eta_{r,\varepsilon}\|_\infty \le \varepsilon^{-2}(\|\eta''\|_\infty + \frac{\nu-1}{2}\|\eta'\|_\infty).$$

Aus der obigen Ungleichung und $r > \frac{1}{2}$ folgen dann für eine geeignete Konstante $C_2 \ge 0$ die Ungleichungen

$$\begin{aligned}
\|(v - T_2(r)v)\Delta\eta_{r,\varepsilon}\|_2 &\le C_2\,(\|\eta''\|_\infty + \frac{\nu-1}{2}\|\eta'\|_\infty)\,\varepsilon^{3/2}\|v\|_2, \\
\|\nabla\eta_{r,\varepsilon}\cdot\nabla(v - T_2(r)v)\|_2 &\le C_2\,\|\eta'\|_\infty\,\varepsilon^{3/2}\|v\|_2, \\
\|\eta_{r,\varepsilon}\Delta(v - T_2(r)v)\|_2 &\le C_2\,\|\eta\|_\infty\,(\varepsilon^{3/2} + 2(\nu-1)\varepsilon^2 + 4\varepsilon^3)\|v\|_2.
\end{aligned}$$

Wegen diesen Ungleichungen und der bereits gezeigten ersten Ungleichung der Proposition, können wir die Existenz eines von v, r und ε unabhängigen $C_3 \geq 0$ folgern mit

$$\|(L-E)u\|_2 \leq \|\Delta u\|_2 + \|V-E\|_\infty \|u\|_2 \leq C_3 \varepsilon^{3/2} \|v\|.$$

Wir haben $u \in \mathscr{H}^1(\mathbb{R}^\nu \setminus rB)$, $(L-E)u \in L_2$ und für $\|(L-E)u\|_2$ die zweite Ungleichung bewiesen. Damit

$$v_{r,\varepsilon} = v - u \in D(H_{rB}), \quad (H_{rB} - E)v_{r,\varepsilon} = (L-E)u$$

gilt, müssen wir nach [Gri85, Cor. 1.5.1.6] nur noch $\tau_r u = 0$ zeigen. Dies folgt aber sofort aus $v \in \mathring{\mathscr{H}}^1(\mathbb{R}^\nu \setminus rB)$ und der speziellen Gestalt von $T_2(r)v$. $\square$

5.1.4 Extrapolation

Wir fassen den jetzigen Stand der Diskussion zusammen. Wie extrapoliert werden soll lassen wir offen und klären dies im folgenden Abschnitt für Barriere und Brunnen getrennt.

Satz 5.8 *Seien $0 \leq V \in C^{2,1}$, $b > 0$ und $W \in L_\infty(B)$ mit $W = W(|\cdot|)$. Dann existiert für alle $M \geq 0$ ein $C = C(M, \nu, \|V\|_{C^{2,1}}, b) \geq 0$, so daß für alle*

1. $5|\varkappa| \leq 1$,
2. *Eigenfunktionen v von $H_{(1-\varkappa)B}$ zum Eigenwert E mit $|E| \leq b$ und*
3. *$X \in \mathscr{H}^2(0,1)$ mit $\frac{X(1)}{X'(1)} = \varkappa \frac{2-(\nu+1)\varkappa}{2-2\nu\varkappa}$ und*

$$\|(-\Delta + W)X(|\cdot|)\|_{L_2(B)} \leq M \|X(|\cdot|)\|_{L_2(B)},$$

ein $w \in D(H)$ existiert mit

$$\begin{aligned} w(x) &= v(x) && (|x| > 1 + |\varkappa|), \\ w(x) &= \frac{1-\nu\varkappa}{1-\varkappa} \frac{X(|x|)}{X'(1)} \tau_r \partial_\rho v\left(\frac{x}{|x|}\right) && (|x| < 1), \end{aligned}$$

das die folgenden Ungleichungen erfüllt:

$$\begin{aligned}\|w-v\|_2 &\leq C\max\left(|\varkappa|^{7/2}, |X'(1)|^{-1}\|X(|\cdot|)\|_{L_2(B)}\right)\|v\|_2.\\ \|(H+W-E)w\|_2 &\leq C\max\left(|\varkappa|^{3/2}, |X'(1)|^{-1}\|X(|\cdot|)\|_{L_2(B)}\right)\|v\|_2.\end{aligned}$$

Die Konstante C kann monoton wachsend in M gewählt werden.

In den Anwendungsfällen des folgenden Abschnitts können wir wegen der Monotonie der Konstante C in M den Approximationsfehler unabhängig von v, r und X wählen.
Im Beweis wird die Eigenfunktion v in B und in einer Umgebung außerhalb von B modifiziert. Die Terme in der Fehlerabschätzung lassen sich diesen Orten direkt zuordnen.

Beweis Wir konstruieren jeweils $w^- = w\big|_B$ und $w^+ = w\big|_{\mathbb{R}^\nu\setminus B}$ getrennt. Die Voraussetzungen sind so gewählt, daß ein $\mathscr{H}^2$-Anschluß über den Rand möglich ist.

Betrachten wir zuerst w^+. Seien $\varepsilon \in (|\varkappa|, 2|\varkappa|)$ und $r = 1-\varkappa$. Aus $5|\varkappa| < 1$ folgt $r > 2\varepsilon$ und wir können $v_{r,\varepsilon}$ wie in der Proposition 5.7 definieren. Es ist $\varepsilon > |\varkappa| = |1-r|$, so daß $v_{r,\varepsilon}$ in einer Umgebung der Sphäre $\mathbb{S}_{\nu-1}$ mit $T_2(r)v$ übereinstimmt.
Setzen wir $w^+ = v_{r,\varepsilon}$ auf $\mathbb{R}^\nu \setminus B$, so folgen dann aus Proposition 5.6 die Gleichungen

$$\begin{aligned}\tau_1\, w^+ = \tau_1\, v_{r,\varepsilon} &= \varkappa\, \frac{2-(\nu+1)\varkappa}{2(1-\varkappa)}\, \tau_r\, \partial_\rho v,\\ \tau_1\, \partial_\rho w^+ = \tau_1\, \partial_\rho v_{r,\varepsilon} &= \frac{1-\nu\varkappa}{1-\varkappa}\, \tau_r\, \partial_\rho v.\end{aligned}$$

Es gilt weiter

$$\|(L+W-E)w^+\|_{L_2(\mathbb{R}^\nu\setminus B)} \leq \|(H_{rB}-E)v_{r,\varepsilon}\|_{L_2(\mathbb{R}^\nu\setminus rB)} \leq C_1|\varkappa|^{3/2}\|v\|_2.$$

Auf der Einheitskugel B definieren wir w^- in Polarkoordinaten durch

$$w^-(\rho,\theta) = \frac{1-\nu\varkappa}{1-\varkappa}\,\frac{X(\rho)}{X'(1)}\,\tau_r\,\partial_\rho v(\theta) \quad (\rho > 0, \theta \in \mathbb{S}_{\nu-1}).$$

Aus Lemma 5.5 und der Regularität von V folgt $w^- \in \mathscr{H}^2(\mathring{B})$. Auf der Sphäre gilt

$$\begin{aligned}\tau_1\, \partial_\rho w^- &= \frac{1-\nu\varkappa}{1-\varkappa}\, \tau_r\, \partial_\rho v = \tau_1\, \partial_\rho w^+,\\ \tau_1\, w^- &= \frac{1-\nu\varkappa}{1-\varkappa}\, \frac{X(1)}{X'(1)}\, \tau_r\, \partial_\rho v = \frac{1-\nu\varkappa}{1-\varkappa}\varkappa\, \frac{2-(\nu+1)\varkappa}{2(1-\nu\varkappa)}\, \tau_r\, \partial_\rho v = \tau_1\, w^+.\end{aligned}$$

Im Innern von B gilt mit $(X \otimes \tau_r\, \partial_\rho v)(\rho,\theta) = X(\rho)(\tau_r\, \partial_\rho v)(\theta)$ die Gleichung

$$\begin{aligned}(L+W-E)X \otimes \tau_r\, \partial_\rho v \quad &= \quad (-\partial_\rho{}^2 - \frac{\nu-1}{r}\partial_\rho + W)X \otimes \tau_r\, \partial_\rho v\\ &\quad + (V-E)X \otimes \tau_r\, \partial_\rho v\\ &\quad + X \otimes \tau_r\, \Delta_\theta \partial_\rho v,\end{aligned}$$

wobei wir wieder die Vertauschbarkeit von Δ_θ und Spur ausgenutzt haben. Aufgrund Lemma 5.5, $V \in C^{3-1,1}$ und der Stetigkeit der Spurbildung existiert ein $C_2 \geq 0$, so daß wir wegen der obigen Gleichheit die L_2-Norm von $(L+W-E)w^-$ auf B abschätzen können

$$\begin{aligned}&\|(L+W-E)w^-\|_{L_2(B)} \leq\\ &\qquad \leq C_2 \|v\|_2\, (M + \|V\|_\infty + b + 1)\, |X'(1)|^{-1} \|X(\,\cdot\,)\|_{L_2(B)}.\end{aligned}$$

Die Funktion w ist wegen der Anschlußbedingungen aus $\mathscr{H}^1 \cap \mathscr{H}^2_{\mathrm{loc}}$. Auf $\mathbb{R}^\nu \setminus \mathbb{S}_{\nu-1}$ ist $h = (L+W-E)w \in L_2$, und wir können $w \in D(H)$ folgern mit $(H+W-E)w = h$. Aus den vorherigen Abschätzungen folgt die behauptete zweite Ungleichung.

Für die L_2-Norm der Differenz gilt

$$\|w-v\|_2 = \|w^-\|_{L_2(B)} + \|v_{r,\varepsilon} - v\|_2.$$

Nach Konstruktion von w^- und Proposition 5.7 folgt dann die erste behauptete Ungleichung.

Ebenfalls nach Konstruktion von w bzw. der Definition von $\eta_{r,\varepsilon}$ gelten die zusätzlichen Identitäten. $\square$

Die Konstruktion von Extrapolationslösungen hat mit Satz 5.8 den Charakter eines Kalküls. Insbesondere ist die rechte Seite der Anschlußbedingung lokal invertierbar in $\varkappa = 0$ mit Ableitung 1. Skaliert der Operator

$$-\partial_\rho{}^2 - \frac{\nu-1}{r}\partial_\rho + \lambda W,$$

so ist die Anschlußbedingung für eine geeignet skalierte Lösung für große λ erfüllbar.

5.2 Störpotentiale mit definitem Vorzeichen

Um durch eine Extrapolationslösung eine approximative Eigenfunktion von $H(\lambda)$ zu finden, reicht es wegen des vorherigen Abschnitts eine passende Dirichlet-Eigenfunktion und eine Fortsetzung in das Störpotential zu finden. Obwohl die Fehlerschranken aus Satz 5.8 nicht vom exponentiellen Typ sind, sind sie für unsere Zwecke ausreichend.

Wir hatten einleitend festgestellt, daß die Konstruktionen von approximativen Eigenfunktionen zu Abschätzungen der Abstände der Spektren von $H(\lambda)$ und $H_{(1-\varkappa)B}$ führen. Den Zusammenhang zu den Eigenwerten von $H_S = H_B$ hatten wir bisher offen gelassen.
Die entscheidende Vorarbeit haben wir bereits in Kapitel 2 geleistet. Setzen wir $S = B$, so stimmt $S(\varkappa)$ aus Lemma 2.13 mit $(1-\varkappa)B$ überein. Der Rand von B ist analytisch und nach 2.13 konvergieren für $\varkappa$ gegen Null die Operatoren $H_{(1-\varkappa)B}$ im Normresolventensinn gegen H_B. Das Spektrum von $H_{(1-\varkappa)B}$ ist also stetig in $\varkappa = 0$.
Mit einem Dreiecksargument können wir wechselseitig die Abstände von $\sigma_d(H_{(1-\varkappa)B})$ und $\sigma_d(H(\lambda))$ zu $\sigma_d(H_B) \cap (a,b)$ für kleine $\varkappa$ resp. große λ abschätzen.

5.2.1 Extrapolation in der Barriere

Neben der Rotationsinvarianz der Potentialbarriere W setzen wir in diesem Unterabschnitt die Existenz eines $p \geq 0$ voraus mit

$$W(x) = \chi_B(x)(1-|x|)_+^p \quad (x \in \mathbb{R}^\nu). \tag{5.4}$$

Wegen der einführenden Bemerkungen am Anfang dieses Kapitels konvergiert $H(\lambda)$ im Normresolventensinne gegen H_B. Die Eigenwertzweige von $H(\lambda)$ verlaufen monoton steigend in der Lücke (a,b) des wesentlichen Spektrums. Nachdem höchstens endlich Viele das Intervall durchquert haben, werden für große λ entsprechend der spektralen Vielfachheit der Eigenwerte von H_B Eigenwertzweige von $H(\lambda)$ in der Lücke (a,b) gefangen und konvergieren monoton wachsend gegen sie. Wie wir sehen werden, hängt die Konvergenzgeschwindigkeit bzw. der Verlauf entscheidend vom Randverhalten der Barriere ab.

Wir sind im Besonderen an der asymptotischen Gestalt der Eigenwertzweige interessiert. Wegen der Vielfachheiten der Eigenwerte von H_B bzw. $H_{(1-\varkappa)B}$ erhält man im allgemeinen nur Schranken für den Verlauf für große Kopplungsparameter.
Ist hingegen E_B ein einfacher Eigenwert von H_B, so haben $H_{(1-\varkappa)B}$ und $H(\lambda)$ für hinreichend kleine $\varkappa$ und große λ in einer Umgebung von E_B nur einfache Eigenwerte. In diesem Fall gewinnen wir aus den Abschätzungen eine Asymptotik.
Im Folgenden sei E_B ein einfacher Eigenwert von H_B in der Spektrallücke (a,b) von H. Nach Theorem 4.1 und Bemerkung 4.3 ist dies keine wirkliche Einschränkung. Mit v_B bezeichnen wir einen zugehörigen normierten Eigenvektor. Aufgrund des Korollars 2.16 bzw. der Normresolventenkonvergenz von $H(\lambda)$ gegen H_B gilt die folgende stärkere Aussage.

Proposition 5.9 *Der Schrödinger-Operator H erfülle die Voraussetzung 2.5. Es seien a, b $\in \mathbb{R}$ wie in 2.5 und $E_B \in (a,b)$ ein einfacher Eigenwert von H_B. Weiter sei $p \geq 0$ und $W = \chi_B(1-|\cdot|)^p$.*
Dann gilt

1. *Es gibt ein $\varepsilon_0 > 0$ und eine stetige Familie*

$$\left(E_{(1-\varkappa)B}, v_{(1-\varkappa)B}\right)_{|\varkappa|\leq\varepsilon_0} \subset (a,b)\times L_2$$

von Eigenwerten und zugehörigen normierten Eigenvektoren, so daß unter Berücksichtigung der Vielfachheit, $E_{(1-\varkappa)B}$ der einzige Eigenwert von $H_{(1-\varkappa)B}$ in der Nähe von E_B ist.

2. *Es gibt ein $\lambda_0 > 0$ und eine reell-analytische Familie*

$$\left(E(\lambda), u_\lambda\right)_{\lambda\geq\lambda_0} \subset (a,b)\times L_2$$

von Eigenwerten und zugehörigen normierten Eigenvektoren mit $\lim_{\lambda\to\infty} u_\lambda = v_B$, *so daß unter Berücksichtigung der Vielfachheit,* $E(\lambda)$ *der einzige Eigenwert von* $H(\lambda)$ *in der Nähe von* E_B *ist.*

Der Beweis des folgenden Lemmas benutzt die Methoden des Beweises von Lemma 5.5. Aus der Stetigkeit der Trajektorie $(v_{(1-\varkappa)B})_{|\varkappa|\le\varepsilon}$ und diesem Lemma folgt dann die Stetigkeit der radialen Approximationen $T_n(1-\varkappa)v_{(1-\varkappa)B}$ in $\varkappa$.

Lemma 5.10 *Es seien* $k \in \mathbb{N}$ *und* $0 \le V \in C^{k-1,1}$.
Weiter sei E_B *ein einfacher Eigenwert von* H_B *mit Eigenfunktion* v_B. *Für* $(v_{(1-\varkappa)B})_{|\varkappa|\le\varepsilon_0}$ *aus Proposition 5.9 und* $m = 0,\dots,k+1$ *ist dann die folgende Familie in* $L_2(\mathbb{S}_{\nu-1})$ *stetig*

$$\left(\tau_{(1-\varkappa)}\,\partial_\rho{}^m v_{(1-\varkappa)B}\right)_{|\varkappa|\le\varepsilon_0}.$$

Beweis Unter der unitären Fortsetzung von

$$U(r)\varphi(x) = r^{\nu/2}\varphi(rx) \quad (r>0,\ \varphi\in C_c^\infty,\ x\in\mathbb{R}^\nu)$$

ist der Schrödinger-Operator H_{rB} mit Dirichlet-Bedingungen auf rB unitär äquivalent zu $-r^{-2}\Delta + V(r\,\cdot)$ mit Dirichlet-Bedingungen auf B. Die Eigenfunktionen von H_{rB} transformieren sich entsprechend zu Eigenfunktionen von $-r^{-2}\Delta + V(r\,\cdot)$.
Mit $u_\varkappa = U(1-\varkappa)v_{(1-\varkappa)B}$, $E_\varkappa = E_{(1-\varkappa)B}$ und $V_\varkappa = V((1-\varkappa)\,\cdot)$ gilt dann $u_\varkappa \in \mathring{\mathscr{H}}^1(\mathbb{R}^\nu\setminus B)$ und

$$\left(-\Delta + (1-\varkappa)^{-2}(V_\varkappa - E_\varkappa)\right)u_\varkappa = 0.$$

Nach Lemma 5.5 ist $u_\varkappa \in \mathscr{H}^{k+2}([1<|\cdot|<2])$. Wir zeigen, daß $(u_\varkappa)_{|\varkappa|\le\varepsilon_0}$ eine stetige Familie in $\mathscr{H}^{k+2}([1<|\cdot|<3/2])$ ist, denn aus $\partial_\rho{}^m u_\varkappa = (1-\varkappa)^{\nu/2+m}(\partial_\rho v)((1-\varkappa)\,\cdot)$ und der Stetigkeit der Spurbildung (Proposition 5.1) folgt dann die Behauptung.

Um die Notation zu vereinfachen zeigen wir nur die Stetigkeit in $\varkappa = 0$. Seien also zusätzlich $u = u_0$ und $E = E_0$.
Es gilt

$$\begin{aligned}(-\Delta + (1-\varkappa)^{-2}(V_\varkappa - E_\varkappa))(u-u_\varkappa) &=\\ &= (-\Delta + (1-\varkappa)^{-2}(V_\varkappa - E_\varkappa))u\\ &= ((1-\varkappa)^{-2}(V_\varkappa - E_\varkappa) - (V-E))u = h_\varkappa.\end{aligned}$$

Sei $\eta \in C_c^\infty$ mit $K = \operatorname{supp}\eta \subset K(0,2)$ und

$$0 \leq \eta \leq 1, \quad \eta\big|_{3/2B} = 1.$$

Es gilt dann

$$(-\Delta + (1-\varkappa)^{-2}(V_\varkappa - E_\varkappa))\eta(u-u_\varkappa) = \eta_l h_\varkappa - [\Delta, \eta](u-u_\varkappa).$$

Identifiziert man nach Evans ([Eva98, 5.8.b, Thm. 4]) $C^{k-1,1}$ mit $W^{k,\infty}_{\text{loc}}$, so folgt aus $\eta u \in \mathscr{H}^{k+2}$, daß $\eta h_\varkappa$ in $\mathscr{H}^k$ liegt und ein $C_k \geq 0$ existiert mit

$$\|\eta h_\varkappa\|_{k,2} \leq C_k \|(1-\varkappa)^{-2}(V_\varkappa - E_\varkappa) - (V-E)\|_{C^{k-1,1}(K)} \|\eta u\|_{2,k}.$$

Wir sehen, daß $\|\eta h_\varkappa\|_{k,2}$ gegen Null konvergiert für $\varkappa$ gegen Null.

Es ist $\eta(u-u_\varkappa) \in \mathring{\mathscr{H}}^1(K(0,2)\setminus B)$ und nach Satz 2.3 existiert eine weitere Konstante C mit

$$\begin{aligned} \|\eta(u-u_\varkappa)\|_{2,k+2} &\leq C \ (\|\eta(u-u_\varkappa)\|_2 + \|\eta h_\varkappa + \eta(u-u_\varkappa)\|_{2,k} \\ &\leq C \ (2\|\eta(u-u_\varkappa)\|_{2,k} + \|\eta h_\varkappa\|_{k,2}). \end{aligned}$$

Mit der obigen Beobachtung konvergiert offenbar $\eta(u-u_\varkappa)$ in $\mathscr{H}^{k+2}$ gegen die Nullfunktion, wenn die Funktionenfolge es in $\mathscr{H}^k$ tut.

Die unitären Transformationen $U(1-\varkappa)$ sind stark stetig in $\varkappa = 1$, und für $k = 0$ folgt die Behauptung aus

$$\|\eta(u-u_\varkappa)\|_{2,0} = \|\eta(u-u_\varkappa)\|_2 = \|\eta(v_B - U(1-\varkappa)v_{(1-\varkappa)B})\|_2.$$

Aus $\eta = 1$ auf $[1 < |\cdot| < 3/2]$ folgt dann die Behauptung. □

Aus der Familie von Funktionen $\left(v_{(1-\varkappa)B}\right)$ konstruieren wir approximative Eigenfunktionen von $H(\lambda)$. Um Satz 5.8 anwenden zu können, benötigen wir eine Näherungslösung von

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\nu-1}{r}\frac{d}{dr} + \lambda W\right)X = 0.$$

Vernachlässigt man die erste Ableitung nach r und berücksichtigt das Verschwinden von W für $s = 1-r$ gegen Null, so sucht man eine Lösung von

$$y''(s) = s^p y(s)$$

für s nahe bei Null.
Mit $q = \frac{1}{p+2}$ ist nach [AS84, 9.1.51, 9.6.2, 9.6.3] durch

$$K(s) = \sqrt{s} K_q(2qs^{(p+2)/2}) \tag{5.5}$$

eine exponentiell fallende Lösung gegeben, wobei K_q die modifizierte Besselfunktion zweiter Gattung q-ter Ordnung ist. Schränken wir durch eine Abschneidefunktion die Funktion

$$F(r) = K\left(\lambda^{1/(p+2)}(1-r)\right) \quad (r > 0)$$

auf einen Randbereich von B ein, erhalten wir eine Extrapolationslösung für $H + \lambda W$ auf B. Die so konstruierte Näherungslösung X erfüllt die Randbedingung $X(1)/(X'(1)) = \lambda^{-1/(p+2)} K(0)/K'(0)$.

Hier und im Folgenden seien zwei Funktionen $f(\lambda)$, $g(\lambda)$ genau dann asymptotisch gleich im Unendlichen $f(\lambda) \sim g(\lambda)$, wenn der Quotient der beiden Funktionen für λ gegen Unendlich gegen 1 konvergiert.
Es gilt das folgende Theorem.

Theorem 5.11 *Sei* $0 \leq V \in C^{2,1}$.
Der Schrödinger-Operator H erfülle die Voraussetzung 2.5. Es seien a, b wie in 2.5 und $E_B \in (a,b)$ ein einfacher Eigenwert von H_B mit Eigenelement v_B. Weiter sei $p \geq 0$ und $W = \chi_B(1-|\cdot|)^p$.
Dann existieren

1. *ein* $C = C(v, \|V\|_{C^{2,1}}, b) \geq 0$,
2. *ein* $\Lambda \geq \lambda_0$,
3. *eine Funktion* $\varepsilon : [\Lambda, \infty) \longrightarrow (0, \infty)$ *mit* $\varepsilon(\lambda) \sim \lambda^{-1/(p+2)} \frac{K(0)}{K'(0)}$ *und*
4. *eine stetige Familie* $\left(w_\lambda\right)_{\lambda \geq \Lambda} \subset L_2$ *von schwach differenzierbaren Funktionen aus* $D(H(\lambda))$ *mit* $\lim_{\lambda \to \infty} \|w_\lambda - v_B\| = 0$,

so daß die folgende Ungleichung erfüllt ist:

$$\|(H(\lambda) - E_{(1-\varepsilon(\lambda))B}) w_\lambda\|_2 \leq C\varepsilon(\lambda)^{3/2} \|w_\lambda\|_2.$$

Beweis Ausgehend von der Familie $\left(v_{(1-\varkappa)B}\right)$ extrapolieren wir für positive $\varkappa$ vom Barrierenrand $\mathbb{S}_{\nu-1}$ in die Barriere. Die eigentliche Konstruktion der Extrapolationslösungen haben wir im Beweis von Satz 5.8 ausgeführt.

Sei $\eta \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ mit

$$0 \le \eta \le 1, \quad \eta\big|_{[-1/4,1/4]} = 1, \quad \operatorname{supp}\eta \subset [-1/2,1/2]. \tag{5.6}$$

Mit K wie in Gleichung (5.5) setzen wir

$$X(r) = \eta(1-r)K_{\lambda,p}(1-r) = \eta(1-r)K\left(\lambda^{1/(p+2)}(1-r)\right). \tag{5.7}$$

Die Anschlußbedingung aus Satz 5.8 lautet dann

$$\frac{X(1)}{X'(1)} = \lambda^{-1/(p+2)}\frac{K(0)}{K'(0)} = \varkappa\frac{2-(\nu+1)\varkappa}{2-2\nu\varkappa}.$$

Für $\varkappa = 0$ ist die rechte Seite dieser Gleichung Null. Sie hat in $\varkappa = 0$ die Ableitung 1. Sie ist damit lokal invertierbar. Die Gleichung besitzt für große λ eine Auflösung $\varepsilon = \varepsilon(\lambda)$ nach $\varkappa$. Aus der Positivität der linken Seite und Ableitung 1 der rechten Seite folgt die Positivität von $\varepsilon(\lambda)$ und die Asymptotik für λ gegen Unendlich. Insbesondere ist ein Teil der Fehlerabschätzung durch $\varepsilon^{3/2}$ gegeben.

Nach [AS84, 9.7.2] existiert ein $C_1 \ge 0$, so daß für $1/2 \le (1-r) \le 3/4$ und λ hinreichend groß gilt

$$0 \le X(r) \le K_{\lambda,p}(1-r) \le C_1 \exp\left(-\frac{\lambda^{1/(p+2)}}{2}\right).$$

Mit Gleichung (5.6) folgt aus der obigen Abschätzung

$$\begin{aligned}\int_0^1 |X(r)|^2\,dr, \int_{1/2}^1 \left|K_{\lambda,p}(1-r)\right|^2 dr = \\ = \int_0^{1/4}\left|K_{\lambda,p}(s)\right|^2 ds + O\left(\exp\left(-\lambda^{1/(p+2)}\right)\right).\end{aligned} \tag{5.8}$$

Aus der Asymptotik

$$\begin{aligned}\int_0^{1/4}|K_{\lambda,p}(s)|^2\,ds &= \lambda^{-1/(p+2)}\int_0^{\lambda^{1/(p+2)}/4}|K(s)|^2\,ds \\ &\sim \lambda^{-1/(p+2)}\int_0^\infty |K(s)|^2\,ds,\end{aligned} \tag{5.9}$$

folgt, daß die beiden obigen Integrale asymptotisch gleich sind. Weiter gilt, daß die Integrale wie $\varepsilon(\lambda)$ im Unendlichen verschwinden.

Mit $s = 1 - r$ ist

$$\begin{aligned}(-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\nu-1}{r}\frac{d}{dr} + \lambda W)X(r) &= \eta(s)({K_{\lambda,p}}''(s) - \lambda s^p K_{\lambda,p}(s)) \\ &\quad + (\frac{\nu-1}{1-s}\eta'(s) - \eta''(s))K_{\lambda,p}(s) \\ &\quad + (\frac{\nu-1}{1-s}\eta(s) - \eta'(s)){K_{\lambda,p}}'(s).\end{aligned}$$

Durch $\varphi(s) = \frac{\nu-1}{1-s}\eta(s) - \eta'(s)$ wird eine C_c^∞-Funktion definiert, und mit

$$2|{K_{\lambda,p}}'|^2 = |{K_{\lambda,p}}^2|'' - 2K_{\lambda,p}{K_{\lambda,p}}'' = |{K_{\lambda,p}}^2|'' - 2\lambda s^p {K_{\lambda,p}}^2,$$

können wir abschätzen:

$$\begin{aligned}\int |\varphi {K_{\lambda,p}}'|^2\, ds &\leq \frac{1}{2}\int |\varphi|^2(|{K_{\lambda,p}}^2|'' - 2\lambda s^p {K_{\lambda,p}}^2)\, ds \\ &\leq \frac{1}{2}\int (|\varphi|^2)''{K_{\lambda,p}}^2\, ds \\ &\leq \frac{1}{2}\|(|\varphi|^2)''\|_\infty \int_{1/2}^{3/4} {K_{\lambda,p}}^2\, ds.\end{aligned}$$

Berücksichtigen wir, daß

$$\int_0^1 |X(r)|^2\, dr, \int_{1/2}^1 \left|K_{\lambda,p}(1-r)\right|^2 dr$$

die gleiche Asymptotik haben, so folgt die Existenz einer Konstanten $C_2 \geq 0$, so daß gilt:

$$\|(-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\nu-1}{r}\frac{d}{dr} + \lambda W)X\|_{L_2(dr)} \leq C_2\|X\|_{L_2(dr)}.$$

Wegen $\operatorname{supp}\eta \subset \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$ können wir auf Kosten einer größeren Konstanten $C_3 \geq C_2$ die $L_2(dr)$-Norm durch die $L_2(r^{\nu-1}dr)$ ersetzen. Damit ist ein Teil der Voraussetzungen von Satz 5.8 erfüllt.
Aus $X'(1) = \lambda^{1/(p+2)}K'(0)$ folgt aus den Gleichungen (5.8) und (5.9) die Abschätzung

$$\|X/X'(1)\|_{L_2(B)} = O\left(\varepsilon^{3/2}\right),$$

weshalb wir den Approximationsfehler durch $O(\varepsilon^{3/2})\|v_{(1-\varepsilon)B}\|_2$ abschätzen können.

Verfolgen wir die Konstruktion von w_λ zurück (Proposition 5.7, Satz 5.8, Gleichung (5.7)), so erkennen wir mit Hilfe des vorherigen Lemmas, daß w_λ durch stetige Operationen aus der Familie von Eigenfunktionen $(v_{(1-\varkappa)B})$ hervorgeht.
Nach Satz 5.8 und unseren Abschätzungen gilt

$$\|w_\lambda - v_B\|_2 \leq \|w_\lambda - v_{(1-\varepsilon)B}\|_2 + \|v_{(1-\varepsilon)B} - v_B\|_2 \longrightarrow 0 \quad (\lambda \to \infty).$$

Die Asymptotik der Familie (w_λ) ist damit bewiesen. Insbesondere ist $\|v_{(1-\varepsilon)B}\|_2 = O(\|w_\lambda\|_2)$, so daß wir den Approximationsfehler durch $O\left(\varepsilon^{3/2}\|w_\lambda\|_2)\right)$ abschätzen können. □

Die oben konstruierte Familie von Extrapolationslösungen hat zusätzliche Eigenschaften, von denen wir auf eine asymptotische Entwicklung des Eigenwertzweiges von $H(\lambda)$ nahe bei E_B schließen können.

Lemma 5.12 *Die Voraussetzungen von Theorem 5.11 seien erfüllt. Dann erfüllt die in Theorem 5.11 konstruierte Familie $(w_\lambda)_{\lambda\geq\Lambda} \subset L_2$ von Funktionen für λ gegen ∞ die folgenden Asymptotiken:*

$$\|\chi_B w_\lambda\|_{L_2}^2 \sim \|\tau_1\, \partial_\rho v_B\|_{L_2(\mathbb{S}_{\nu-1})}^2 \int_0^\infty \left|\frac{K(s)}{K(0)}\right|^2 ds\, \lambda^{-3/(p+2)},$$

$$\left\langle W w_\lambda\, , w_\lambda \right\rangle \sim \|\tau_1\, \partial_\rho v_B\|_{L_2(\mathbb{S}_{\nu-1})}^2 \int_0^\infty s^p \left|\frac{K(s)}{K(0)}\right|^2 ds\, \lambda^{-1}\lambda^{-1/(p+2)}.$$

Beweis Wir greifen auf einige Details und Bezeichnungen aus dem Beweis des Theorems 5.11 zurück.
Sei X wie in Gleichung (5.7):

$$X(r) = \eta(1-r)K_{\lambda,p}(1-r) = \eta(1-r)K\left(\lambda^{1/(p+2)}(1-r)\right).$$

Sei weiter $\delta = \delta(\lambda) > 0$ mit

$$\delta(\lambda) \longrightarrow 0, \quad \delta(\lambda)\lambda^{1/(p+2)} \longrightarrow \infty \quad (\lambda \longrightarrow \infty).$$

Nach [AS84, 9.7.2] existiert ein $C_1 \geq 0$, so daß für $\delta \leq (1-r)$ gilt

$$0 \leq X(r) \leq K_{\lambda,p}(1-r) \leq C_1 \exp\left(-\delta\lambda^{1/(p+2)}\right).$$

Wir erhalten mit dieser Abschätzung

$$\begin{aligned}
&\int_0^1 (1-r)^p |X(r)|^2 r^{\nu-1}\,dr \\
&\qquad = \int_{1-\delta}^1 (1-r)^p |K_{\lambda,p}(1-r)|^2 r^{\nu-1}\,dr + O\left(\exp\left(-\delta\lambda^{1/(p+2)}\right)\right) \\
&\qquad = \int_0^\delta s^p |K_{\lambda,p}(s)|^2 (1-s)^{\nu-1}\,ds + o(1)
\end{aligned}$$

Das letzte Integral können wir abschätzen durch

$$\begin{aligned}
&\lambda^{(p+1)/(p+2)} \int_0^{\delta\lambda^{1/(p+2)}} t^p |K(t)|^2\,dt \geq \\
&\qquad \geq \int_0^\delta s^p \left|K\left(\lambda^{1/(p+2)} s\right)\right|^2 (1-s)^{\nu-1}\,ds \\
&\qquad \geq (1-\delta)^{\nu-1} \lambda^{(p+1)/(p+2)} \int_0^{\delta\lambda^{1/(p+2)}} t^p |K(t)|^2\,dt,
\end{aligned}$$

und erhalten für λ gegen ∞ die asymptotische Aussage

$$\int_0^1 (1-r)^p |X(r)|^2 r^{\nu-1}\,dr \sim \lambda^{(p+1)/(p+2)} \int_0^\infty t^p |K(t)|^2\,dt.$$

Aus der Unabhängigkeit der Argumentation von der Wahl von $p \geq 0$ und der speziellen Gestalt der Funktion w_λ im Innern von B,

$$w_\lambda(x) = \frac{1-\nu\varepsilon}{1-\varepsilon}\,\frac{X(|x|)}{X'(1)}\;\tau_{(1-\varepsilon)}\,\partial_\rho v\left(\frac{x}{|x|}\right),$$

folgen die Behauptungen. □

Der wesentliche Gedanke bei der Entwicklung des Extrapolationsansatzes war die Nachahmung der Liouville-Green-Approximation. An dieser Stelle offenbart sich der Unterschied zwischen Ansatz und Analyse, denn wir wissen nicht, ob für große λ die extrapolierten Funktionen w_λ die Eigenfunktionen u_λ punktweise approximieren.
Der Glaube, daß dies im L_2-Sinne wahr ist, ist die Motivation für das folgende Lemma.

Lemma 5.13 *Die Voraussetzungen von Theorem 5.11 seien erfüllt. Dann gilt für* $(w_\lambda)_{\lambda\geq\Lambda}$ *aus Satz 5.11 und* $(u_\lambda)_{\lambda\geq\lambda_0}$ *wie in Voraussetzung 5.9 die folgende asymptotische Abschätzung:*

$$\left|\left\langle Ww_\lambda\,,w_\lambda\right\rangle - \left\langle Wu_\lambda\,,u_\lambda\right\rangle\right| = o\left(\left\langle Ww_\lambda\,,w_\lambda\right\rangle\right) \quad (\lambda\to\infty).$$

Beweis Die Bezeichnungen beziehen sich auf die vorherigen Sätze und Beweise. Um die Lesbarkeit zu erhöhen, lassen wir zum Teil die Indizes weg. Wir werden zeigen

$$\left|\|W^{1/2}w\|_2 - \|W^{1/2}u\|_2\right| = o\left(\|W^{1/2}w\|_2\right).$$

Insbesondere gilt dann $\|W^{1/2}u\|_2 = O\left(\|W^{1/2}w\|_2\right)$. Nach Quadrieren erhalten wir die Behauptung.
Wegen Satz 5.11 und Lemma 5.12 reicht es zu zeigen

$$\|W^{1/2}(w-u)\|_2 = o\left(\left(\lambda^{-1}\lambda^{-1/(p+2)}\right)^{1/2}\right) = o\left(\varepsilon^{(p+3)/2}\right).$$

Wir schreiben

$$W^{1/2}(w-u) = \frac{1}{\left\langle w\,,u\right\rangle}W^{1/2}\left(w-\left\langle w\,,u\right\rangle u\right) + \left(1-\frac{1}{\left\langle w\,,u\right\rangle}\right)W^{1/2}w.$$

Nach Proposition 5.9 und Satz 5.11 gilt $\lim_{\lambda\to\infty}\left\langle w\,,u\right\rangle = \left\langle v_B\,,v_B\right\rangle = 1$. Wir müssen uns also nur noch den Summanden $W^{1/2}\left(w-\left\langle w\,,u\right\rangle u\right)$ genauer untersuchen.

Wir werden die Funktionen w und u in geeigneter Weise auf den Randbereich von B einschränken, um das Verschwinden der Potentialbarriere ausnutzen zu können. Das exponentielle Lokalisieren der Eigenfunktionen wird uns dabei hilfreich sein.

Zunächst erinnern wir an einige bereits bekannte Ungleichungen.
Wir setzen $Q = I - P_{\{E(\lambda)\}}(H(\lambda))$, dann gilt

$$Qw = w - \left\langle w\,,u\right\rangle u.$$

Wegen Theorem 5.11, Lemma 2.1 und Proposition 3.7 existiert ein $C_1\geq 0$ mit

$$\begin{aligned}
\|(H(\lambda)-E_{(1-\varepsilon(\lambda))B})w\|_2 &\leq C_1\varepsilon^{3/2}\|w\|_2,\\
|E(\lambda)-E_{(1-\varepsilon(\lambda))B}| &\leq C_1\varepsilon^{3/2},\\
\|Qw\|_2 &\leq C_1\varepsilon^{3/2}\|w\|_2.
\end{aligned}$$

Bei den obigen Ungleichungen haben wir ausgenutzt, daß $E(\lambda)$ und E_B einfache Eigenwerte sind.

Mit $M = \mathbb{R}^\nu \setminus B$ ist $W = \operatorname{dist}(\,\cdot\,, M)^p$. Die Voraussetzung 3.2 ist also erfüllt. Setzen wir für $\alpha \in \big(p/(p+1), 1\big)$

$$\Omega(\lambda) = \big[\,|\cdot| < 1 - \varepsilon^\alpha\,\big],$$

so gilt für ein geeignetes $\delta > 0$ und $\beta = 1 - \alpha$

$$\|w\|_{\mathscr{H}^1(\Omega)}, \|u\|_{\mathscr{H}^1(\Omega)} = O\Big(\exp\Big(-\delta\lambda^{\beta/2}\Big)\Big).$$

Letzteres erhalten wir durch Anwendung des Korollars 3.4 auf die Familien von Eigenlösungen (u_λ) bzw. $(K_{\lambda,p})$ aus Gleichung (5.7).

Sei weiter $\eta_\lambda \in C_c^\infty$ mit $\operatorname{supp} \eta_\lambda \subset \Omega$ eine Abschneidefunktion mit

$$0 \le \eta_\lambda \le 1, \quad \eta_\lambda\big|_{[\,|\cdot|<1-2\varepsilon^\alpha]} = 1.$$

Setzen wir $\psi_\lambda = 1 - \eta_\lambda$, so sind die Ableitungen von ψ_λ polynomiell in λ beschränkt. Aus den obigen Ungleichungen folgt dann

$$\|[\Delta,\psi]u\|_2, \|[\Delta,\psi]w\|_2, \|[\Delta,\psi]Qw\|_2 = O\Big(\exp\Big(-\delta\lambda^{\beta/2}\Big)\Big),$$

wobei wir ohne Einschränkungen das gleiche δ wie vorher gewählt haben.

Aus der Dreiecksungleichung folgt

$$\|W^{1/2}Qw\|_2 = \|W^{1/2}\psi Qw\|_2 + O\Big(\exp\Big(-\delta\lambda^{\beta/2}\Big)\Big).$$

Für ψQw ist nach Definition $T_0(1-2\varepsilon^\alpha)\psi Qw = 0$ und wir können mit Hilfe des

Lemmas 5.4 fortfahren

$$\begin{aligned}
&\|W^{1/2}\psi Q w\|_2^2 \\
&\quad\le\ \varepsilon^{p\alpha}\|(I-T_0(1-2\varepsilon^{\alpha}))\psi Q w\|_2^2 \\
&\quad\le\ \varepsilon^{p\alpha} C_2\,\varepsilon^{2\alpha}\|\nabla\psi Q w\|_2^2 \\
&\quad\le\ C_2\,\varepsilon^{(p+2)\alpha}\big(\big\langle (H(\lambda)-E(\lambda))\,\psi Q w,\,\psi Q w\big\rangle + (\|V\|_\infty + b)\,\|\psi Q w\|_2^2\big) \\
&\quad\le\ C_2\,\varepsilon^{(p+2)\alpha}\Big(\big\langle\, \psi(H(\lambda)-E_{(1-\varepsilon B)})w,\,\psi Q w\big\rangle + \\
&\qquad\qquad + |E_{(1-\varepsilon B)} - E(\lambda)|\,\|\psi Q w\|_2^2 + \\
&\qquad\qquad + \big\langle [-\Delta,\psi]\,Q w,\,\psi Q w\big\rangle + \\
&\qquad\qquad + (\|V\|_\infty + b)\,\|\psi Q w\|_2^2\Big) \\
&\quad\le\ C_3\,\varepsilon^{(p+2)\alpha}\left(\varepsilon^{3/2}\right)^2 = o\left(\varepsilon^{p+3}\right).
\end{aligned}$$

□

Das Hauptresultat dieses Unterabschnitts ist eine einfache Folgerung aus dem vorherigen Lemma und Satz 5.8.

Theorem 5.14 *Sei $0 \le V \in C^{2,1}$. Der Schrödinger-Operator H erfülle die Voraussetzung 2.5. Es seien a, $b \in \mathbb{R}$ wie in 2.5 und $E_B \in (a,b)$ ein einfacher Eigenwert von H_B.*
Dann existiert für $p \ge 0$ und $W = \chi_B(1-|\cdot|)^p$ ein Eigenwertzweig $(E(\lambda))_{\lambda\ge\lambda_0}$ von $H(\lambda)$ mit

$$\begin{aligned}
&E(\lambda) = \\
&= E_B - \|\tau_1\,\partial_\rho v_B\|^2_{L_2(\mathbb{S}_{\nu-1})}\int_0^\infty s^p\left|\frac{K(s)}{K(0)}\right|^2 ds\lambda^{-1/(p+2)} + o\left(\lambda^{-1/(p+2)}\right).
\end{aligned}$$

Beweis Wegen Proposition 5.9 existiert eine Familie

$$\left(E(\lambda),u_\lambda\right)_{\lambda\ge\lambda_0}$$

von Eigenwerten und zugehörigen normierten Eigenfunktionen mit $\lim_{\lambda\to\infty} E(\lambda) = E_B$. Aufgrund des Feynman-Hellmann-Theorems gilt für große λ

$$E_B - E(\lambda) = \int_\lambda^\infty E'(\mu)\,d\mu = \int_\lambda^\infty \langle W u_\mu , u_\mu \rangle \,d\mu.$$

Sei (w_λ) wie in Theorem 5.11. Die Familie $(\langle W w_\lambda , w_\lambda \rangle)$ ist nach 5.11 stetig und ist wegen Lemma 5.12 asymptotisch gleich

$$\|\tau_1\,\partial_\rho v_B\|^2_{L_2(\mathbb{S}_{\nu-1})} \int_0^\infty s^p \left|\frac{K(s)}{K(0)}\right|^2 ds\lambda^{-1}\lambda^{-1/(p+2)}.$$

Aus Lemma 5.13 und der Regel von De L'Hospital folgt dann im Grenzwert λ gegen Unendlich

$$\begin{aligned}\int_\lambda^\infty \langle W u_\mu , u_\mu \rangle \,d\mu \quad &\sim \quad \int_\lambda^\infty \langle W w_\mu , w_\mu \rangle \,d\mu \\ &\sim \quad \|\tau_1\,\partial_\rho v_B\|^2_{L_2(\mathbb{S}_{\nu-1})} \int_0^\infty s^p \left|\frac{K(s)}{K(0)}\right|^2 ds\lambda^{-1/(p+2)}.\end{aligned}$$

Wegen der obigen Asymptotik muß der Approximationsfehler der Ordnung $o\left(\lambda^{-1/(p+2)}\right)$ sein, womit die Behauptung bewiesen ist. □

5.2.2 Extrapolation im Brunnen

Im Fall von Potentialbrunnen $W = -W_-$ werden im allgemeinen die Eigenwertzweige von $H(\lambda)$ das Intervall (a,b) kreuzen. Eine Entwicklung der Zweige in der Nähe von diskreten Eigenwerten von H_B in (a,b) ist damit nicht möglich.

Hingegen können wir mit Hilfe der entwickelten Extrapolationsmethode die Attraktivität dieser Außenraumniveaus beweisen.
Das Verschwinden des Potentials am Rande seines Trägers beeinflußt zwar die Wahl der Extrapolationslösung in der Barriere, eine detailliertere Information über die Eigenwerte von $H(\lambda)$ können wir aber nicht aus der Gestalt dieser Ansatzfunktionen ziehen. Wir nehmen deshalb vereinfachend an

$$W = -\chi_B.$$

Der Beweis des folgenden Theorems ist im wesentlichen eine Anwendung des Satzes 5.8. Wie im vorherigen Abschnitt müssen wir uns eine Extrapolationslösung verschaffen. Aufgrund der einfachen Form des Störpotentials W extrapolieren wir mit einer rotationsinvarianten Lösung von

$$(-\Delta - \lambda)J = 0.$$

Nach [AS84, 9.1.10, 9.1.53] erhalten wir mit

$$J(x) = J(|x|) = |x|^{-(\nu-2)/2} J_{(\nu-2)/2}(\sqrt{\lambda}|x|) \tag{5.10}$$

eine in $|x|^2$ holomorphe Lösung, wobei J_q die Besselfunktion erster Gattung q-ter Ordnung ist.

Theorem 5.15 *Seien $\nu \geq 2$ und $0 \leq V \in C^{2,1}$. Der Schrödinger-Operator H erfülle die Voraussetzung 2.5. Es seien a, $b \in \mathbb{R}$ wie in 2.5 und $E_B \in (a,b)$ ein Eigenwert von H_B.*
Dann existieren offene Intervalle $T_n \subset (0,\infty)$ mit

$$|T_n| = O((n\pi)^{-1/2}), \quad \operatorname{dist}(T_n, T_{n+1}) \sim n\pi, \quad n\pi + \frac{\nu-1}{4} \in T_n,$$

für $n \in \mathbb{N}$, so daß gilt

$$\operatorname{dist}(\sigma(H(\lambda)), E_B) \longrightarrow 0 \quad (\lambda \to \infty, \sqrt{\lambda} \notin \bigcup_{n\in\mathbb{N}} T_n).$$

Beweis Ausgehend von Eigenfunktionen von $H_{(1-\varkappa)B}$ zu Eigenwerten in der Nähe von E_B extrapolieren wir in den Potentialbrunnen.
Wegen der Stetigkeit des Spektrums der Dirichlet-Schrödinger-Operatoren unter Gebietsstörungen gilt

$$\operatorname{dist}(\sigma(H_{(1-\varkappa)B}), E_B) \longrightarrow 0 \quad (\varkappa \to 0).$$

Für hinreichend kleines $\varkappa$ gibt es dann genügend viele Eigenfunktionen von $H_{(1-\varkappa)B}$, zu denen man Extrapolationslösungen konstruieren kann. Durch Kontrolle des Approximationsfehlers wird schließlich $\operatorname{dist}(\sigma(H(\lambda)), E_B)$ kontrolliert, denn es gilt

$$\operatorname{dist}(\sigma(H(\lambda)), E_B) \leq \operatorname{dist}(\sigma(H(\lambda)), \sigma(H_{(1-\varkappa)B})) + \operatorname{dist}(\sigma(H_{(1-\varkappa)B}), E_B).$$

Die Konstruktion der Extrapolationslösungen erfolgte im Beweis von Satz 5.8. Wir müssen also nur die Gültigkeit der Anschlußbedingung zeigen und hinreichende Fehlerschranken finden.

Mit $q = \frac{\nu-2}{2}$ gilt für J aus Gleichung (5.10):

$$J(\rho) = \rho^{-q} J_q(\sqrt{\lambda}\rho), \quad J'(\rho) = -q\rho^{-q-1} J_q(\sqrt{\lambda}\rho) + \rho^{-q}\sqrt{\lambda} J_q'(\sqrt{\lambda}\rho).$$

Die Anschlußbedingung aus Satz 5.8 lautet dann

$$\frac{J(1)}{J'(1)} = \frac{J_q(\sqrt{\lambda})}{J_q'(\sqrt{\lambda})}\left(-q\frac{J_q(\sqrt{\lambda})}{J_q'(\sqrt{\lambda})}+\sqrt{\lambda}\right)^{-1} = \varkappa\frac{2-(\nu+1)\varkappa}{2-2\nu\varkappa}.$$

Wenn diese Gleichung für große λ und kleine $\varkappa$ erfüllt wird, dann wird wegen der Invertierbarkeit der rechten Seite der Anschlußbedingung in $\varkappa = 0$ mit $\varkappa \sim J(1)/J'(1)$ der Approximationsfehler kontrolliert durch $|J(1)/J'(1)|^{3/2}$ und

$$\begin{aligned}\left(\int_0^1\left|\frac{J(\rho)}{J'(1)}\right|^2\rho^{\nu-1}d\rho\right)^{1/2} &= \left|\frac{J(1)}{J'(1)}\right|\left(\int_0^1\left|\frac{J_q(\sqrt{\lambda}\rho)}{J_q(\sqrt{\lambda})}\right|^2\rho^{-2q+\nu-1}d\rho\right)^{1/2}\\ &= \left|\frac{J(1)}{J'(1)}\right|\left(\int_0^1\frac{|J_q(\sqrt{\lambda}\rho)|^2}{|J_q(\sqrt{\lambda})|^2}\rho d\rho\right)^{1/2}\end{aligned}$$

Das letzte Integral ist ein *Lommel-Integral*. Unter Ausnutzung der Besselschen Differentialgleichung läßt sich das Integral berechnen (siehe [Bow58, §94]), und wir können fortfahren mit

$$\begin{aligned}\left(\int_0^1\left|\frac{J(\rho)}{J'(1)}\right|^2\rho^{\nu-1}d\rho\right)^{1/2} &= \left|\frac{J(1)}{J'(1)}\right|\left(\frac{J_q'^2(\sqrt{\lambda})}{J_q^2(\sqrt{\lambda})}+\left(1-\frac{q^2}{\lambda}\right)\right)^{1/2}\\ &= \left(\left(-q\frac{J_q(\sqrt{\lambda})}{J_q'(\sqrt{\lambda})}+\sqrt{\lambda}\right)^{-2}+\left(1-\frac{q^2}{\lambda}\right)\left(\frac{J(1)}{J'(1)}\right)^2\right)^{1/2}.\end{aligned}$$

Um das Theorem zu beweisen, reicht es, eine Folge von Ausnahmemengen T_n anzugeben, so daß gilt

$$\left|J_q(t)/tJ_q'(t)\right| \longrightarrow 0 \quad (t\to\infty, t\notin\bigcup_{n\in\mathbb{N}}T_n).$$

In diesem Fall gilt

$$-q\frac{J_q(\sqrt{\lambda})}{J_q'(\sqrt{\lambda})}+\sqrt{\lambda}\sim\sqrt{\lambda}, \quad \frac{J(1)}{J'(1)}\to 0 \quad (\lambda\to\infty, \sqrt{\lambda}\notin\bigcup T_n).$$

Für große λ mit $\sqrt{\lambda}\notin\bigcup T_n$ ist dann die Anschlußbedingung aus Satz 5.8 erfüllbar und die Fehler werden außerhalb der Ausnahmemengen hinreichend klein.

Es ist nach [AS84, 9.1.27, 9.2.1]

$$\begin{aligned}
J_q(t) &= \left(\frac{2}{\pi t}\right)^{1/2}\left[\cos\left(t-\frac{\pi q}{2}-\frac{\pi}{4}\right)+O\left(\frac{1}{t}\right)\right] \quad (t\to\infty)\\
J_q'(t) &= J_{q+1}(t)+\frac{q}{t}J_q(t)\\
&= \left(\frac{2}{\pi t}\right)^{1/2}\left[\sin\left(t-\frac{\pi q}{2}-\frac{\pi}{4}\right)+O\left(\frac{1}{t}\right)\right] \quad (t\to\infty).
\end{aligned}$$

Setzen wir

$$T_n = n\pi + \frac{\pi(\nu+1)}{4} + \left(-(n\pi)^{-1/2},(n\pi)^{-1/2}\right),$$

so folgt aus dem linearen Verschwinden des Sinus in seinen Nullstellen, daß auf $\mathbb{R}\setminus\bigcup T_n$ für große t die folgende Ungleichung erfüllt ist

$$|\sin(t-(\pi(\nu+1))/4)| \geq t^{-1/2}.$$

Auf dem Komplement von $\bigcup T_n$ gilt dann für t gegen ∞

$$\frac{J_q(t)}{J_q'(t)} = O(1)O(t^{1/2}) = o(|t|).$$

□

Die Betonung der Aussage des vorherigen Theorems liegt auf der Angabe der Folge (T_n), also jener Parameterintervalle auf denen die Abschätzung von $\mathrm{dist}(\sigma(H(\lambda)),E_B)$ zusammenbricht. Positiv besagt Theorem 5.15, daß $H(\lambda)$ auf immer ausgedehnteren Parameterintervallen Spektrum in der Nähe von E_B haben muß.

Anders als im Barrierenfall kann man das Einfangen von Eigenwerten nicht als Resultat des unterdrückten Tunneleffekts deuten.
Die Eigenfunktionen zu dem Potentialbrunnen bilden über dem Brunnen komplexe Knotengebilde aus. Offenbar richten sich diese Knotengebilde nach der Geometrie des Trägers des Potentialbrunnen aus, so daß ein Anschluß zu den modifizierten Eigenlösungen der Außenraumprobleme gefunden werden kann.

Das Knotengebilde der modifizierten Eigenfunktionen kann noch verhältnismäßig kompliziert sein. Weil sie in der Nähe des Randes des Potentialbrunnen in separierter Form vorliegen, wissen wir aber, daß das Knotengebilde dieser Funktionen

dort zum Einen aus dem Rand der Menge, auf dem die Eigenfunktion die Dirichletbedingung erfüllt, und zum Anderen aus Hyperflächen besteht, die senkrecht auf diesen Rand treffen.
Die zuerst beschriebene Hyperfläche geht nach Konstruktion aus dem Rand des Trägers des Potentialbrunnens durch eine Transformation nahe der Identität hervor. Ihre Geometrie findet sich damit im Wesentlichen in der Geometrie des Potentials wieder.

6 Zwei Modellprobleme

Das Leitmotiv dieser Arbeit ist das in [GGH$^+$88] beschriebene „Trapping and Cascading"-Muster der Eigenwertzweige in einer Spektrallücke von H.
Ist $\nu = 1$, so kann man nach [GGH$^+$88] eine Folge von disjunkten Parameterintervallen auszeichnen, so daß, außerhalb dieser Intervalle, die Eigenwertzweige in der Nähe der Eigenwerte eines Schrödinger-Operators H_S mit Dirichlet-Randdaten auf dem Träger der Barriere verweilen. Die Anzahl der Eigenwerte, die auf diesem Niveau verweilen, entspricht der Vielfachheit des entsprechenden Außenraumeigenwerts. Auf den ausgezeichneten Parameterintervallen sind die Eigenwertzweige im Wesentlichen in einer Abwärtsbewegung begriffen. Nach Picard-Lindelöf sind die Eigenwerte einfach, und die Eigenwertzweige können sich nicht überschneiden. Für Parameter aus diesen Intervallen muß in der Nähe von Eigenwerten zum Außenraumproblem ein Austausch stattfinden. Ein Zweig, der zuvor in der Nähe dieses Eigenwerts verweilte, steigt ab, und sein Platz wird durch einen von dem nächsthöheren Niveau absteigenden Eigenwertzweig eingenommen.
Betrachtet man das Gesamtgeschehen, so ergibt sich das Bild von Plateaus gefolgt von Kaskaden. Durch die Folge der Parameterintervalle werden Bereiche des Übergangs von Eigenwertzweigen von einem Außenraumeigenwert zu dem nächsten tieferliegenden markiert.
Diese Beschreibung ist in [GGH$^+$88, Def. 5.1] mathematisch präzisiert. Insbesondere muß für diese ausgezeichnete Folge von Intervallen (T_n) ein $\delta \in [0, 1/2)$ existieren mit

$$\#\{n \in \mathbb{N}; T_n \subset [0,\lambda)\} = O(\lambda^{1/2}), \quad |T_n| = O(\lambda^{\delta}) \quad (T_n \subset [0,\lambda)), \tag{6.1}$$

so daß in einem asymptotischen Sinne für einen typischen Parameter λ sich die Eigenwertzweige in der Nähe der Außenraumeigenwerte befinden.

In Raumdimension $\nu \geq 2$ lassen sich Austausch der Eigenwertzweige und ausgedehnte Plateaus der Eigenwertzweige nur schwer mit der Anzahl der auftretenden Eigenwertzweige vereinbaren.
Ist zum Beispiel der Potentialbrunnen $-W_-$ auf einer kleinen Kugel kleiner als eine negative Konstante, so kann man die Anzahl der ein Kontrollniveau kreuzenden Eigenwertzweige mit Hilfe einer Konstanten $C > 0$ abschätzen durch

$$\sum_{0<\mu<\lambda} \dim\ker(H(\mu) - E)) \geq C\lambda^{\nu/2}$$

(siehe [Hem87, ADH89, Hem92a, Hem92b]). Wie im Beweis von 3.10 auf Seite 36 können wir von dieser Ungleichung auf die Mindestanzahl von Eigenwertzwei-

gen in der Spektrallücke schließen.
Angesichts dieser Abschätzung und der Monotonie der Eigenwertzweige im Fall eines Potentialbrunnens als Störpotential verwundert es nicht, daß wir in der Situation von Theorem 5.15 auf Seite 89 nur die Attraktivität der Außenraumeigenwerte zeigen konnten.
Eine entsprechende Konfiguration für $\nu = 1$ führt hingegen zum „Trapping and Cascading“-Muster (siehe [GGH$^+$88, Thm. 5.2]).

Dieses Beispiel deutet die Problematik, aber auch eine Lösung an. Zerlegt man das komplexe – also zusammengesetzte – Bild in einzelne Bestandteile, so kann man erwarten, Modellsituationen zu finden, die diese Einzel-Aspekte aufweisen.
Zwei Aspekte des entworfenen Bildes fallen ins Auge. Zum Einen die Abfolge von Plateaus im Wechsel mit Bereichen des Übergangs von Eigenwertzweigen von höheren zu tieferliegenden Plateaus und zum Anderen der in [GGH$^+$88, Def. 5.1] detailliert beschriebene Verlauf einzelner Eigenwertzweige.
Findet man Parameterintervalle wie in (6.1), auf denen der Übergang der Eigenwertzweige stattfindet, erhält man als Teilaspekt des ersten Bildes für einen typischen Parameter λ das „Pinning“ von Eigenwerten an den Außenraumeigenwerten. In der Einleitung von [GGH$^+$88] wird dieser Aspekt als eine mögliche Erklärung für einen experimentell beobachtbaren Effekt in der Halbleiterphysik angedeutet.

Am Beispiel des Potentialbrunnen (Theorem 5.15) konnten wir einen schwachen „Pinning“-Effekt beobachten. Das Auftreten des Einfangens und Übergangs ist hingegen unklar.
Wird der Potentialbrunnen wie in den Beispielen 3.13 und 3.14 auf Seite 42 durch eine Potentialbarriere umschlossen, so gewinnt das Muster der Eigenwertzweige an Konturen, denn die Eigenwertzweige in der Spektrallücke (a,b) müssen in einer exponentiell kleinen Umgebung der Zweige der Vergleichsoperatoren verlaufen. Durch den Vergleichsoperator mit der Potentialbarriere werden Eigenwerte in der Nähe von Außenraumeigenwerten gefangen, während ein Übergang der Zweige von einem Plateau zu einem Anderen nur in einer Umgebung der Eigenwertzweige des Vergleichsoperators mit dem Potentialbrunnen geschehen kann.
Wir beweisen, daß dieser Übergang im Wesentlichen monoton fallend geschieht.

6.1 Ein Monotonie-Lemma

Lemma 6.1 *Sei $0 \leq V \in L_\infty$. Die Menge $S \subset \mathbb{R}^\nu$ sei abgeschlossen und $\Omega = \mathbb{R}^\nu \setminus S$ sei offen und beschränkt.*
Weiter sei $W \in L_\infty$, so daß $[W = 0] \cap \Omega$ eine Nullmenge ist.

Dann existiert für alle a, $b \in \mathbb{R}$ mit $a < b$ und alle $c > 0$ ein $\lambda_0 > 0$, so daß für alle offene Intervalle $I \subset (\lambda_0, \infty)$ und Eigenwertzweige $E : I \longrightarrow [a,b]$ von $H_S(\lambda)$ gilt

$$E'(\lambda) \leq -\frac{c}{\lambda}.$$

Das Lemma ist eine Adaption von [Hem97, Thm. 3.1]. Unter der Voraussetzung, daß $[W = 0] \cap \Omega$ eine Nullmenge ist, können wir nach dem obigen Lemma schließen, daß ein vorgegebenes Intervall für große Kopplungen entweder frei von Eigenwerten des Operators $H_S(\lambda)$, oder daß es von absteigenden Eigenwertzweigen überquert wird.

Beweis Wir führen einen Widerspruchsbeweis und nehmen an, daß es ein $c > 0$, eine Folge von Eigenwertzweigen $E_n : I_n \longrightarrow [a,b]$ und Parameter $\lambda_n \in I_n$ gibt mit $\lim_{n\to\infty} \lambda_n = \infty$ und

$$E_n'(\lambda_n) \geq -\frac{c}{\lambda_n}.$$

Seien $u_n \in D(H_S(\lambda_n)) = D(H_S)$ die zugehörigen normierten Eigenfunktionen.

Nach Annahme und Proposition 2.12 gilt für ein geeignetes $C \geq 0$

$$\begin{aligned} \frac{c}{\lambda_n} &\geq -E'(\lambda_n) = \int W|u_n|^2\,dx = \\ &= \frac{1}{\lambda_n}\big\langle (H_S(\lambda_n) - E_n(\lambda_n))u_n\,,\,u_n \big\rangle \geq \frac{1}{\lambda_n}(\|\nabla u_n\|^2 - C). \end{aligned}$$

Es folgt $\|\nabla u_n\|_2^2 \leq C + c$. Wegen des Satzes von Rellich-Kondrachov ([Ada75]) können wir ohne Einschränkungen annehmen, daß die Folge (u_n) gegen ein $u_0 \in L_2(\Omega)$ in der starken Topologie von L_2 konvergiert.

Aus der gleichmäßigen Beschränktheit von $\big\langle (H_S - E_n(\lambda_n))\varphi\,,\,u_n \big\rangle$ in n für $\varphi \in C_c^\infty(\Omega)$ folgt

$$\big\langle Wu_0\,,\,\varphi \big\rangle = \lim_{n\to\infty} \big\langle W\varphi\,,\,u_n \big\rangle = \lim_{n\to\infty} \frac{-1}{\lambda_n}\big\langle (H_S - E_n(\lambda_n))\varphi\,,\,u_n \big\rangle = 0.$$

Demnach ist $Wu_0 = 0$ in L_2. Nach Voraussetzung gilt dann bereits fast überall $u_0 = 0$. Dies steht im Widerspruch zu $\|u_0\|_2 = \lim_{n\to\infty}\|u_n\|_2 = 1$. □

Aufgrund der oben bewiesenen Monotonie der Eigenwertzweige des Vergleichsproblem mit dem eingeschlossenen Potentialtopf, können die Eigenwertzweigen

nicht oszillieren. Scheinbar ist dieser Operator eine gute Referenz, um die Bereiche, in denen sich das Spektrum des Ausgangsoperators von Außenraumeigenwerten zu tiefergelegenen Außenraumeigenwerten bewegt, zu markieren.
Lemma 6.1 gibt nur eine schlechte obere Schranke für die Steigung. Dies liegt anscheinend daran, daß es ein abstrakter Satz ist, denn wie in [GGH$^+$88] beobachtet, hängt die Breite des Übergangsbereichs von der Art der Störpotentiale ab. Insbesondere kann die Länge für λ gegen ∞ gegen ∞ divergieren. Umgekehrt ist zu vermuten, daß sich in diesen Beispielen für große Kopplungen die Steigung tatsächlich an 0 annähert.
In konkreten Situationen kann man genauere Informationen erwarten. Nehmen wir $W_- = \chi_M$ an, so gilt für einen Teil eines Eigenwertzweiges $E : I \longrightarrow [a,b]$ und entsprechend parametrisierte normierte Eigenfunktionen $u(\lambda)$ für $\lambda \in I$ nach Proposition 2.12

$$E'(\lambda) = -\int \chi_M |u|^2\,dx + \int W_+ |u|^2\,dx = -1 + \int_{\operatorname{supp} W_+} (1+W_+)|u|^2\,dx.$$

Man ist an dieser Stelle versucht das Korollar 3.4 zu zitieren, um die Näherung des positiven Summanden gegen 0 für große Kopplungen zu behaupten. In diesem Fall sind dann die Längen der Parameterintervalle, auf denen ein Übergang geschehen kann, durch eine Konstante beschränkt. Wir finden aber, daß wir nach 3.4 auch unter günstigen Umständen einen Sicherheitsabstand zu M einhalten müssen. Auf diesem Bereich können die Eigenfunktionen eine L_2-Norm besitzen, von der wir ohne weitere Argumente nicht annehmen können, daß der Limes-Superior dieser Normen Null ist.

In Raumdimension $\nu = 1$ und einfachen Situationen kann man ausnutzen, daß die Lösungen in Potentialtopf und –barriere geeignet skalieren (vergleiche [AH82]). Wir nutzen dies bei der folgenden Diskussion der Beispiele 3.13 und 3.14 aus.

6.2 Beispiel 3.13

In Beispiel 3.13 hatten wir einen rotationssymmetrischen Potentialbrunnen gewählt. Wir diskutieren den Verlauf der Eigenwertzweige des Operators

$$H(\lambda) = -\Delta + \lambda\chi_{\mathbb{R}^\nu\setminus B} - \lambda\chi_B$$

im Intervall (a,b).

Mit Hilfe der Symmetrie-Gruppe der $\mathbb{S}_{\nu-1}$ können wir den Hilbertraum in eine direkte Summe von $H(\lambda)$ reduzierenden Teilräumen zerlegen (siehe [RS75, Ex. 4],

[Dav96, Ex. 6.2.4] resp. [Hem92b]).
Wir schränken uns auf den Fall $\nu = 2$ ein. Analog wie in [Dav96, Ex. 6.2.4] haben Eigenfunktionen die Form

$$u_m(r,\theta) = g_m(r)\exp(im\theta) \quad (m \in \mathbb{Z}),$$

wobei mit der Setzung

$$h_m g = -\frac{1}{r}(rg')' + \frac{m^2}{r^2}g \quad (m \in \mathbb{Z})$$

die Funktion $g_m \in L_2(rdr)$ für geeignetes $\lambda > 0$ und $E \in (a,b)$ die Gleichungen

$$\begin{aligned} h_m g - (\lambda + E)g = 0 &\quad \text{auf} \quad [0,1], \\ h_m g - (\lambda - E)g = 0 &\quad \text{auf} \quad [1,\infty) \end{aligned}$$

erfüllen.
Aufgrund der Integrabilitätsbedingung hat mit den Abkürzungen $\alpha = \sqrt{\lambda + E}$ und $\beta = \sqrt{\lambda - E}$ die Funktion g_m die Gestalt

$$g_m(r) = \begin{cases} \frac{J_m(\alpha r)}{J_m'(\alpha)} & ; 0 < r \leq 1 \\ \frac{\alpha}{\beta}\frac{K_m(\beta r)}{K_m'(\beta)} & ; 1 \leq 1 < \infty \end{cases}.$$

Die Funktionen J_m sind Besselfunktionen erster Gattung m-ter Ordnung und K_m modifizierte Besselfunktionen zweiter Gattung m-ter Ordnung (siehe [AS84, 9.1, 9.6]). Weil g_m zweimal schwach differenzierbar ist, muß für λ und E bzw. für α und β die Anschlußbedingung

$$\frac{J_m(\alpha)}{J_m'(\alpha)} = \frac{\alpha}{\beta}\frac{K_m(\beta)}{K_m'(\beta)} \tag{6.2}$$

erfüllt sein.
Nach [AS84, 9.1.5, 9.6.6] gilt

$$J_{-m} = (-1)^m J_m, \quad K_{-m} = K_m \quad (m \in \mathbb{Z}).$$

Die Eigenwertzweige von $H(\lambda)$ im Intervall (a,b) sind damit durch einen „Drehimpuls“ $m \in \mathbb{N}_0$ und einer Lösung der Anschlußbedingung (6.2) gegeben. Für $m \in \mathbb{N}$ hat der Eigenwertzweig die Vielfachheit 2.

Wir zeigen, daß die Steigung der Eigenwertzweige für große Kopplungen $-1 + o(1)$ ist. Diese Schreibweise ist nicht ganz korrekt, denn wir betrachten viele Eigenwertzweige und deren Steigungen. Wir benutzen aber im Weiteren trotzdem

diese Notation mit der Bedeutung, daß wir diese Grössen punktweise durch eine Funktion abschätzen können, die die entsprechenden Eigenschaften erfüllt.
Nach unserer Vorbemerkung gilt für einen Eigenwertzweig $E(\lambda)$ und g_m wie oben

$$E'(\lambda) = -1 + 2\frac{\int_1^\infty |g_m|^2 \, rdr}{\int_0^\infty |g_m|^2 \, rdr}.$$

Unter Ausnutzung der speziellen Gestalt von g_m und der Anschlußbedingung (6.2) gilt

$$\begin{aligned}
\int_0^1 |g_m(r)|^2 \, rdr &= \int_0^1 \left|\frac{J_m(\alpha r)}{J_m'(\alpha)}\right|^2 rdr \\
&= \frac{1}{2}\left[1 + \left(1 - \frac{m^2}{\alpha^2}\right)\left(\frac{J_m(\alpha)}{J_m'(\alpha)}\right)^2\right] \\
&= \frac{1}{2}\left[1 + \left(1 - \frac{m^2}{\alpha^2}\right)\left(\frac{\alpha K_m(\beta)}{\beta K_m'(\beta)}\right)^2\right].
\end{aligned}$$

Wir haben dabei unsere Kenntnis der *Lommelschen Integrale* ausgenutzt (siehe [Bow58, §94]). Ganz analog erhalten wir

$$\begin{aligned}
\int_1^\infty |g_m(r)|^2 \, rdr &= \int_1^\infty \left|\frac{\alpha K_m(\beta r)}{\beta K_m'(\beta)}\right|^2 rdr \\
&= \left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^2 \frac{1}{2}\left[1 - \left(1 + \frac{m^2}{\beta^2}\right)\left(\frac{K_m(\beta)}{K_m'(\beta)}\right)^2\right].
\end{aligned}$$

Weil wir $E(\lambda) \in (a,b)$ voraussetzen ist α, $\beta \sim \sqrt{\lambda}$ und $\alpha/\beta \sim 1$ für λ gegen ∞. Die Behauptung ist bewiesen, wenn wir

$$\frac{K_m(\beta)}{K_m'(\beta)} = 1 + o(1), \quad \frac{m}{\beta}\frac{K_m(\beta)}{K_m'(\beta)} = o(1) \quad (\beta \longrightarrow \infty)$$

gleichmäßig in m zeigen können.

Nach [AS84, 9.7.2, 9.7.4] gilt für festes $m \in \mathbb{N}_0$ und große z

$$\begin{aligned}
K_m(z) &= \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\, e^{-z}\left(1 + O(z^{-1})\right) \quad (|\arg(z)| < 3\pi/2), \\
K_m'(z) &= \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\, e^{-z}\left(1 + O(z^{-1})\right) \quad (|\arg(z)| < 3\pi/2).
\end{aligned}$$

Wir sehen, daß für endlich viele Parameter $m \in \mathbb{N}$ die Behauptung leicht zu zeigen ist, und wir brauchen nur ein weiteres Argument um die Parameter ab einem geeigneten m_0 zu behandeln.

Wir können nach [AS84, 9.7.8, 9.7.10] die Funktionen K_m und K_m' gleichmäßig in Funktionsparametern $|\arg(z)| \leq \pi/2 - \delta$ und für große Parameter m asymptotisch entwickeln

$$
\begin{aligned}
K_m(mz) &= \sqrt{\frac{\pi}{2m}} \frac{1}{(1+z^2)^{1/4}} e^{-m\eta} \left(1 + O(m^{-1})\right), \\
K_m'(mz) &= \sqrt{\frac{\pi}{2m}} \frac{(1+z^2)^{1/4}}{z} e^{-m\eta} \left(1 + O(m^{-1})\right),
\end{aligned}
$$

mit $\eta = \sqrt{1+z^2} + \ln(z/(1+\sqrt{1+z^2})$.
Es ist damit

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{K_m(\beta)}{K_m'(\beta)}\right)^2 &= \left(1 - \left[1 + \left(\frac{\beta}{m}\right)^2\right]^{-1}\right) \left(1 + O(m^{-1})\right)^2, \\
\left(\frac{m}{\beta}\frac{K_m(\beta)}{K_m'(\beta)}\right)^2 &= \left[1 + \left(\frac{\beta}{m}\right)^2\right]^{-1} \left(1 + O(m^{-1})\right)^2.
\end{aligned}
$$

Für alle $\beta \geq m^2$ folgt wegen der Monotonie von $[1+x^2]^{-1}$

$$
\left[1 + \left(\frac{\beta}{m}\right)^2\right]^{-1} \leq \left[1 + m^2\right]^{-1}.
$$

Fügt man nun die Einzelschritte zusammen erkennen wir, daß die Längen der maximalen Definitionsbereiche der einzelnen im Intervall (a,b) absteigenden Eigenwertzweige im Grenzwert λ gegen ∞ durch eine Konstante beschränkt werden.

Von der Verteilung der Zweige, bzw. von einem Mindestabstand zwischen den Zweigen von $H(\lambda)$ hängt nun ab, ob sich im Beispiel 3.13 Plateaus ausbilden können.
Betrachten wir nochmals die Anschlußbedingung (6.2), so sind die Eigenwertzweige nach unserer vorherigen Argumentation asymptotisch gegeben durch

$$
\frac{J_m(\sqrt{\lambda + E})}{J_m'(\sqrt{\lambda + E})} = 1 + o(1) \quad (\lambda \longrightarrow \infty). \tag{6.3}
$$

Für festes $m \in \mathbb{N}_0$ gilt nach [AS84, 9.1.27, 9.2.1]

$$\begin{aligned} J_m(t) &= \left(\frac{2}{\pi t}\right)^{1/2}\left[\cos\left(t-\frac{\pi m}{2}-\frac{\pi}{4}\right)+O\left(t^{-1}\right)\right] \quad (t\to\infty), \\ J_m'(t) &= J_{m+1}(t)+\frac{m}{t}J_m(t) \\ &= \left(\frac{2}{\pi t}\right)^{1/2}\left[\sin\left(t-\frac{\pi m}{2}-\frac{\pi}{4}\right)+O\left(t^{-1}\right)\right] \quad (t\to\infty). \end{aligned}$$

Nehmen wir diese Asymptotik als einen Anhaltspunkt, so ist es plausibel anzunehmen, daß die Lösungen der asymptotischen transzendenten Gleichung (6.3) wie im Fall des tan die Nullstellen der Funktion J_m plus einem festen Offset sind. Die Quadrate der Nullstellen $j_{m,s}$ von J_m geben eine Idee davon, wie dicht die Eigenwertzweige von $H(\lambda)$ in (a,b) aufeinander folgen.
Eine Berechnung der Quadrate dieser Nullstellen zu verschiedenen Drehimpulsräumen ergibt das Bild sich verdichtender Werte im Kontrast zu Bereichen in denen ein weiterer Abstand zwischen den Werten liegt. Die Übergänge bzw. Ausdehnung dieser Bereiche ist nicht stark akzentuiert, so daß man nicht auf eine Bildung von Clustern schließen kann.
Mit Hilfe asymptotischen Entwicklungen der Nullstellen der Besselfunktionen J_m aus dem bisher so hilfreichen Buch [AS84] ist die obige Beobachtung nur schwer analytisch zu bestätigen.

Das vorherige Beispiel ist sehr ernüchternd, denn gerade in einem so einfach gehaltenen Fall war zu vermuten, Aspekte des „Trapping and Cascading“ wiederzufinden.
Wir sehen, daß die Unabhängigkeit der Eigenwertzweige zu den verschiedenen Drehimpulsräumen die Analyse erschwert und scheinbar für ein verwaschenes Bild verantwortlich ist.
Andererseits ist zu vermuten, daß man, wegen der Vielfachheit der Eigenwertzweige und der Steigung $-1+o(1)$, in Bereichen in denen die Eigenwertzweige nicht so dicht aufeinanderfolgen, das Ausweichen von aufsteigenden und absteigenden Zweigen aus Beispiel 3.13 gut beobachten kann.

6.3 Beispiel 3.14

Wir diskutieren den Verlauf der Eigenwertzweige des zweiten Vergleichsoperators aus Beispiel 3.14

$$H(\lambda) = -\Delta + \lambda|\cdot|^2 - \lambda$$

im Intervall (a,b).

Die Diskussion vereinfacht sich, denn unter Skalieren ist der Operator

$$H(\lambda)+\lambda = -\Delta + \lambda|\cdot|^2$$

unitär äquivalent zu

$$\sqrt{\lambda}(-\Delta + |\cdot|^2)$$

(siehe [HS96, 11.2]).

Der harmonische Oszillator $-\Delta + |\cdot|^2$ separiert. Er besitzt ein vollständiges System von Eigenfunktionen aus Tensorprodukten von ν Eigenfunktionen des Oszillators auf der reellen Achse ([RS80]). Sein Spektrum ist gegeben durch

$$\sigma(-\Delta + |\cdot|^2) = \left\{ \sum_{i=1}^{\nu} (2\alpha_i + 1); \alpha \in \mathbb{N}_0^\nu \right\} = 2\,\mathbb{N}_0 + \nu.$$

Die Vielfachheit eines Eigenwertes $2m+\nu$ ist $\#\left\{\alpha \in \mathbb{N}_0^\nu; m = \sum_{i=1}^{\nu} \alpha_i\right\}$.

Wir haben also eine explizite Darstellung der Eigenwertzweige von $H(\lambda)$ im Intervall (a,b). Indizieren wir sie mit $2\,\mathbb{N}+\nu$, so gilt für geeignete λ_k, $\mu_k \in (0,\infty)$

$$E_k : (\lambda_k, \mu_k) \longrightarrow (a,b);\, \lambda \longmapsto \sqrt{\lambda}k - \lambda.$$

Die Vielfachheit eines Eigenwertzweiges E_k ist

$$\#\left\{ \alpha \in \mathbb{N}_0^\nu; k = \sum_{i=1}^{\nu} (2\alpha_i + 1) \right\},$$

und der Ausgangsoperator in Beispiel 3.14 wird um die obigen Zweige Cluster bilden mit der entsprechenden Vielfachheit.

Wir greifen einen Eigenwertzweig E_k heraus und berechnen die Ableitung. Es ist

$$E_k'(\lambda) = \frac{k}{2\sqrt{\lambda}} - 1 = \frac{\sqrt{\lambda}k - \lambda}{2\lambda} - \frac{1}{2} = \frac{E_k(\lambda)}{2\lambda} - \frac{1}{2} \quad (\lambda \in (\lambda_k, \mu_k)).$$

Aus $E_k(\lambda) \in (a,b)$ folgt $E_k'(\lambda) = -1/2 + O(\lambda^{-1})$. Wie im vorherigen Abschnitt ist die O-Notation nicht ganz korrekt, denn wir schätzen hier nicht eine Funktion sondern Viele ab. Die vorherige Rechnung macht aber hoffentlich klar in welchem Sinne diese Notation trotzdem gerechtfertigt ist.

Mit der vorherigen Rechnung folgt weiter

$$\mu_k - \lambda_k = O(1).$$

Die Eigenwertzweige des Ausgangsproblems von Beispiel 3.14 können damit nur in einer exponentiell kleinen Umgebung der Intervalle (λ_k, μ_k) absteigen. Die Länge der Parameterintervalle auf denen ein Übergang von einem Außenraumeigenwert zu einem Anderen stattfinden kann, ist also beschränkt.

Im Gegensatz zu Beispiel 3.13 bilden sich im Fall von Beispiel 3.14 ausgedehnte Plateaus aus.
Betrachten wir die Definitionsbereiche zweier in der Aufzählung aufeinander folgender Eigenwertzweige E_k und E_{k+2}. Der Index $k+2$ sollte nicht verwundern, denn wir haben die Zweige mit $2\mathbb{N}+\nu$ indiziert. Die unteren Intervallgrenzen der Zweige in (a,b) sind durch

$$b = E_k(\lambda_k) = \sqrt{\lambda_k}k - \lambda_k, \quad b = E_{k+2}(\lambda_{k+2}) = \sqrt{\lambda_{k+2}}(k+2) - \lambda_{k+2}$$

bestimmt. Lösen wir nach k bzw. $k+2$ auf, so gilt

$$2 = (k+2) - k = \sqrt{\lambda_{k+2}} - \sqrt{\lambda_k} + b\left(\frac{1}{\sqrt{\lambda_{k+2}}} - \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}}\right).$$

Für λ_k und λ_{k+2} hinreichend groß ist $b(\lambda_{k+2}^{-1/2} - \lambda_k^{-1/2}) < 1$, und es gilt

$$2\sqrt{\lambda_k} \leq \sqrt{\lambda_k} + \sqrt{\lambda_{k+2}} \leq \lambda_{k+2} - \lambda_k.$$

Die Paramterintervalle (λ_k, μ_k) und $(\lambda_{k+2}, \mu_{k+2})$ sind damit nicht nur disjunkt, sondern der Abstand zwischen ihnen wächst mindestens mit der Ordnung $\sqrt{\lambda}$.

Wir sehen in unserem letzten Beispiel, daß sich in der Situation von Beispiel 3.14 Plateaus im Wechsel mit Bereichen des Übergangs des Spektrums von einem Außenraumeigenwert zu einem tiefergelegenen Eigenwert einstellen. Die Länge der Paramterintervalle, für die die Eigenwertzweige in der Nähe der Außenraumeigenwerte verweilen, wächst wie $\sqrt{\lambda}$. Für einen „typischen“ Kopplungsparameter beobachtet man also das angesprochene „Pinning“.
Im Gegensatz dazu steigt die Vielfachheit der Eigenwertzweige des Vergleichsproblems mit dem Potentialbrunnen in Abhängigkeit des Kopplungsparameters. Gehen wir davon aus, daß die Degenerierung der Eigenwertzweige im Zusammenspiel mit der Potentialbarriere aufgehoben wird, ergibt sich für große Kopplungen eine nur schwer zu überblickende Situation. An eine detailierte Beschreibung, wie die Zweige von einem Außenraumniveau zu einen anderen wechseln, ist nicht zu denken.

6.4 Abschließende Bemerkungen

Am Ende dieser Arbeit stehen wir am Anfang einer neuen Diskussion.
Wir haben auf den vorherigen Seiten Aspekte des „Trapping and Cascading"-Bildes für Schrödinger-Operatoren in höheren Raumdimensionen aufgearbeitet.
Modellprobleme im $\mathbb{R}^\nu$, für die sich die aus dem Eindimensionalen bekannte Beschreibung einfach übertragen läßt, ließen sich nicht finden.

Die beiden einfach gehaltenen Modellprobleme Beispiel 3.13 und Beispiel 3.14 zeigen sehr unterschiedliches Verhalten, so daß man nicht für eine größere Klasse von Potentialen das gleiche Verhalten der Spektren erwarten kann.

Wir haben mit diesen Beispielen zwei Modellprobleme gewonnen, die verschiedene Möglichkeiten bieten.
Wegen der geringen Vielfachheit der Eigenwertzweige und der Unabhängigkeit der Zweige zu verschiedenen Drehimpulsräumen ist das Beispiel 3.13 geeignet um das Verhalten einzelner Eigenwertzweige zu beobachten.
Der Vergleichsoperator $-\Delta + \lambda|\cdot|^2 - \lambda$ sorgt für eine Bildung von Clustern von Eigenwertzweigen des Ausgangsoperators in einer Umgebung der Eigenwertzweige dieses Vergleichsoperators. Als Resultat beobachtet man, daß sich das Spektrum in Abhängigkeit von der Kopplung so anordnet, daß sich ausgedehnte Plateaus abwechseln mit relativ kleinen Bereichen des Übergangs, in denen das Spektrum in Bewegung ist. Es tritt der „Pinning"-Effekt auf.
Ist man bereit den „Pinning"-Effekt abstrakter zu fassen und nur zu verlangen, daß sich auf ausgedehnten Parameterintervallen Spektrum in der Nähe von Außenraumniveaus befinden muß, so stellt sich dieser Effekt ebenfalls bei Beispiel 3.13 und in der Situation von Theorem 5.15 ein.

Das im Eindimensionalen gewonne Bild des „Trapping and Cascading" ist damit zu detailliert um naiv auf höhere Raumdimensionen übertragen werden können.
Es muß neu überdacht werden, welcher Teilaspekt relevant ist.
Die Methoden dieser Arbeit sollten hilfreich sein, um Modellprobleme aufzusuchen, die diese relevanten Charakteristika aufweisen.

Literatur

[Abr63] R. Abraham, *Transversality in manifolds of mappings.* Bull. Am. Math. Soc. **69** (1963), 470–474.

[Ada75] R. A. Adams, *Sobolev spaces.* Academic Press, New York, 1975.

[ADH89] S. Alama, P. A. Deift, R. Hempel, *Eigenvalue branches of the Schrödinger operator $H - \lambda W$ in a gap of $\sigma(H)$.* Commun. Math. Phys. **121** (1989), no. 2, 291–321.

[Agm82] S. Agmon, *Lectures on exponential decay of solutions of second-order elliptic equations: bounds on eigenfunctions of N-body Schroedinger operators.* Mathematical Notes, Princeton University Press, Princeton, N. J., 1982.

[AH82] M. S. Ashbaugh, E. M. Harrell, *Perturbation theory for shape resonances and large barrier potentials.* Commun. Math. Phys. **83** (1982), 151–170.

[AS84] M. Abramowitz, A. S. Stegun, *Pocketbook of mathematical functions.* Verlag Harri Deutsch, Frankfurt/Main, 1984.

[Bir91] M.Sh. Birman, *Discrete spectrum in the gaps of a continuous one for perturbations with large coupling constant.* Estimates and asymptotics for discrete spectra of integral and differential equations, Pap. Semin. Math. Phys., Leningrad/Russia 1989-90, Adv. Sov. Math., vol. 7, 57–73, Amer. Math. Soc., Providence, 1991.

[Bir95] M.Sh. Birman, *The discrete spectrum in gaps of the perturbed periodic Schrödinger operator. I: Regular perturbations.* Boundary value problems, Schrödinger operators, deformation quantization. Math. Top., vol. 8, 334–352, Akademie Verlag, Berlin, 1995.

[Bow58] F. Bowman, *Introduction to Bessel functions.* Dover Publications, New York, 1958.

[BW94] M.Sh. Birman, T. Weidl, *The discrete spectrum in a gap of the continuous one for compact supported perturbations.* Mathematical results in quantum mechanics: International conference in Blossin (Germany), May 17-21, 1993. Oper. Theory, Adv. Appl., vol. 70, 9–12, Birkhäuser Verlag, Basel, 1994.

[Dav96] E.B. Davies, *Spectral theory and differential operators.* Cambridge Univ. Press., Cambridge, 1996.

[DH86] P. A. Deift, R. Hempel, *On the existence of eigenvalues of the Schroedinger operator H-λ W in a gap of σ (H).* Commun. Math. Phys. **103** (1986), 461–490.

[EE89] D.E. Edmunds, W.D. Evans, *Spectral theory and differential operators.* Clarendon Press, Oxford, 1989.

[Eva98] L. C. Evans, *Partial differential equations.* Amer. Math. Soc., Providence, R. I., 1998.

[GGH$^+$88] F. Gesztesy, D. Gurarie, H. Holden, M. Klaus, L. Sadun, B. Simon, P. Vogl, *Trapping and cascading of eigenvalues in the large coupling limit.* Commun. Math. Phys. **118** (1988), no. 4, 597–634.

[Gri85] P. Grisvard, *Elliptic problems in nonsmooth domains.* Pitman, Boston, 1985.

[GS88] F. Gesztesy, B. Simon, *On a theorem of Deift and Hempel.* Commun. Math. Phys. **116** (1988), no. 3, 503–505.

[GT77] D. Gilbarg, N. S. Trudinger, *Elliptic partial differential equations of second order.* Springer-Verlag, New York, 1977.

[Hem87] R. Hempel, *A left-indefinite generalized eigenvalue problem for Schrödinger operators.* Habilitationsschrift, München, 1987.

[Hem89] R. Hempel, *On the asymptotic distribution of the eigenvalue branches of the Schrödinger operator $H \pm \lambda W$ in a spectral gap of H.* J. Reine Angew. Math. **399** (1989), 38–59.

[Hem92a] R. Hempel, *Eigenvalue asymptotics related to impurities in crystals.* Méthodes semi-classiques (Colloque international, Nantes, 1991), Astérisque., vol. 210, 183–196, Societe Mathematique de France, Paris, 1992.

[Hem92b] R. Hempel, *Eigenvalues in gaps and decoupling by Neumann boundary conditions.* J. Math. Anal. Appl. **169** (1992), no. 1, 229–259.

[Hem97] R. Hempel, *On the asymptotic distribution of eigenvalues in gaps.* Quasiclassical methods. Proceedings based on talks given at the IMA workshop, Minneapolis, MN, USA, May 22–26, 1995. IMA Vol.

Math. Appl., vol. 95, 115–124, Springer-Verlag, New York, 1997, 115–124.

[HHHK91] R. Hempel, I. Herbst, A. M. Hinz, H. Kalf, *Intervals of dense point spectrum for spherically symmetric Schrödinger operators of the type* $-\Delta + \cos|x|$. J. Lond. Math. Soc., II. Ser. **43** (1991), no. 2, 295–304.

[HHK87] R. Hempel, A. M. Hinz, H. Kalf, *On the essential spectrum of Schrödinger operators with spherically symmetric potentials.* Math. Ann. **277** (1987), 197–208.

[Hir76] M. W. Hirsch, *Differential topology.* Springer-Verlag, New York, 1976.

[HL] R. Hempel, K. Lienau, *Genericity of the band-gap structure of periodic media in the large coupling limit.* Preprint.

[HP83] W. Hunziker, C.A. Pillet, *Degenerate asymptotic perturbation theory.* Commun. Math. Phys. **90** (1983), 219–233.

[HS84] Helffer, B., Sjöstrand, J., *Multiple wells in the semi-classical limit. I.* Commun. Partial Differ. Equations **9** (1984), 337–408.

[HS96] P.D. Hislop, I.M. Sigal, *Introduction to spectral theory. With applications to Schrödinger operators.* Springer-Verlag, New York, 1996.

[Hun89] W. Hunziker, *Asymptotic perturbation theory for Schroedinger eigenvalue problems.* Schroedinger operators, Proc. Nord. Summer Sch. Math., Sandbjerg Slot, Soenderborg/Denmark 1988, Lect. Notes Phys., vol. 345, 1989, 198–206.

[HZ88] I. W. Herbst, Z. Zhao, *Sobolev spaces, Kac-regularity, the Feynman-Kac formula.* Seminar on stochastic processes, 171–191, Birkhäuser, Boston, 1987.

[Kat95] T. Kato, *Perturbation theory for linear operators. Reprint of the corr. print. of the 2nd ed. 1980.* Springer-Verlag, Berlin, 1995.

[Lan69] S. Lang, *Real analysis. 2nd ed.* Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1969.

[Lev95] S.Z. Levendorskii, *Lower bounds for the number of eigenvalue branches for the Schrödinger operator* $H - \lambda W$ *in a gap of* H*: The case of indefinite* W. Commun. Partial Differ. Equations **20** (1995), no. 5-6, 827–854.

[Lev99] S.Z. Levendorskii, *Asymptotic formulae with remainder estimates for eigenvalue branches of the Schrödinger operator $H - \lambda W$ in a gap of H*. Trans Am. Math. Soc. **351** (1999), no. 3, 857–899.

[Olv74] F. W. J. Olver, *Asymptotics and special functions.* Academic Press, New York, 1974.

[Qui70] F. Quinn, *Transversal approximation on Banach manifolds.* Global Analysis, Proc. Sympos. Pure Math., vol. 15, 1970, 213–222.

[RS75] M. Reed, B. Simon, *Methods of modern mathematical physics. II: Fourier analysis, self-adjointness.* Academic Press, New York, 1975.

[RS78] M. Reed, B. Simon, *Methods of modern mathematical physics. IV: Analysis of operators.* Academic Press, New York, 1978.

[RS80] M. Reed, B. Simon, *Methods of modern mathematical physics. I: Functional analysis. Rev. and enl. ed.* Academic Press, New York, 1980.

[Saf97] O.L. Safronov, *Discrete spectrum in a gap of the continuous spectrum for variable sign perturbations with large coupling constant.* St. Petersbg. Math. J. **8** (1997), no. 2, 307–331.

[Saf98a] O.L. Safronov, *Arising and disappearance of the discrete spectrum in a gap of a second order periodic operator under decaying perturbations of variable sign.* St. Petersbg. Math. J. **9** (1998), no. 1, 107–120.

[Saf98b] O.L. Safronov, *The discrete spectrum in the gaps of the continuous one for non-signdefinite perturbations with a large coupling constant.* Commun. Math. Phys. **193** (1998), no. 1, 233–243.

[Sim84] B. Simon, *Semiclassical analysis of low lying eigenvalues. II: Tunneling.* Ann. Math., II. Ser. **120** (1984), 89–118.

[Sim85] B. Simon, *Semiclassical analysis of low lying eigenvalues. IV. The flea on the elephant.* J. Funct. Anal. **63** (1985), 123–136.

[Sma65] S. Smale, *An infinite dimensional version of Sard's theorem.* Am. J. Math. **87** (1965), 861–866.

[Tey99] M. Teytel, *How rare are multiple eigenvalues?* Comm. Pure Appl. Math. **52** (1999), 917–934.

[Uhl76] K. Uhlenbeck, *Generic properties of eigenfunctions.* Am. J. Math. **98** (1976), 1059–1078.

[Wei84] J. Weidmann, *Stetige Abhängigkeit der Eigenwerte und Eigenfunktionen elliptischer Differentialoperatoren vom Gebiet.* Math. Scand. **54** (1984), 51–69.

[Wei87] J. Weidmann, *Note to the paper by R. Hempel, A. M. Hinz, H. Kalf: On the essential spectrum of Schrödinger operators with spherically symmetric potentials.* Math. Ann. **277** (1987), 209–211.

Zusammenfassung

Ziel der vorliegenden Arbeit ist die asymptotische Analyse der Eigenwertzweige $E(\lambda)$ des Schrödinger-Operators

$$H(\lambda)u = (H + \lambda W)u \quad (u \in D(H))$$

in einer Spektrallücke $[a,b] \subset \mathbb{R} \setminus \sigma_e(H)$ des wesentlichen Spektrums des ungestörten Operators $H = -\Delta + V$ im $L_2(\mathbb{R}^\nu)$ für kurzreichweitiges, beschränktes W und große λ.
Durch $E(\lambda)$ werden zusätzliche Energieniveaus eines verunreinigten Kristalls oder dotierten Halbleiters beschrieben.

Das Leitmotiv dieser Arbeit sind die Artikel [AH82, GGH$^+$88]. In diesen Arbeiten wird gezeigt, daß sich bei eindimensionalen Modellproblemen das diskrete Spektrum von $H(\lambda)$ in der Spektrallücke (a,b) für große λ regelmäßig anordnet.

Die Methoden von [AH82, GGH$^+$88] sind auf Raumdimension $\nu \geq 2$ nicht übertragbar. Wir zeigen, daß für $\nu \geq 2$ die Eigenwertzweige gewisse Charakteristika der eindimensionalen Modellprobleme aufweisen.

Allgemein zeigen wir, daß für W aus einem geeigneten Funktionenraum die Eigenwertzweige $E(\lambda)$ generisch einfach sind. Wir zeigen weiter, daß im Kopplungsgrenzwert $\lambda \to \infty$ Eigenfunktionen aus der Potentialbarriere vertrieben werden, so daß für große Kopplungen λ die spektralen Größen von $H(\lambda)$ bis auf exponentiell kleine Fehler durch einen Vergleichsoperator mit Dirichletbedingungen im Innern der Barriere beschrieben werden. In zwei einfachen Beispielen nutzen wir diesen Effekt, um das Spektrum durch zwei entkoppelte Schrödinger-Operatoren mit rotationsinvarianten Störpotentialen zu beschreiben.

Für rotationssymmetrische Störpotentiale entwickeln wir im Barrierenfall die Eigenwertzweige in $\lambda = \infty$ in $\lambda^{-1/(p+2)}$ bis zur ersten Ordnung und im Brunnenfall zeigen wir, daß sich für einen „typischen" Kopplungsparameter Spektrum in der Nähe von Eigenwerten eines Dirichlet-Schrödinger-Operators befinden muß.

Abschließend diskutieren wir im Hinblick auf das „Trapping and Cascading"-Muster aus [GGH$^+$88] die beiden obigen Beispiele. In einem Fall finden wir eine Abfolge von Parameterintervallen, auf denen sich das Spektrum in einer Umgebung von Eigenwerten eines Dirichlet-Schrödinger-Operators befindet, im Wechsel mit relativ kleinen Intervallen, auf denen sich das Spektrum des Modelloperators in Bewegung befindet.

Lebenslauf

Name:	Tilo Kayser
Geburtstag:	27. 03. 1965
Geburtsort:	Bremen
Familienstand:	ledig
Staatsangehörigkeit:	deutsch

Schule und Studium:

1971-1984	Schulausbildung in Bremen
Juni 1984	Abitur am Gymnasium Huckelriede
Okt. 1985	Aufnahme des Studiums der Mathematik an der Uni Hannover
April 1986 bis Nov. 1993	Studium der Mathematik an der Uni Oldenburg (Nebenfach: Informatik)
November 1993	Diplom im Fach Mathematik

Berufstätigkeit:

Aug. 1984 bis Nov. 1985	Zivildienst in der Kinder– und Jugendpsychiatrie des Evang. Hospitals Lilienthals
Jan. 1994	wissenschaftliche Hilfskraft mit Abschluß am Fachbereich Mathematik der Uni Oldenburg
März 1994 bis März 1995	wissenschaftliche Hilfskraft mit Abschluß am Institut Analysis der TU Dresden
April 1995 bis Sept. 1995	Teilzeitbeschäftigung als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut Analysis der TU Dresden im Rahmen einer DFG-Sachbeihilfe
seit Oktober 1995	wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut Analysis der TU Braunschweig