

Zur anisotropen Sobolev-Regularität der elektronischen Schrödinger-Gleichung

vorgelegt von

Diplom-Mathematiker
Hans-Christian Kreusler
aus Berlin

Von der Fakultät II - Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Berlin
zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Naturwissenschaften
– Dr. rer. nat. –

genehmigte Dissertation

Promotionsausschuss:

Vorsitzender: Prof. Dr. rer. nat. Martin Skutella

Berichter: Prof. Dr. rer. nat. Harry Yserentant

Berichter: Prof. Dr. rer. nat. Etienne Emmrich

Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 10. Juni 2011

Berlin 2011

D 83

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	iii
Notationen	xi
1 Grundlegender Teil	1
1.1 Hamilton-Operatoren	1
1.2 Die elektronische Schrödinger-Gleichung	8
1.3 Regularität von Wellenfunktionen	12
2 Strukturaussagen über anisotrope Sobolev-Räume	17
2.1 Anisotrope Sobolev-Räume	17
2.2 Interpolation von anisotropen Sobolev-Räumen	25
2.3 Ein Dichtheitsresultat für anisotrope Sobolev-Räume	28
2.4 Jastrow-Faktoren in anisotropen Sobolev-Räumen	39
3 Anwendungen auf die Schrödinger-Gleichung	51
3.1 Regularität in $H_{\text{mix}}^{1,0}$, $H_{\text{mix}}^{s,1}$ und $H_{\text{mix,w}}^{1,1}$	51
3.2 Optimalität	54
3.3 Approximation von Wellenfunktionen	59
Anhang	63
A.1 Hardy-Ungleichungen	63
A.2 Abschneidefunktionen	66
A.3 Interpolation von Banach-Räumen	70
Literaturverzeichnis	87

Einleitung

Viele Phänomene der Natur und der Physik wie die Wärmeverteilung in einem Körper, die Konzentrationsverteilung von chemischen Stoffen oder auch statische Ladungsverteilungen können durch elliptische Differentialoperatoren beschrieben werden. Eine große Klasse – ja geradezu Paradebeispiele – solcher Operatoren bilden die Hamilton-Operatoren, welche durch Ausdrücke der Form

$$u \mapsto Hu := -\frac{1}{2}\Delta u + Vu \tag{0.1}$$

definiert werden. Neben der grundlegenden Frage, ob und unter welchen Voraussetzungen an das Potential V die zugehörigen Operatorgleichungen $Hu = f$ für gegebene rechte Seiten f überhaupt lösbar sind und ob diese Lösung gegebenenfalls eindeutig bestimmt ist, ist eines der klassischen Probleme der Theorie partieller Differentialgleichungen, welche Regularitätseigenschaften die Lösungen besitzen. Gerade für Hamilton-Operatoren sind es nun gerade nicht die Lösungen von Operatorgleichungen $Hu = f$, die von erstem Interesse sind, sondern vielmehr steht die Frage im Mittelpunkt, ob ein solcher Operator Eigenfunktion, also Lösungen der Eigenwertgleichung

$$Hu = \lambda u,$$

für gewisse Eigenwerte λ besitzt und welche Eigenschaften sich für diese Eigenfunktionen zeigen lassen. In dieser Arbeit beleuchten wir einige Aspekte dieser Fragestellung näher und gelangen zu neuen Regularitätsaussagen für die Eigenfunktionen des elektronischen Hamilton-Operators.

Hamilton-Operatoren sind in der Quantenmechanik von ganz grundlegender Bedeutung. Das Verhalten der Grundbausteine der Chemie, Atome und Moleküle, wird durch derartige Operatoren modelliert. Moleküle setzen sich zusammen aus ihren Kernen und einer Anzahl von Elektronen. Nun ist eine der fundamentalen Grundannahmen der Quantenmechanik, daß diese Bausteine nicht als Partikel an genau festgelegten Orten aufgefasst werden können, vielmehr wird jedem Teilchen die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte an jedem Ortspunkt zugeordnet. Bei N Teilchen wird ein stationäres System dementsprechend beschrieben durch eine Wellenfunktion $u : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{C}$; die Wahrscheinlichkeit, daß sich das

i -te Teilchen jeweils in einem Raumgebiet $Q_i \subset \mathbb{R}^3$ befindet, ist dann gegeben durch

$$\int_{Q_1 \times \dots \times Q_N} |u(x_1, \dots, x_N)|^2 d(x_1, \dots, x_N).$$

Das quantenmechanische System selbst wird modelliert durch einen Hamilton-Operator H der Form (0.1). Der Laplace-Term repräsentiert hier die kinetische Energie, das Potential V die potentiellen Energien des Systems. Befindet sich das Molekül in einem zeitlich stabilen Zustand, so sind die Wellenfunktionen gerade die Lösungen der (zeitunabhängigen) Schrödinger Gleichung

$$Hu = \lambda u,$$

also die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators H . Die Eigenwerte λ selbst bestimmen in dieser Situation die Energie des Gesamtsystems.

Je nachdem, welche physikalischen Gesetzmäßigkeiten bei der Modellierung berücksichtigt werden, hat das Potential ganz unterschiedliche Form. In dieser Arbeit beschäftigen wir uns mit der Born-Oppenheimer-Approximation eines quantenmechanischen Systems und dem hieraus resultierenden elektronischen Hamilton-Operator. Die Grundidee ist hierbei, daß die Masse der Kerne im Verhältnis zur Masse der Elektronen sehr groß ist und die Kerne dementsprechend in guter Näherung als unbeweglich angesehen werden können. Effekte wie sie beispielsweise aus der speziellen Relativitätstheorie resultieren, werden ebenfalls vernachlässigt. In dieser Situation ist dann der sogenannte *elektronische Hamilton-Operator* eines Systems mit N Elektronen und K Kernen, welche an den Orten $a_k \in \mathbb{R}^3$ lokalisiert sind und die Ladung Z_k tragen, gegeben durch¹

$$H := -\frac{1}{2}\Delta - \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K \frac{Z_k}{|x_i - a_k|} + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N \frac{1}{|x_i - x_j|}, \quad (0.2)$$

mit $x_i \in \mathbb{R}^3$ wird hier die Koordinate des i -ten Elektrons bezeichnet. Wir fassen H zunächst auf als unbeschränkten Operator in $L^2(\mathbb{R}^{3N})$ mit Definitionsbereich $H^2(\mathbb{R}^{3N})$. In dieser Situation ist H dann selbstadjungiert ([60, 97, 99]), sein Spektrum also rein reell. Eine genauere Analyse stellt insbesondere das HVZ-Theorem von Hunziker, van Winter und Zhislin bereit ([54, 100]): Das Spektrum von H besteht aus unendlich vielen isolierten Eigenwerten, welche sich nur von unten an der sogenannten Ionisierungsschranke Σ häufen, sowie aus wesentlichem Spektrum, das oberhalb von Σ liegt. Die Eigenfunktionen zu den isolierten

¹Hier und im weiteren ignorieren wir sämtliche auftretende physikalischen Konstanten wie beispielsweise das (reduzierter) Plancksche Wirkungsquantum \hbar beziehungsweise sehen die entsprechenden Ausdrücke als geeignet normiert an.

Eigenwerten sind nun gerade jene Zustände, welche für uns von Interesse sind, repräsentieren sie doch die stabilen Zustände des Systems zu immer höheren Energieniveaus.

Schon Kato bewies in den 1950er Jahren, daß diese Eigenfunktionen überall stetig sind und lokal Lipschitz-stetige erste Ableitungen außerhalb der Singularitäten des Coulomb-Potentials besitzen ([59]). In der Tat ist außerhalb dieser Singularitätenmenge das Potential eine glatte Funktion, eine Eigenschaft, die sich aus ganz allgemeinen Prinzipien auf die Eigenfunktionen überträgt ([52]). Die weitere Forschung konzentrierte sich in der Folge deshalb auf die immer genauere Analyse der Wellenfunktionen an den Singularitäten, insbesondere M. und T. Hoffmann-Ostenhof und ihre Mitstreiter sind in diesem Zusammenhang zu nennen ([48–50],[29–31]). Die grundlegende Idee bei diesen Untersuchungen ist eine Darstellung der Wellenfunktion u in der Form

$$u = \mathcal{F}u_0.$$

Der uniforme Faktor \mathcal{F} , in der numerischen Analysis zumeist Jastrow-Faktor benannt, zeigt hierbei ein genau quantifizierbares Verhalten an den Singularitäten. Der abgespaltene Anteil u_0 ist – je nach Wahl von \mathcal{F} – von höherer Regularität als u selbst. So konnte gezeigt werden, daß im Falle der Inkorporation aller Zwei-Elektronen-Singularitäten in \mathcal{F} der reguläre Teil u_0 sogar im Hölder-Raum $C^{1,\alpha}(\mathbb{R}^{3N})$ liegt für alle $\alpha \in (0, 1)$ ([48]). Je nach Wahl des Jastrow-Faktors lassen sich diese Ergebnisse weiter verfeinern ([30]).

Ein grundlegendes Problem der elektronischen Schrödinger-Gleichung ist nun, daß sich ihre Lösungen – mit Ausnahme des einfachsten Falles $N = 1$, des Wasserstoffs – nicht explizit bestimmen lassen. Die Wellenfunktionen müssen also numerisch approximiert werden. Der zunächst naheliegende Versuch einer vollen Diskretisierung scheitert am *Fluch der Dimension*: Schon bei einer moderaten Anzahl von 100 Stützstellen in jeder Dimension, hat das voll diskretisierte System die immense Anzahl von 10^{6N} Freiheitsgraden, selbst bei einem so einfachen Molekül wie Sauerstoff O_2 ergibt dies ungeheure 10^{96} Unbekannte, eine Zahl die um Größenordnungen höher ist als die Anzahl der Atome im Universum!

Als möglichen Ausweg aus dieser Situation wurden in jüngerer Vergangenheit insbesondere *Dünne Gitter* vorgeschlagen ([13, 35, 37, 110, 111]). Besitzt die zu approximierende Funktion gewisse Regularitätseigenschaften, so erlaubt es diese Methode, a priori Diskretisierungsschemata zu entwerfen, welche substantiell weniger Freiheitsgrade besitzen als eine volle Diskretisierung und deshalb die Möglichkeit in Reichweite rücken zu lassen, die Wellenfunktionen in beliebiger Genauigkeit direkt zu approximieren (siehe auch Abschnitt 3.3). Die hierzu nötige sogenannte *anisotrope Sobolev-Regularität* oder *gemischte Regularität* der Wellenfunktionen ist das zentrale Thema dieser Arbeit. Während klassische

Regularitätsresultate für elliptische Operatoren zumeist in isotropen Sobolev-Räumen $H^s(\mathbb{R}^{3N})$ oder allgemeiner $W^{s,p}(\mathbb{R}^{3N})$ oder auch in Hölder-Räumen $C^{k,\alpha}(\mathbb{R}^{3N})$ formuliert sind (vergleiche Abschnitt 1.1), sind die zugrundeliegenden Räume bei der gemischten Regularität gerade die anisotrope Sobolev-Räume $H_{\text{mix}}^{s,1}(\mathbb{R}^{3N})$, $s > 0$ (siehe Kapitel 2).

Im Falle $s = 0$ stimmt dieser Raum gerade mit $H^1(\mathbb{R}^{3N})$ überein. Die wesentliche Eigenschaft von Funktionen $u \in H_{\text{mix}}^{s,1}(\mathbb{R}^{3N})$, $s > 0$, ist nun, daß sie für jedes Elektron i in eine der drei entsprechenden Koordinatenrichtungen $x_{i,1}, x_{i,2}, x_{i,3}$ bis zur Ordnung s abgeleitet werden können und diese Ableitungen in $H^1(\mathbb{R}^{3N})$ liegen. Dementsprechend existieren also *gewisse* Ableitungen von u bis zur Ordnung $Ns + 1$ und sind quadratintegrierbar, die Funktionen werden also mit wachsendem N immer regulärer. Dies ist der Effekt, welcher bei der Diskretisierung über dünne Gitter ausgenutzt werden kann. Im Vergleich hierzu sind im isotropen Fall $u \in H^s(\mathbb{R}^{3N})$ zwar *alle* Ableitungen von u der Ordnung s quadratintegrierbar, diese Regularität ist jedoch von der Anzahl N der Elektronen unabhängig.

Die wesentlichen Räume in diesem Kontext sind somit die anisotropen Sobolev-Räume $H_{\text{mix}}^{s,1}(\mathbb{R}^{3N})$. Im allgemeinen definieren wir diese als Vervollständigung der Menge $\mathcal{D}(\mathbb{R}^{3N})$ der Testfunktionen bezüglich der über die Fourier-Transformation \hat{u} von u gegebene Norm

$$\|u\|_{\text{mix},s,1} := \left(\int (1 + |\omega|^2) \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|^2)^s |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega \right)^{1/2}, \quad u \in \mathcal{D}.$$

Äquivalent hierzu kann $\|\cdot\|_{\text{mix},s,1}$ auch über Interpolation oder in einer Sobolev-Slobodeckij-Formulierung definiert werden (siehe Abschnitt 2.1).

Die grundlegende Frage, ob nun die Eigenfunktionen des elektronischen Hamilton-Operators eine derartige gemischte Regularität besitzen, also gerade in gewissen anisotropen Sobolev-Räumen $H_{\text{mix}}^{s,1}(\mathbb{R}^{3N})$ liegen, konnte Yserentant vor einigen Jahren positiv beantworten ([105]) und öffnete so die elektronische Schrödinger-Gleichung für Approximationsschemata im Sinne dünner Gitter: Im allgemeinen sind die Wellenfunktionen enthalten in $H_{\text{mix}}^{1/2,1}(\mathbb{R}^{3N})$.

Der einzig explizit lösbare Fall $N = 1$ zeigt, daß die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators im allgemeinen nicht mehr in $H^{5/2}(\mathbb{R}^{3N}) = H_{\text{mix}}^{3/2,1}(\mathbb{R}^{3N})$ liegen, $s = 3/2$ stellt somit eine erste obere Schranke der gemischten Regularität dar. Nun wird der Einteilchenfall von den Kern-Elektron-Wechselwirkungen der Form $1/|x - a|$ bestimmt, welche im Sinne der anisotropen Sobolev-Regularität weniger singular ist als die Elektron-Elektron-Wechselwirkungen der Form $1/|x_i - x_j|$. In der Tat kann gezeigt werden, daß alle Eigenfunktionen eines Hamilton-Operators eines Systems von N Elektronen in $H_{\text{mix}}^{s,1}(\mathbb{R}^{3N})$ liegen für $s < 3/2$, falls die Elektron-Elektron-Wechselwirkung ignoriert wird ([107]). Bislang war es nun

eine offene Frage, in welcher Weise die Elektron-Elektron-Wechselwirkung die Regularitätseigenschaften der Wellenfunktionen beeinflusst, ob sich also die Regularitätsresultate auf gewisse $s > 1/2$ verbessern lassen und wo gegebenenfalls im Intervall $[1/2, 3/2)$ die scharfe Schranke für die Regularität zu verorten ist.

Beide Fragen können nun in dieser Arbeit beantwortet werden. In [108, 109] konnte Yserentant beweisen, daß bei geeigneter Wahl des Jastrow-Faktors \mathcal{F} der regularisierte Teil u_0 in $H_{\text{mix}}^{1,1}(\mathbb{R}^{3N})$ liegt. Aus den im zweiten Teil dieser Arbeit gewonnenen strukturellen Eigenschaften der Mixräume und insbesondere aus den hier gezeigten Abbildungseigenschaften von Jastrow-Faktoren können wir hieraus neue Regularitätsaussagen beweisen: Wir zeigen, daß die allgemeinen Wellenfunktionen in $H_{\text{mix}}^{s,1}(\mathbb{R}^{3N})$ liegen für alle $s < 3/4$ (Abschnitt 3.1). Zur Analyse der Optimalität dieser Aussagen ist zu beachten, daß die elektronische Schrödinger-Gleichungen im Mehrteilchenfall $N > 1$, also gerade, wenn die Elektron-Elektron-Wechselwirkung auftritt, nicht explizit lösbar ist. Ausweg hierbei ist nun die Idee, die Kern-Elektron-Wechselwirkung durch ein glattes harmonisches Potential zu ersetzen. Die Eigenfunktionen des auf diese Weise definierten sogenannten Harmoniums sind nun explizit berechenbar, ihre Regularitätseigenschaften werden durch die verbleibende Elektron-Elektron-Wechselwirkung bestimmt. Eine geeignete Analyse dieser Eigenfunktionen zeigt nun, daß diese genau in den Räumen $H_{\text{mix}}^{s,1}(\mathbb{R}^{3N})$ liegen für $s < 3/4$. In diesem Sinne sind die hier gezeigten Regularitätsresultate demnach optimal (Abschnitt 3.2).

Diese Arbeit ist in drei Teile gegliedert. Im ersten Kapitel geben wir eine grundlegende Einführung in das Thema. Dabei behandeln wir in Abschnitt 1.1 zunächst die Lösungs- und insbesondere Regularitätstheorie elliptischer Operatoren, wobei allgemeine Hamilton-Operatoren besondere Berücksichtigung finden. Wir formulieren hier des weiteren allgemeine Regularitätsbegriffe für abstrakte Operatoren und legen dar, wie diese für die Regularitätsuntersuchungen von Eigenfunktionen genutzt werden können. Im folgenden Abschnitt 1.2 konzentrieren wir uns dann auf den elektronischen Hamilton-Operator, den zentralen Operator dieser Arbeit. Hier stellen wir dessen grundlegende Eigenschaften vor, insbesondere bezüglich des Spektrums und der Symmetrie und den Abfalleigenschaften der Eigenfunktionen. Im dritten Abschnitt 1.3 des ersten Teil geben wir eine Übersicht über die bisher bekannten Regularitätsresultate für die elektronischen Wellenfunktionen und ordnen in diesem Kontext die von uns neu gewonnenen Aussagen ein.

Der zweite Teil ist der Untersuchung der strukturellen Eigenschaften von anisotropen Sobolev-Räumen gewidmet. Hier werden die wesentlichen Hilfsmittel bereitgestellt, die wir im weiteren zum Beweis der Regularitätsaussagen benötigen. Im ersten Abschnitt 2.1 definieren wir die Mixräume $H_{\text{mix}}^{s,\nu}$ und beweisen

einige ganz grundlegende Eigenschaften. Ein weiterer Schwerpunkt liegt hier in der Formulierung einer Reihe von äquivalenten Normdarstellungen. Insbesondere die Sobolev-Slobodeckij-Variante mag von unabhängigem Interesse sein, erlaubt sie doch eine Formulierung der gebrochenen Mixnormen ohne Rückgriff auf die Fourier-Transformation. Dies kann beispielsweise die technische Behandlung des Coulomb-Potentials, welche sich im Fourier-Bereich als recht kompliziert erweist, erleichtern. Im folgenden Abschnitt 2.2 zeigen wir, daß die Skala $(H_{\text{mix}}^{s,\nu})$ unter reeller Interpolation abgeschlossen ist, die Interpolation zwischen diesen Räumen also wieder in anisotrope Sobolev-Räume mündet. Der Dichtheitssatz 2.3.4 stellt die Kernaussage des Kapitels 2.3 dar. Er besagt, daß sich Funktionen aus $H_{\text{mix}}^{s,0}$ beliebig gut durch glatte Funktionen approximieren lassen, deren Träger von den Singularitäten des Coulomb-Potentials wegbeschränkt ist, falls $s < 3/4$ ist. Dies erlaubt die besonders einfache Behandlung des Potentialterms in diesen Räumen. Wir geben diesen Satz hier an, obwohl wir ihn schließlich nicht zum Beweis neuer Regularitätsresultate nutzen konnten, da wir meinen, daß er von unabhängigem Interesse sein könnte. Das Hauptproblem bei der Anwendung dieser Aussage zum Beweis neuer Regularitätsresultate ist die Identifizierung der Interpolationsräume zwischen den echten Unterräumen, welche durch derartige glatte Funktionen erzeugt werden. Im Gegensatz zur Skala $(H_{\text{mix}}^{s,\nu})$ ist es hier nicht klar, ob hier die Interpolationsräume wieder von entsprechender Form sind!

Im letzten Abschnitt 2.4 des zweiten Teils betrachten wir schließlich die Abbildungseigenschaften von Jastrow-Faktoren zwischen verschiedenen anisotropen Sobolev-Räumen. Diese Aussagen stellen die wesentlichen Hilfsmittel zur weiteren Betrachtung der Regularität der Wellenfunktionen des elektronischen Hamilton-Operators dar.

Dieser Untersuchung ist der dritte Teil dieser Arbeit gewidmet. Im ersten Abschnitt 3.1 beweisen wir die bereits erwähnten neuen Regularitätsaussagen in anisotropen Sobolev-Räumen. Hierüber hinaus zeigen wir, daß die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators sogar in exponentiell gewichteten Mixräumen liegen, die (gebrochenen) gemischten Ableitungen also gewissermaßen exponentiell abfallen. In 3.2 betrachten wir das Wasserstoffatom und die Wellenfunktionen des Harmoniums, anhand derer wir aufzeigen, daß unsere Regularitätsaussagen optimal sind. Schließlich skizzieren wir im letzten Abschnitt 3.3 die Implikationen dieser Aussagen im Kontext der numerischen Analysis.

Im Anhang schließlich zeigen wir zunächst in Abschnitt A.1 eine Reihe verschiedener Varianten der Hardy-Ungleichung, dem zentralen Hilfsmittel bei der Untersuchung des Coulomb-Potentials. In unserer Arbeit werden diese bei der Behandlung der Jastrow-Faktoren benötigt. Im zweiten Abschnitt A.2 untersuchen wir detailliert, wie sich die Ableitungen von sogenannten Abschneidefunktionen quantitativ verhalten, Abschätzungen, wie sie insbesondere für die Dichtheitsaussagen des Satzes 2.3.4 benötigt werden. Dies beinhaltet eine quan-

titative Betrachtung der Ableitungen der Abstandsfunktion $(x, y) \mapsto |x - y|$ in \mathbb{R}^6 . In A.3 geben wir eine einheitliche Einführung in die Theorie der reellen Interpolation zwischen Banach-Räumen.

Zu guter Letzt möchte ich mich bedanken:

bei Herrn Prof. Dr. Harry Yserentant für die Betreuung und die Unterstützung, bei Herrn Prof. Dr. Etienne Emmrich für mannigfaltige interessante und motivierende Gespräche und die Übernahme des Zweitgutachtens und schließlich bei meinen Kollegen und Freunden der ganzen erweiterten Arbeitsgruppe für wirklich außergewöhnlich nette Jahre, Diskussionen, Kaffee- und Spielrunden. In besonderem Maße gilt dies für Andreas Zeiser, André Uschmajew, I.M. Malabar, Max Klimm, Jochen Garcke und Moritz Biskamp: Vielen Dank!

Notationen

Wir halten zunächst einige grundlegende Schreibweisen und Bezeichnungen fest, wobei wir zumeist eine Standardnotation verwenden.

In dieser Arbeit werden wir ausschließlich mit Räumen von Funktionen zu tun haben, welche über ganz \mathbb{R}^n definiert sind, weshalb wir im folgenden den zugrundeliegenden Raum nicht explizit erwähnen. Mit $L^2 = L^2(\mathbb{R}^n)$ sei demnach wie üblich der Raum der quadratintegrierbaren meßbaren Funktionen über \mathbb{R}^n bezeichnet, für die entsprechende L^2 -Norm schreiben wir

$$\|u\|_0 = \left(\int_{\mathbb{R}^n} |u(x)|^2 dx \right)^{1/2},$$

für das L^2 -Skalarprodukt entsprechend

$$(u, v)_0 := \int_{\mathbb{R}^n} u v dx.$$

Die Sobolev-Räume $H^k = W^{k,2}$, $k = 1, 2, \dots$, bestehen aus jenen L^2 -Funktionen, deren sämtliche Ableitungen bis zum Grade k quadratintegrierbar sind (siehe hierzu des weiteren [1]), die entsprechende Norm ist gegeben durch

$$\|u\|_k^2 = \sum_{|\alpha| \leq k} \|\partial^\alpha u\|_0^2.$$

Wir verwenden hier die übliche Multiindex-Schreibweise: Für einen Multiindex $\alpha \in \mathbb{N}^n$ ist

$$\partial^\alpha := \prod_{i=1}^n \frac{\partial^{\alpha_i}}{\partial x_i^{\alpha_i}},$$

der Betrag ist gegeben durch $|\alpha| := \alpha_1 + \dots + \alpha_n$.

Insbesondere wird also die H^1 -Norm definiert durch $\|u\|_1^2 = \|u\|_0^2 + |u|_1^2$, wobei die Halbnorm $|\cdot|_1$ gegeben ist durch

$$|u|_1^2 := \sum_{i=1}^n \|\partial u / \partial x_i\|_0^2 = \|\nabla u\|_0^2.$$

Die Sobolev-Räume H^k umfassen die Menge $\mathcal{D} := C_0^\infty$ der unendlich oft differenzierbaren Funktionen mit kompaktem Träger und die Menge \mathcal{S} der Schwartz-Funktionen, also die Teilmenge der glatten Funktionen, welche samt ihren Ableitungen schneller als jedes Polynom fallen für $|x| \rightarrow \infty$. Wir merken an, daß

in unserem Fall H^k gerade die Vervollständigung sowohl von \mathcal{D} als auch von \mathcal{S} bezüglich der Norm $\|\cdot\|_k$ ist.

Des Weiteren findet gelegentlich der Raum $W^{1,\infty}$ Verwendung, welcher aus allen Funktionen besteht, welche schwache erste Ableitungen besitzen und samt diesen wesentlich beschränkt sind. Schließlich sind mit $C^{k,\alpha}$, $k \in \mathbb{N}$, $\alpha \in (0, 1]$ die Hölder-Räume der Funktionen bezeichnet, welche stetige Ableitungen bis zur Ordnung k besitzen und deren Ableitungen k -ter Ordnung Hölder-stetig zum Exponenten α sind, es also eine Konstante $C > 0$ gibt mit

$$|\partial^\alpha u(x) - \partial^\alpha u(y)| \leq C|x - y|^\alpha, \quad x, y \in \mathbb{R}^n$$

für alle Multiindizes mit $|\alpha| = k$, siehe auch ([90]).

Für eine Funktion $u \in \mathcal{S}$ definieren wir die Fourier-Transformation \hat{u} durch

$$\hat{u}(\omega) = (\mathcal{F}u)(\omega) := \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int e^{-i\omega \cdot x} u(x) dx,$$

welche sich bekanntermaßen zu einem isometrischen Isomorphismus $\mathcal{F} : L^2 \rightarrow L^2$ fortsetzen lässt, es gilt also $\|u\|_0 = \|\hat{u}\|_0$ (siehe beispielsweise [53, 103, 108]). Die H^1 -Norm einer Funktion $u \in H^1$ ist dann gegeben durch

$$\|u\|_1^2 = \int (1 + |\omega|^2) |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega.$$

Mit Hilfe der Fouriertransformation lassen sich leicht Sobolev-Räume H^s definieren für gebrochene Koeffizienten $s > 0$, die entsprechende Norm ist gegeben durch

$$\|u\|_s^2 = \int (1 + |\omega|^2)^s |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega.$$

Weitere Möglichkeiten zur Konstruktion derartiger gebrochener Sobolev-Räume beispielsweise mittels Interpolation (Besov-Räume) oder einer Sobolev-Slobodeckij-Norm werden hier nicht weiter thematisiert, wir verweisen aber auf die entsprechenden Definitionen und Beweise im Falle anisotroper Sobolev-Räume in Abschnitt 2.1. In dieser Arbeit machen wir extensiven Gebrauch der Fourier-Darstellung der auftretenden Normen. Die inverse Fourier-Transformation benötigen wir gelegentlich und bezeichnen sie entsprechend mit \mathcal{F}^{-1} .

Zu einem Banach-Raum V bezeichnen wir mit V^* den kanonischen Dualraum, die entsprechende duale Paarung ist durch $\langle \cdot, \cdot \rangle : V^* \times V \rightarrow \mathbb{C}$ beziehungsweise \mathbb{R} gegeben. Die Dualräume der Sobolev-Räume H^k bezeichnen wir entsprechend mit $(H^k)^*$, obwohl sie in unserem Fall mit H^{-k} zusammenfallen.

Ist ein Banach-Raum V in einen anderen Banach-Raum U stetig eingebettet, gilt also $V \subset U$ und gibt es eine Konstante $C > 0$ mit $\|v\|_U \leq C\|v\|_V$ für alle

$v \in V$, so schreiben wir $V \hookrightarrow U$, sind U und V sogar isometrisch isomorph, so notieren wir $U \cong V$.

Ein Gelfand-Dreier besteht aus einem separablen, reflexiven Banach-Raum V mit Dualraum V^* und einem separablen Hilbert-Raum H , derart, daß V stetig und dicht in H eingebettet ist: $V \hookrightarrow H \cong H^* \hookrightarrow V^*$.

Ein Banach-Raum V ist zerlegt in die direkte Summe $V = V_1 \oplus V_2$ zweier Unterräume, falls sich jedes Element von V eindeutig als Summe je eines Elementes aus V_1 und V_2 schreiben lässt.

Wir machen ausgiebig Gebrauch der folgenden Notation: Kann ein Ausdruck, beispielsweise eine Norm, bis auf einen konstanten Faktor gegen einen anderen Ausdruck abgeschätzt werden, so verwenden wir das Symbol \lesssim , wenn die auftretenden Konstanten nicht näher bestimmt werden sollen oder können. Gilt eine derartige Beziehung in beide Richtungen, so schreiben wir \sim .

Die Resolventenmenge ρ eines linearen Operators $A : V \supset D(A) \rightarrow V$ mit Definitionsbereich $D(A)$ besteht aus allen Punkten $\lambda \in \mathbb{C}$, so daß der Operator $(A - \lambda I)^{-1} : V \rightarrow V$ existiert und beschränkt ist. Das Spektrum σ ist gegeben durch $\sigma = \mathbb{C} \setminus \rho$. Ein Eigenwert von A ist gerade ein Punkt λ des Spektrums, für den der Kern $\ker(A - \lambda)$ nichttrivial ist, die zu λ gehörenden Eigenvektoren beziehungsweise Eigenfunktionen sind dann gerade die Elemente dieses sogenannten Eigenraums. Die für uns wesentliche Feincharakterisierung des Spektrums ist die disjunkte Aufteilung $\sigma = \sigma_{ess} \cup \sigma_{disk}$ in das wesentliche Spektrum σ_{ess} und das diskrete Spektrum σ_{disk} . Letzteres umfasst alle Eigenwerte endlicher Vielfachheit (also mit endlich-dimensionalem Eigenraum), welche isolierte Punkte des Spektrums sind. Diese sind für uns von besonderem Interesse. Das wesentliche Spektrum umfasst den Rest des Spektrums.

Abschließend wollen wir bemerken, daß in dieser Arbeit die Mengeninklusion \subset stets auch Gleichheit der Mengen umfasst: $\subset = \subseteq$.

1 Grundlegender Teil

1.1 Hamilton-Operatoren

Aus mathematischer Sicht verstehen wir ganz allgemein unter einem Hamilton- oder Schrödinger-Operator einen elliptischen Differentialoperator, welcher durch einen Differentialausdruck der Form

$$Lu = -\frac{1}{2}\Delta u + Vu \tag{1.1.1}$$

definiert wird. Als das zugrundeliegende Ortsgebiet beschränken wir uns in dieser Arbeit durchweg auf \mathbb{R}^n , betrachten also Ganzraumprobleme. Die Funktion $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ nennen wir hierbei das Potential des Operators; dessen Eigenschaften sind entscheidend für das Verhalten des ganzen Operators. In dieser Arbeit sind wir insbesondere interessiert an der variationellen Formulierung und definieren somit den entsprechenden Hamilton- oder Schrödinger-Operator zunächst formal durch

$$A : H^1 \rightarrow (H^1)^*, \quad A = A_0 + B,$$

mit dem Hauptteil

$$\langle A_0 u, v \rangle := (\nabla u, \nabla v)_0, \quad u, v \in H^1,$$

und dem Potentialteil

$$\langle B u, v \rangle := (V u, v)_0, \quad u, v \in H^1.$$

Wir gehen hier auf die Grundlagen der Theorie der elliptischen Operatoren und deren starker, schwacher oder variationeller Lösungseigenschaften nicht näher ein und verweisen auf die Standardwerke wie beispielsweise [21, 26, 36, 39, 87, 101].

Es ist leicht zu sehen, daß der Operator $A_0 : H^1 \rightarrow (H^1)^*$ wohldefiniert und beschränkt ist. Damit dergleichen auch für $B : H^1 \rightarrow (H^1)^*$ gilt, müssen gewisse Anforderungen an das Potential V gestellt werden, es reicht beispielsweise aus, wenn $V \in L^\infty$ liegt. Eine solche Bedingung ist jedoch für die meisten auftretenden Potentiale nicht erfüllt. Insbesondere gilt dies auch für das für uns wesentliche Coulomb-Potential der elektronischen Schrödinger-Gleichung (siehe

Abschnitt 1.2). Wir fordern somit zunächst lediglich ganz allgemein, daß auch B beschränkt ist, also einer Abschätzung der Form

$$|\langle Bu, v \rangle| \lesssim \|u\|_1 \|v\|_1, \quad u, v \in H^1$$

genügt.

Für einen Operator $A : H^1 \rightarrow (H^1)^*$ ist im allgemeinen das Lösungsverhalten der Operatorgleichung

$$Au = f \tag{1.1.2}$$

für ein (oder gewisse) $f \in (H^1)^*$ von Interesse. Eines der grundlegenden Hilfsmittel bei der Beantwortung der Frage nach Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen von (1.1.2) ist sicherlich das Lemma von Lax-Milgram:

Satz 1.1.1. *Es sei V ein (reeller) Hilbert-Raum und $A : V \rightarrow V^*$ ein linearer beschränkter Operator, welcher stark positiv¹ sei, das heißt, es gebe eine Konstante $c > 0$, so daß*

$$\langle Av, v \rangle \geq c \|v\|^2$$

für alle $v \in V$ gelte. Dann ist A bijektiv.

Ist diese Bedingung erfüllt, so löst der Satz das Existenz- und Eindeutigkeitsproblem der Gleichung (1.1.2) vollständig: Ist $f \in V^*$ eine rechte Seite, so gibt es aufgrund des Lemmas von Lax-Milgram genau eine Lösung $u \in V$ der Gleichung $Au = f$. Wir bemerken, daß aus der starken Monotonie unmittelbar die Stabilitätsabschätzung $\|u\| \leq 1/c \|f\|_*$ für eine Lösung u folgt. Ein Beweis des Lemmas von Lax-Milgram findet der Leser beispielsweise in jedem der oben angegebenen Lehrbücher zur Theorie der partiellen Differentialgleichungen.

Im Falle des Hamilton-Operators bereitet der Nachweis der starken Positivität von A keine Mühe, falls das Potential weitere geeignete Eigenschaften aufweist. Setzen wir beispielsweise voraus, daß V zusätzlich eine Bedingung der Form $V \geq c > 0$ erfüllt, so ist A in der Tat stark positiv und das Lemma von Lax-Milgram induziert dann die eindeutige Lösbarkeit der Gleichung (1.1.2) auf \mathbb{R}^n für beliebige rechte Seiten beispielsweise aus $L^2(\mathbb{R}^n)$. Leider ist dies beispielsweise im Falle des Coulomb-Potentials nicht gegeben, so daß wir hierfür entsprechende erweiterte Abschätzungen benötigen, wir vertiefen diese Überlegungen im nächsten Abschnitt.

Obleich es selbstverständlich unübersehbar viele weitere Hilfsmittel zur Lösung des Existenzproblems für Operatorgleichungen wie (1.1.2) gibt, wollen wir auf diese an dieser Stelle nicht weiter eingehen und verweisen auch hier auf die oben genannte Literatur. In der Tat erlaubt es uns nämlich die einfache Struktur

¹Die Bezeichnungen gehen an dieser Stelle in der Literatur auseinander. So wird diese Bedingung bei verschiedenen Autoren auch als Koerzitivität oder V -Elliptizität von A bezeichnet.

des Hamilton-Operators, sich bei den entsprechenden Untersuchungen ganz auf das Lemma von Lax-Milgram zurückzuziehen.

Neben der Frage nach Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen sowohl eines Differentialgleichungsproblems als auch der zugehörigen Operatorgleichung ist die Untersuchung der Regularität dieser Lösungen von besonderem Interesse. Nun ist dieser zunächst noch undefinierte Begriff für Lösungen einer Differentialgleichung, also für Funktionen, recht intuitiv zu fassen: Besitzt eine solche Lösung Ableitungen höheren Grades? Sind diese stetig? Zu welcher Potenz ist die Funktion oder sind ihre Ableitungen integrierbar, kurz, ist die Funktion „glatter“ als zunächst angenommen werden konnte? Formal können wir das Regularitätsproblem also auffassen als die Frage, in welchen Funktionenräumen eine Lösung der Differentialgleichung liegt. Im allgemeinen wird dies von den Eigenschaften der Koeffizientenfunktionen und der rechten Seite abhängen.² Wir können die Regularitätsfrage also wie folgt formulieren: Unter welchen Bedingungen an die Koeffizientenfunktionen liegen die Lösungen des Differentialgleichungsproblems in einem gewissen – kleineren – Funktionenraum, sofern die rechte Seite aus einem gewissen – kleineren – Funktionenraum gewählt wird.

Diese Grundidee läßt sich nun auf Operatorprobleme der Form (1.1.2) übertragen und motiviert die folgende Definition des abstrakten Regularitätsbegriffes für Lösungen allgemeiner Operatorgleichungen.

Definition 1.1.2. *Es sei ein (linearer) Operator $A : V \rightarrow U$ gegeben. Weiterhin sei V_1 ein Unterraum von V und U_1 ein Unterraum von U . Der Operator A heißt (V_1, U_1) -regulär, falls jede Lösung der Operatorgleichung $Au = f$ für ein beliebiges $f \in U_1$ in V_1 liegt.*

Ein solcher Operator hat nun gerade die gewünschten Regularitätseigenschaften: Eine Lösung u zu einer rechten Seite f , welche eine gewisse Glattheit besitzt ($f \in U_1$), besitzt dann selber eine gewisse Glattheit: $u \in V_1$.

Ist der Operator selbst sogar bijektiv, können wir die entsprechende Operatorregularität wie folgt fassen:

Lemma 1.1.3. *Es sei ein (linearer) bijektiver Operator $A : V \rightarrow U$ gegeben. Weiterhin sei V_1 ein Unterraum von V und U_1 ein Unterraum von U . Dann ist A (V_1, U_1) -regulär, falls die Einschränkung von A auf V_1 surjektiv auf U_1 abbildet, falls also $A|_{V_1} : V_1 \rightarrow U_1$ wohldefiniert und surjektiv ist.*

Beweis. Sei $f \in U_1$ und sei $u \in V$ eine Lösung von $Au = f$, diese ist wegen der Bijektivität von A eindeutig. Nun gibt es wegen der Surjektivität von $A|_{V_1}$

²Es sei bemerkt, daß im Falle beschränkter Gebiete, oder allgemeiner Gebiete mit nichtleerem Rand, die geometrischen Eigenschaften des Gebietes und des Randes und eventuell geforderte Randbedingungen weiteren wesentlichen Einfluss auf die Regularität der Lösungen haben.

ein $\tilde{u} \in V_1$ mit $f = A|_{V_1}\tilde{u} = A\tilde{u}$. Die Eindeutigkeit der Lösung impliziert nun $u = \tilde{u} \in V_1$. \square

Im Falle einer variationellen Formulierung eines Differentialgleichungsproblems behandeln wir Operatoren $A : V \rightarrow V^*$, wobei V ein Banach- oder sogar Hilbert-Raum ist. Sind dann $V_1 \subset V$ und $U_1 \subset V^*$ Unterräume, so ist also der Operator $A|_{V_1} : V_1 \rightarrow U_1$ zu betrachten. In der Regel ist dabei U_1 selbst der Dualraum eines Hilbert-Raumes W_1 , $U_1 = (W_1)^*$, wobei $V \subset W_1$ gilt, so daß die Bedingung $U_1 \subset V^*$ erfüllt ist. Die Untersuchung von Operatoren der Form $A|_{V_1} : V_1 \rightarrow (W_1)^*$ läßt sich nun nicht mehr mit dem Lemma von Lax-Milgram durchführen, an dessen Stelle treten beispielsweise inf-sup-Bedingungen. Da wir nur an der Surjektivität solcher Operatoren interessiert sind, genügt hierfür beispielsweise der folgende Satz von Lions:

Satz 1.1.4. *Es sei V ein Hilbert-Raum und W ein normierter Raum. Weiterhin sei $A : V \rightarrow W^*$ linear und beschränkt und es gelte die folgende inf-sup-Bedingung:*

$$\inf_{\|w\|_W=1} \sup_{\|v\|_V \leq 1} |\langle Av, w \rangle| \geq c > 0.$$

Dann ist A surjektiv.

Einen Beweis dieses Satzes findet der Leser in [91].

Eine Vielzahl von Schwierigkeiten beim Regularitätsproblem für elliptische Differentialoperatoren resultiert aus der Untersuchung des Verhaltens der Lösungen am Rande des Definitionsgebietes, entsprechende Betrachtungen nehmen einen Großteil der Literatur zum Thema ein. Für die Untersuchung der elektronischen Schrödinger-Gleichung ist das entsprechende Problem, wie bereits erwähnt, nun auf ganz \mathbb{R}^n definiert, Untersuchungen des Randverhaltens sind also hier nicht notwendig, entscheidend ist die sogenannte innere Regularität. Wir wollen nun kurz einige entsprechende bekannte Regularitätsaussagen, wie sie etwa in [2, 7, 21, 36, 39, 73, 101] und besonders auch in [80, 90] zu finden sind, in der Form der Definition 1.1.2 darstellen. Hierbei sei stets $A : H^1 \rightarrow (H^1)^*$ der zur variationellen Formulierung

$$\langle Au, v \rangle := - \sum_{i,j=1}^n \int_{\mathbb{R}^n} a_{ij} \partial_{x_i} u \partial_{x_j} v dx + \sum_{i=1}^n \int_{\mathbb{R}^n} b_i \partial_{x_i} u v dx + \int_{\mathbb{R}^n} c u v dx \quad (1.1.3)$$

eines allgemeinen elliptischen Differentialausdruck

$$Lu = \sum_{i,j=1}^n \partial_{x_j} (a_{ij} \partial_{x_i} u) + \sum_{i=1}^n b_i \partial_{x_i} u + cu, \quad (1.1.4)$$

gehörender Operator. Eines der grundlegenden Regularitätsresultate ist folgende Satz (vergleiche beispielsweise [36, 87, 101])

Satz 1.1.5. *Es sei A stark positiv und für die Koeffizientenfunktionen gelte $a_{ij} \in W^{1,\infty}$ und $b_i, a \in L^\infty$ für $i, j = 1, \dots, n$. Dann ist der Operator A $(H^1 \cap H_{\text{loc}}^2, L^2)$ -regulär.*

Induktiv kann hieraus für die höheren Ableitungen gezeigt werden (siehe beispielsweise [39], mit etwas anderen Voraussetzungen auch [2, 21, 36, 73, 101]).

Satz 1.1.6. *Es sei A stark positiv und für die Koeffizientenfunktionen gelte $a_{ij} \in W^{k,\infty}$ und $b_i, a \in W^{k-1,\infty}$ für $i, j = 1, \dots, n$. Dann ist der Operator A $(H^1 \cap H_{\text{loc}}^{k+1}, H^{k-1})$ -regulär.*

Eine ganz andere Klasse von Regularitätsaussagen behandelt die Frage nach der Hölder-Stetigkeit der Lösungen, deren vielleicht bekanntester Vertreter der Satz von de Giorgi-Nash-Moser ist, insbesondere in der für allgemeine inhomogene Differentialgleichungsprobleme, wie wir sie hier betrachten, verallgemeinerten Form von Morrey ([80], siehe auch [7, 90, 93]). Wir zitieren nach [36]:

Satz 1.1.7. *Es seien die Koeffizienten $a_{ij}, b_i, c \in L^\infty$ für $i, j = 1, \dots, n$. Dann ist für $q > n/2$ der Operator A $(H^1 \cap C_{\text{loc}}^{0,\alpha}, L^q)$ -regulär. Jede Lösung des Differentialgleichungsproblems zu einer rechten Seite aus L^q ist also lokal Hölder-stetig, wobei der Hölder-Koeffizient lokal variieren kann und auch von q abhängt.*

Es sei schließlich bemerkt, daß wir uns ganz allgemein in dieser Darstellung auf die rein qualitative Aussage beschränken, in welchen Funktionenräumen die Lösung jeweils enthalten ist. Von großem Interesse ist oft die weiterführende Frage, ob sich gewisse Stabilitätsungleichungen zeigen lassen, ob also die jeweilige Norm der Lösung durch die Norm der rechten Seite beschränkt werden kann. In der Tat sind derartige Abschätzungen oft möglich und in der angegebenen Literatur zu finden.

Eine naheliegende Fragestellung, die im Falle eines Hamilton-Operators oft sogar von eigentlicher Bedeutung ist, ist nun, ob ähnliche Resultate auch in dem Fall zu erwarten sind, daß die rechte Seite ein Vielfaches der gesuchten Größe ist, wir es also mit einem Eigenwertproblem der Form

$$Au = \lambda u$$

zu tun haben. Hier stellt sich zunächst die nichttriviale Frage, ob A tatsächlich Eigenwerte besitzt. Dies ist in der Tat der Fall, falls – im Falle eines Hamilton-Operators mit Potential V – dieses gewisse zusätzliche Bedingungen erfüllt. Wir wollen hier im allgemeinen nicht näher darauf eingehen und verweisen beispielsweise auf [60, 100]. Im nächsten Abschnitt wird diese Frage für den speziellen Fall der elektronischen Schrödinger-Gleichung näher beleuchtet.

Betrachten wir zunächst die „klassische“ beziehungsweise „schwache“ Situation. Es sei $V \subset U$ und $A : V \rightarrow U$. Dies ist in der Tat beispielsweise der Fall, wenn A der zur klassischen beziehungsweise schwachen Formulierung eines Differentialgleichungsproblems assoziierte Operator ist. Ist u eine Eigenfunktion zu einem Eigenwert λ , also $Au = \lambda u$, so liegt u per definitionem zunächst im Definitionsbereich V . Setzen wir nun $f = \lambda u \in V$, so löst u offenbar die Gleichung $Au = f$ und da nun also sogar $f \in V \subset U$ gilt, können wir hoffen, daß wir für u weitergehende Regularitätsaussagen gewinnen können. In der Tat, falls nun A für ein $V_1 \subset V$ sogar (V_1, V) -regulär im Sinne des vorigen Abschnittes ist, so folgt, daß u und damit alle Eigenfunktionen von A sogar in $V_1 \subset V$ liegen.

Für die Behandlung von elliptischen Differentialoperatoren ist nun insbesondere die schwache Formulierung über einen beschränkten Operator $A : V \rightarrow V^*$ von Interesse. In diesem Fall freilich können klassische Eigenwerte und -funktionen nicht mehr definiert werden. Die Struktur eines Gelfand-Tripels erlaubt nun die folgende Verallgemeinerung.

Definition 1.1.8. *Es sei $V \subset H \cong H^* \subset V^*$ ein Gelfandtripel und $E : H \rightarrow H^*$ der kanonische Riesz-Isomorphismus. Weiter sei $A : V \rightarrow V^*$ ein beschränkter Operator. Dann ist $u \in V$ eine (variationelle) Eigenfunktion zum Eigenwert λ , falls $Au = \lambda Eu$ in V^* gilt, also $\langle Au, v \rangle = \lambda \langle u, v \rangle_H$ für alle $v \in V$.*

Ist A der zur variationellen Formulierung eines Differentialgleichungsproblems gehörende Operator, so ist leicht zu sehen, daß etwaige Eigenfunktionen im starken oder schwachen Sinne auch solche im variationellen Sinne sind.

Nach dieser Definition liegen somit alle Eigenfunktionen u von A zunächst lediglich in V . Da $W_1 := E(V) \subset V^*$ gilt, so ist auch hier zu erwarten, daß wir vermöge des Ansatzes $f = \lambda Eu \in W_1$ weitergehende Regularitätsaussagen gewinnen können. Im einfachsten Fall ist A bereits (V_1, W_1) -regulär mit einem Unterraum $V_1 \subset V$. Da wieder u eine (und im Falle eines bijektiven Operators sogar die eindeutige) Lösung des Problems $Au = f = \lambda Eu$ in V^* ist, so folgt unmittelbar, daß u und damit alle Eigenfunktionen von A sogar in V_1 liegen.

Diese einfache Methode nutzt, daß Eigenwerte im Definitionsbereich des Operators liegen und sich damit im allgemeinen als glattere rechte Seite interpretieren lassen. Um dies auszunutzen, müssen wir allerdings voraussetzen, daß der Operator (V_1, W_1) -regulär ist für einen Raum W_1 , der den Definitionsbereich (beziehungsweise eine geeignete Einbettung desselben) umfaßt. Eine solche Regularitätsaussage ist nun aber in vielen Fällen und insbesondere für Regularität außerhalb der klassischen Sobolev-Räume nicht bekannt oder auch nicht zu erwarten. Dies ist insbesondere der Fall für die Regularität in Räumen gemischter Ableitungen wie sie uns für die elektronische Schrödinger-Gleichung interessiert.

Um dieses Problem zu lösen, ist häufig die folgende Überlegung das Mittel der Wahl: Es sei der Raum V zerlegt in eine direkte Summe $V = V_r \oplus V_s$, jede

Funktion $u \in V$ sei also eindeutig darstellbar als $u = u_r + u_s$, wobei $u_r \in V_r$ den „regulären“ und $u_s \in V_s$ den „singulären“ Anteil von u repräsentiere. Entsprechend sei diese Zerlegung so gewählt, daß u_r jedenfalls hinreichend regulär ist: Das heißt, ist es unser Ziel zu zeigen, daß die Eigenfunktion u in einem Unterraum $V_1 \subset V$ liegt, so soll zumindest $V_r \subset V_1$ gelten. Das Problem reduziert sich somit auf die Frage, ob $u_s \in V_1$ gilt.

Ist nun $u = u_r + u_s$ ein Eigenwert von A , so gilt für alle $v \in V$

$$\langle Au, v \rangle = \lambda(u, v),$$

also

$$\langle Au_s, v \rangle - \lambda(u_s, v) = \lambda(u_r, v) - \langle Au_r, v \rangle.$$

Dies gilt insbesondere für alle $v_s \in V_s$, also

$$\langle Au_s, v_s \rangle - \lambda(u_s, v_s) = \lambda(u_r, v_s) - \langle Au_r, v_s \rangle. \quad (1.1.5)$$

Die linke Seite dieser Gleichung interpretieren wir nun – zunächst formal – als einen neuen Operator

$$A_\lambda : V_s \rightarrow (V_s)^*, \quad \langle A_\lambda u_s, v_s \rangle := \langle Au_s, v_s \rangle - \lambda(u_s, v_s),$$

die rechte Seite von (1.1.5) als Funktional

$$f_\lambda \in (V_s)^*, \quad \langle f_\lambda, v_s \rangle := \lambda(u_r, v_s) - \langle Au_r, v_s \rangle.$$

Anstelle des Eigenwertproblems betrachten wir somit nun die Operatorgleichung $A_\lambda u_s = f_\lambda$ in $(V_s)^*$. Die V_1 -Regularität des Eigenwertes u , beziehungsweise seines „singulären“ Anteils u_s , läßt sich somit wieder auf eine klassische Regularitätsaussage für Operatorprobleme zurückführen. Ist nämlich der Operator A_λ als $(V_1 \cap V_s, W_1)$ -regulär erkannt für einen gewissen Unterraum $W_1 \subset (V_s)^*$, und liegt die rechte Seite f_λ in W_1 , so folgt tatsächlich $u_s \in V_1$ und damit auch $u = u_r + u_s \in V_1$. Die in dieser Arbeit gewonnenen Regularitätsresultate für Eigenfunktionen der elektronischen Schrödinger-Gleichung basieren letztlich auf derartigen Überlegungen.

Abschließend beleuchten wir noch kurz die allgemeine Vorgehensweise am Beispiel eines Hamilton-Operators mit glattem Potential. Nehmen wir also an, daß A eine Eigenfunktion u zu einem Eigenwert λ besitzt und daß des weiteren das Potential V glatt sei und die weiteren oben genannten Voraussetzungen erfülle. Aus dem zitierten Regularitätssatz 1.1.6 erhalten wir nun, daß A mit $W_1 := E(H^1)$ in der Tat (H^3, W_1) -regulär ist und im allgemeinen sogar (H^{k+2}, W_k) -regulär, $W_k := E(H^k)$. Somit liegt zunächst die Eigenfunktion u in H^3 und dann induktiv sogar in jedem H^k , $k \in \mathbb{N}$. Der Sobolevsche Einbettungssatz liefert hieraus dann die Aussage, daß in der Tat die Eigenfunktionen von A in C^∞ liegen.

1.2 Die elektronische Schrödinger-Gleichung

In dieser Arbeit fokussieren wir uns auf den sogenannten elektronischen Hamilton-Operator. Diesen stellen wir zunächst in spinfreier Formulierung vor und behandeln die wesentlichen grundlegenden Eigenschaften. Am Ende dieses Abschnittes gehen wir dann noch kurz auf das Pauli-Prinzip und dessen Auswirkungen auf die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators ein. Wir beleuchten hier im wesentlichen die mathematische Seite der Schrödinger-Gleichung und gehen auf die physikalische Herleitung und Interpretation nur am Rande ein, dem interessierten Leser seien hier beispielsweise [38, 69, 76, 79, 95, 98] genannt. Für die folgende Darstellung verweisen wir auch auf [104, 108].

Der den elektronischen Hamilton-Operator definierende Differentialausdruck ist gegeben durch

$$L := -\frac{1}{2}\Delta - \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K \frac{Z_k}{|x_i - a_k|} + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N \frac{1}{|x_i - x_j|}, \quad (1.2.1)$$

$x_i, a_k \in \mathbb{R}^3$, $i = 1, \dots, N$, $k = 1, \dots, K$. Somit ist L also in der Tat von der Form (1.1.1). Durch L definieren wir entsprechend wie oben in variationeller Formulierung den für diese Arbeit entscheidenden Hamilton-Operator $H : H^1 \rightarrow (H^1)^*$; wir werden in Kürze sehen, daß auch hier, trotz des singulären Charakters des Potentials, H wohldefiniert ist. Wieder sei H zerlegt in den durch den Laplace-Term definierten Hauptteil A_0 sowie den Potentialteil B .

Zunächst zur physikalischen Interpretation: Der Operator H beschreibt ein System von N Elektronen mit den Ortskoordinaten $x_i \in \mathbb{R}^3$, $i = 1, \dots, N$, im externen elektromagnetischen Feld, welches durch K Kerne mit Ladungen Z_k an den Positionen $a_k \in \mathbb{R}^3$, $k = 1, \dots, K$, erzeugt wird. Das Potential $V = V_{ne} + V_{ee}$ setzt sich demzufolge zusammen aus der Kern-Elektron-Anziehung

$$V_{ne} := - \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K \frac{Z_k}{|x_i - a_k|} \quad (1.2.2)$$

und der Elektron-Elektron-Abstoßung

$$V_{ee} := \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N \frac{1}{|x_i - x_j|}. \quad (1.2.3)$$

Mit $Z := \sum Z_k$ bezeichnen wir die Gesamtladung der Kerne, für neutrale Moleküle gilt dementsprechend beispielsweise $Z = N$. Ein voller (nichtrelativistischer)

Hamilton-Operator berücksichtigt darüber hinaus die Bewegungen sowie paarweise Abstoßung der Kerne untereinander. Der hier betrachtete elektronische Hamilton-Operator beschreibt die sogenannte Born-Oppenheimer-Approximation des vollen Systems. Da die Kerne im Verhältnis zu den Elektronen eine sehr große Masse besitzen, kann deren Relativbewegung für die meisten elektronischen Strukturüberlegungen vernachlässigt werden.

Bei der Untersuchung des Hamilton-Operators sind Hardy-Ungleichungen von besonderer Wichtigkeit. In einer ihrer einfachsten – für uns relevanten – Version lautet diese

$$\int \frac{u(x, y)^2}{|x - y|^2} d(x, y) \leq 2 \int |\nabla u(x, y)|^2 d(x, y) = 2|u|_1^2 \quad (1.2.4)$$

für Funktionen $u \in H^1(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$. Einen Beweis dieser Abschätzung findet der Leser beispielsweise in [105]. Insbesondere verweisen wir für verallgemeinerte Versionen, wie wir sie in den folgenden Abschnitten benötigen, sowie für weitere Referenzen auf den Anhang A.1.

Die Hardy-Ungleichung (1.2.4) stellt die zum Beweis der Wohldefiniertheit und Beschränktheit des Hamilton-Operators (1.2.1) benötigte Potentialabschätzung bereit. In der Tat folgt aus (1.2.4) unmittelbar:

Lemma 1.2.1. *Der Operator*

$$B : H^1 \rightarrow (H^1)^*, \quad \langle Bu, v \rangle := (Vu, v)_0$$

ist wohldefiniert und beschränkt.

Da die entsprechende Aussage für den Hauptteil

$$A_0 : H^1 \rightarrow (H^1)^*, \quad \langle A_0 u, v \rangle := (\nabla u, \nabla v)_0$$

klar ist, erhalten wir also wie erwünscht die grundlegende Aussage:

Korollar 1.2.2. *Der Hamilton-Operator $H = A_0 + B : H^1 \rightarrow (H^1)^*$ ist wohldefiniert und beschränkt.*

Da der Potentialteil beschränkt ist, ist es leicht zu sehen, daß für einen hinreichend groß gewählten Verschiebungsparameter $\mu > 0$ der geshiftete Operator $H + \mu E$ stark positiv ist³, $H + \mu E$ also nach dem Lemma von Lax-Milgram ein bijektiver Operator ist.

Nun sind wir weniger an Lösungen einer Operatorgleichung $Hu = f$ also vielmehr an Eigenfunktionen von H , also an Lösungen der Schrödinger-Gleichung

$$Hu = \lambda Eu$$

³Hier ist E der L^2 -Riesz-Isomorphismus, siehe auch Definition 1.1.8.

interessiert. Somit ist zunächst das Spektrum des Hamilton-Operators zu untersuchen. Genauer sei hierzu zunächst $\mathcal{H} : L^2 \supset H^2 \rightarrow L^2$ der zur schwachen Formulierung gehörende Operator: $\mathcal{H}u := -\frac{1}{2}\Delta u + Vu$, wobei hier der Laplace-Operator im schwachen Sinne zu verstehen ist. Es ist bekannt, daß bei dieser Wahl des Definitionsbereiches \mathcal{H} einen unbeschränkten, selbstadjungierten Operator definiert ([57, 58, 60, 98, 99]). Das Spektrum von \mathcal{H} ist also eine Teilmenge von \mathbb{R} . Grundlegend für die Theorie der Schrödinger-Gleichung und damit in gewisser Weise für die ganze Quantenmechanik, ist nun die Feststellung, daß für Systeme der Art, wie wir sie hier betrachten, das Spektrum wie folgt in zwei Teile zerfällt:

Es gibt eine Schranke $\Sigma \in \mathbb{R}$, die Ionisierungsschwelle, derart, daß das wesentliche Spektrum von \mathcal{H} gerade durch $[\Sigma, \infty)$ gegeben ist. Unterhalb von Σ liegt dementsprechend nur diskretes Spektrum, also isolierte Eigenwerte endlicher Vielfachheit. Diese können sich höchstens bei Σ häufen.

Dies ist die Aussage des zentralen HVZ-Theorems, welches unabhängig voneinander von Hunziker, van Winter und Zhislin in den 1960er Jahren bewiesen werden konnte, wir verweisen hierzu beispielsweise auf [38, 54, 100]. Für neutrale Atome und positive Ionen ($N \leq Z$) ist darüberhinaus das diskrete Spektrum nichtleer, genauer besteht es sogar aus unendlich vielen Eigenwerten, die sich dementsprechend in der Tat bei $\Sigma = \inf \sigma_{ess}$ häufen müssen ([112]). Physikalisch repräsentieren die zum diskreten Spektrum gehörenden Eigenfunktionen die gebundenen Zustände des Systems, die Eigenfunktionen zum kleinsten Eigenwert den Grundzustand des Systems. Diese Funktionen sind für die Quantenmechanik von höchstem Interesse, sind sie doch die mathematische Beschreibung der stabilen Zustände, in denen sich das quantenmechanische System befinden kann.

Betrachten wir die variationelle Formulierung $H : H^1 \rightarrow (H^1)^*$ des Hamilton-Operators, so gelten die analogen Aussagen: H besitzt unterhalb der Ionisierungsschwelle Σ nur (variationelle) diskrete Eigenwerte endlicher Vielfachheit, das wesentliche Spektrum ist in $[\Sigma, \infty)$ enthalten. Eine sehr schöne Darstellung und Herleitung dieser Aussage findet der Leser in [108]. Der elektronische Hamilton-Operator besitzt also tatsächlich Eigenwerte und -funktionen. Diese gilt es im folgenden zu untersuchen. Nach der Definition liegen sie zunächst in H^2 beziehungsweise H^1 , die weitere Untersuchung ihrer Regularitätseigenschaften ist ein Hauptziel dieser Arbeit. Im folgenden Abschnitt stellen wir einige bekannte Regularitätsaussagen vor, in Abschnitt 3 schließlich können wir einige neue Aussagen gewinnen.

Neben den reinen Regularitätsaussagen ist es insbesondere sowohl analytisch als auch für die Numerik von Interesse, ob und inwieweit die für uns relevanten

Eigenfunktionen des diskreten Spektrums exponentiell abfallen. Die grundlegenden Aussagen dieser Art formulieren dies in L^2 - beziehungsweise L^∞ -Räumen und wurden in den 1970er Jahre bewiesen ([19, 23, 82]), siehe insbesondere auch [3]. Die für uns relevante Grundaussage in Form einer isotropen L^2 -Abschätzung lässt sich wie folgt formulieren ([108]):

Ist $u \in H^1$ eine Eigenfunktion des elektronischen Hamilton-Operators zu einem Eigenwert $\lambda < \Sigma$ des diskreten Spektrums, so gilt für jedes $\tilde{\Sigma} < \Sigma$:

$$x \mapsto e^{\sqrt{2(\tilde{\Sigma}-\lambda)}|x|}u(x) \in L^2 \quad \text{und} \quad x \mapsto e^{\sqrt{2(\tilde{\Sigma}-\lambda)}|x|}(\nabla u)(x) \in L^2.$$

Dies kann so interpretiert werden, daß sowohl die Eigenfunktionen selbst als auch ihre ersten Ableitungen in geeignet exponentiell gewichteten L^2 -Räumen liegen. Aussagen dieser Art sind von fundamentaler Wichtigkeit insbesondere für die numerische Behandlung der Eigenwertprobleme (vgl. Abschnitt 3.3). In [108, 109] konnte gezeigt werden, daß eine analoge Aussage auch für gewisse Ableitungen höherer Ordnung gilt, daß also die Eigenfunktionen in gewissen exponentiell gewichteten anisotropen Sobolev-Räumen $H_{\text{mix,exp}}^{1/2,1}$ liegen. In Abschnitt 3.1 werden wir die entsprechende Aussage verallgemeinert zeigen in den Räumen $H_{\text{mix,exp}}^{s,1}$ für alle $s < 3/4$.

Abschließend gehen wir nun noch kurz auf die Symmetrieeigenschaften der Eigenfunktionen ein, für eine ausführliche Darstellung der hier skizzierten Zusammenhänge verweisen wir abermals auf [105, 108, 110].

Die physikalische Wellenfunktion beruht nicht nur auf den Elektronenvariablen $x_i \in \mathbb{R}^3$, $i = 1, \dots, N$; jedes Elektron besitzt darüber hinaus eine weitere Eigenschaft, den sogenannten Spin, welcher formal die Werte $-1/2$ und $1/2$ annehmen kann. In diesem Sinne sind die physikalischen Zustandsfunktionen auf $\mathbb{R}^{3N} \times \{-1/2, 1/2\}^N$ definiert. Die Gesamtmenge der Elektronen kann somit zerlegt werden in die Teilmengen jener mit Spin $-1/2$ und Spin $1/2$, wobei jede mögliche Verteilung auftreten kann. Für den Spin gilt nun ein weiteres grundlegendes und von der eigentlichen Schrödinger-Gleichung zunächst unabhängiges Gesetz, das sogenannte Pauli-Prinzip. Es besagt insbesondere, daß sich das Vorzeichen der Wellenfunktion umkehrt bei Vertauschung von zwei Elektronenvariablen zu Elektronen gleichen Spins: Bezeichnen wir mit $\sigma_i \in \{-1/2, 1/2\}$ den Spin des Elektrons mit den Ortskoordinaten $x_i \in \mathbb{R}^3$, so gilt also:

Ist $\sigma_i = \sigma_j$ und bezeichnet P den Permutationsoperator, welcher die i -te mit der j -ten Ortskoordinate vertauscht, so gilt

$$u(Px) = -u(x)$$

für jede physikalische Wellenfunktion u .

In diesem Sinne sind die Wellenfunktionen antisymmetrisch bezüglich des Vertauschens von Elektronen gleichen Spins. Insbesondere kann hieraus die für die Analysis entscheidende Eigenschaft gefolgert werden, daß die Wellenfunktionen verschwinden entlang der Diagonalen $\{x_i = x_j\}$, falls die entsprechenden Spins übereinstimmen: $\sigma_i = \sigma_j$.

Nun hängt der elektronische Hamilton-Operator nicht explizit vom Spin ab. Wie in den genannten Quellen gezeigt wird, kann hieraus abgeleitet werden, daß sich der Spin aus der eigentlichen Betrachtung der Schrödinger-Gleichung herauslösen lässt; die physikalische Wellenfunktion setzt sich zusammen aus Komponenten, welche jeweils die elektronische (spinlose) Schrödinger-Gleichung erfüllen. Dem Pauli-Prinzip wird dann durch die erwähnten Symmetrieeigenschaften Rechnung getragen.

Da antisymmetrische Funktionen entlang (gewisser) Diagonalen $\{x_i = x_j\}$ verschwinden, also gerade dort, wo das Elektron-Elektron-Potential des Hamilton-Operators singularär wird, so ist zu erwarten, daß antisymmetrische Wellenfunktionen eine höhere Regularität besitzen als solche ohne derartige Symmetrieeigenschaften. Dies ist in der Tat der Fall: Wie in [105, 107] aufgezeigt werden konnte, sind die allgemeinen Wellenfunktionen enthalten im anisotropen Sobolev-Raum $H_{\text{mix}}^{1/2,1}$, vollständig antisymmetrische hingegen sogar in $H_{\text{mix}}^{1,1}$. Da sich nun aber Elektronen unterschiedlichen Spins durchaus am selben Ort befinden dürfen, also die Wellenfunktionen an den entsprechenden Diagonalen nicht verschwinden müssen, so können die besseren Regularitätseigenschaften lediglich innerhalb der Elektronenmengen gleichen Spins gelten, im allgemeinen nicht jedoch für die gesamte Wellenfunktion.

Aus diesem Grunde legen wir in dieser Arbeit unser Hauptaugenmerk auf den allgemeinen Fall. Dem Pauli-Prinzip und den hieraus folgenden Symmetrieeigenschaften tragen wir Rechnung, in dem wir jeweils die besseren Regularitätsergebnisse für vollständig antisymmetrische Eigenfunktionen zeigen, also für solche, deren sämtliche Elektronen gleichen Komponenten von Funktionen übertragen werden, welche nur teilweise antisymmetrisch sind, also auf die Komponenten zu Elektronen gleichen Spins, aus denen die physikalische Wellenfunktion zusammengesetzt ist.

1.3 Regularität von Wellenfunktionen

Die Eigenfunktionen des (elektronischen) Schrödinger-Operators sind die grundlegenden Objekte der Quantenmechanik, ihre Regularitätseigenschaften sind somit von großem theoretischen Interesse. Da sich im allgemeinen die Wellenfunktionen nicht analytisch bestimmen lassen, müssen diese numerisch approximiert werden, auch hier ist es für die numerische Analysis zur Konstruktion und Ana-

lyse von Approximationsmethoden fundamental wichtig, Kenntnisse über die Glattheit der anzunähernden Objekte zu gewinnen.

Die Eigenfunktionen im schwachen Sinne liegen zunächst per definitionem lediglich im Definitionsbereich des Hamilton-Operators, also etwa in H^2 , variationelle Eigenfunktionen zunächst sogar lediglich in H^1 . Ausgehend von Kato [59] wurde die Frage nach der genauen Regularität intensiv untersucht. Dort konnte gezeigt werden, daß die Wellenfunktionen überall stetig sind und außerhalb der Singularitäten beschränkte erste Ableitungen besitzen, die Wellenfunktionen also lokal Lipschitz sind, $u \in C_{loc}^{0,1}$. Für die ersten Ableitungen müssen darüber hinaus gewisse Bedingungen an den singulären Stellen des Potentials gelten, die sogenannten „Cusp Conditions“. Diese Art von Regularitätsaussagen ist charakteristisch für das Verhalten der Wellenfunktionen. In der Tat sind die Potentialterme außerhalb der Diagonalen beziehungsweise der Kernlokalitäten glatt. Dies überträgt sich entsprechend auf die Eigenfunktionen (vergleiche etwa Satz 1.1.6), in der Tat sind die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators sogar reell analytisch außerhalb der singulären Punkte des Potentials (vergleiche etwa [51, 52]). Der Hauptaugenmerk der weiteren Regularitätsuntersuchungen lag und liegt demzufolge auf einer immer genaueren Analyse des Verhaltens an den Singularitäten. An erster Stelle sind hier die Arbeiten von Hoffmann-Ostenhof et al. zu nennen [29–31, 48–50]. Die grundlegende Idee ist hierbei eine uniforme Darstellung der Wellenfunktionen u in der Form

$$u = \mathcal{F}u_0.$$

Hierbei ist \mathcal{F} ein insbesondere von u und u_0 unabhängiger Faktor. Die explizite Wahl von \mathcal{F} hängt insbesondere davon ab, welche genaue Form des Schrödinger-Operators betrachtet wird, in unserem Fall der elektronischen Schrödinger-Gleichung können wir für \mathcal{F} beispielsweise

$$\mathcal{F} = \exp(F) \tag{1.3.1}$$

wählen mit

$$F = \sum_{i < j} \phi(x_i - x_j) - \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K \phi(x_i - a_k). \tag{1.3.2}$$

Hierbei ist $\phi : \mathbb{R}^3 \rightarrow [0, \infty)$ beschränkt mit $\phi(x) = |x|$ für $|x| < 1$ sowie $\phi(-x) = \phi(x)$ auf ganz \mathbb{R}^3 , außerhalb von $\{|x| < 1\}$ sei ϕ als hinreichend glatt angenommen. Die zunächst wesentliche Eigenschaft ist hier, daß sich ϕ am Ursprung wie $|\cdot|$ verhält. Entscheidend ist nun, daß der „abgespaltene“ Anteil u_0 im allgemeinen bessere Regularitätseigenschaften besitzt als die Wellenfunktion u selbst, die Art der Singularität von u also im wesentlichen durch \mathcal{F} bestimmt

wird und genau quantifiziert werden kann. Wesentliche Erkenntnis im Sinne isotroper Hölder-Regularität der Wellenfunktion ist ([48]), daß nun $u_0 \in C^{1,\alpha}$ liegt für $\alpha \in (0, 1)$. Der gemäß (1.3.1), (1.3.2) gewählte Faktor \mathcal{F} berücksichtigt hier die Singularitäten, an denen genau zwei Elektronen beziehungsweise ein Elektron und ein Kern aufeinander treffen. Ergänzt man \mathcal{F} geeignet um Terme, welche zusätzlich die Stellen behandeln, an denen zwei Elektronen auf einen Kern treffen, so kann sogar gezeigt werden, daß dann der reguläre Teil u_0 in $C^{1,1}$ liegt ([30]) und daß eine Aussage dieser Art optimal ist.

Da \mathcal{F} uniform gewählt werden kann und da u_0 bessere Regularitätseigenschaften besitzt als u selbst, liegt die Idee nahe, anstelle von u eben jenen regulären Teil u_0 numerisch zu approximieren. In diesem Zusammenhang wird der Faktor \mathcal{F} auch Jastrow-Faktor genannt (vgl. [28] für weitere Analysen auch im Hinblick auf eine Besov-Regularität). Diese Bezeichnung wollen wir im weiteren übernehmen.

Die erwähnten Regularitätsaussagen behandeln intensiv das Verhalten der Wellenfunktionen an den singulären Stellen des Potentials im Sinne isotroper Hölder-Glattheit. Ausgehend von Überlegungen der numerischen Analysis (vgl. Abschnitt 3.3) ist nun eine ganz andere Art von Regularitätsresultaten motiviert, die von Yserentant in den letzten Jahren entwickelt wurden ([105, 107–109]), sogenannte „gemischte Regularität“ im Sinne anisotroper Sobolev-Räume $H_{\text{mix}}^{s,1}$, wie wir Sie im nächsten Abschnitt einführen werden. Derartige Aussagen sind insbesondere für die Analyse der Approximation durch dünne Gitter beziehungsweise hyperbolische Kreuze von Bedeutung (vergleiche Abschnitt 3.3).

Die Räume $H_{\text{mix}}^{s,1}$ bestehen – grob gesagt – aus Funktionen, welche gewisse (schwache) Ableitungen hoher Ordnung (genauer: der Ordnung $Ns + 1$) besitzen, welche quadratintegrierbar über \mathbb{R}^{3N} sind. Der für die Numerik wesentliche Aspekt ist hier, daß dementsprechend die Regularität mit der Anzahl N der Elektronen ansteigt.

Wie bereits erwähnt, konnte in [105, 107] gezeigt werden, daß die Eigenfunktionen u des elektronischen Hamilton-Operators im allgemeinen im Raum $H_{\text{mix}}^{1/2,1}$ liegen, vollständig antisymmetrische sogar in $H_{\text{mix}}^{1,1}$. In [108, 109] konnte weiterhin bewiesen werden, daß die entsprechenden gemischten Ableitungen sogar exponentiell abfallen.

Das Beispiel des Wasserstoffatoms zeigt bereits, daß im allgemeinen die Eigenfunktionen nicht in $H_{\text{mix}}^{s,1}$ liegen können für $s \geq 3/2$ (siehe Abschnitt 3.2). Nun besteht das Potential des Hamilton-Operators des einelektronigen Wasserstoffatoms nur aus der Elektron-Kern-Wechselwirkung, welche, wie wir sehen werden, bessere Regularitätseigenschaften besitzt als die Elektron-Elektron-Wechselwirkung. Das Beispiel des Harmoniums oder Hookium, bei dem im Vergleich zum elektronischen Hamilton-Operator das Kernpotential durch ein glat-

tes harmonisches Potential ersetzt wird und dessen Regularität infolgedessen von der Elektron-Elektron-Wechselwirkung bestimmt wird, zeigt, daß im allgemeinen keine höhere anisotrope Sobolev-Regularität erwartet werden kann als $u \in H_{\text{mix}}^{s,1}$ für $s < 3/4$ (Abschnitt 3.2).

Kern dieser Arbeit ist gerade der Nachweis, daß diese Schranken in der Tat scharf sind: Die Eigenfunktionen des elektronischen Hamilton-Operators sind im allgemeinen genau enthalten in $H_{\text{mix}}^{s,1}$ für $s < 3/4$, im vollständig antisymmetrischen Fall sogar in $H_{\text{mix}}^{s,1}$ für $s < 5/4$, siehe hierzu die Sätze 3.1.2 und 3.1.3.

2 Strukturaussagen über anisotrope Sobolev-Räume

Dieser Abschnitt ist der Untersuchung der anisotropen Sobolev-Räume gewidmet. Wir beweisen eine Reihe struktureller Aussagen, wie sie insbesondere für die Untersuchung der elektronischen Schrödinger-Gleichung von Interesse sind. Im ersten Teil definieren wir die relevanten Räume und zeigen einige grundlegende Sätze. Im folgenden stellen wir dann eine Reihe struktureller Resultate dar, mit deren Hilfe wir in Abschnitt 3 weitergehende Regularitätsaussagen des elektronischen Hamilton-Operators gewinnen werden.

2.1 Anisotrope Sobolev-Räume

Es sei wie üblich \mathcal{D} der Raum der beliebig oft stetig differenzierbaren Funktionen $u : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{R}$ mit kompaktem Träger, \hat{u} bezeichne die $3N$ -dimensionale Fouriertransformierte von u .

Für $s \in \mathbb{R}$ und $u \in \mathcal{D}$ definieren wir die beiden Familien anisotroper Sobolev-Normen¹.

$$\begin{aligned} \|u\|_{\text{mix},s,0} &:= \left(\int \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|^2)^s |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega \right)^{1/2}, \\ \|u\|_{\text{mix},s,1} &:= \left(\int (1 + |\omega|^2) \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|^2)^s |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.1.1)$$

Entsprechend sind die Räume $H_{\text{mix}}^{s,\nu}$, $\nu = 0, 1$ gerade gegeben als die Vervollständigungen von \mathcal{D} bezüglich der entsprechenden Normen.

Wir zeigen zunächst eine äquivalente Darstellung der Mixnormen.

¹Diese Normen werden auch als „Mixnormen“ bezeichnet. Wir bemerken an dieser Stelle weiterhin, daß in der Literatur eine Reihe unterschiedlicher Versionen der Mixnormen benutzt werden [105–107]. Wir halten uns hier an [106], welche für unsere Zwecke, insbesondere für die Interpolation, am geeignetesten ist. Die verschiedenen Versionen sind größtenteils äquivalent, einige werden weiter unten betrachten.

Lemma 2.1.1. Für $s > 0$ und $\nu = 0, 1$ definiert

$$\left(\int (1 + |\omega|^2)^\nu \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|^{2s}) |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega \right)^{1/2}, \quad u \in \mathcal{D}$$

eine auf \mathcal{D} zu $\|\cdot\|_{\text{mix},s,\nu}$ äquivalente Norm.

Beweis. Für $a, b \geq 0$ gilt für beliebige $s > 0$

$$a^s + b^s \leq 2 \max\{a, b\}^s \leq 2(a + b)^s$$

und für $s \geq 1$ weiterhin mit der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung

$$(a + b)^s \leq 2^{s-1}(a^s + b^s).$$

Für $0 < s < 1$ haben wir die allgemeine Abschätzung

$$(a + b)^s \leq a^s + b^s,$$

diese folgt zum Beispiel aus der bekannten Abschätzung $\|x\|_q \leq \|x\|_p$ für $1 \leq p \leq q$ und $x \in \mathbb{R}^n$ durch Substitution $y_i = |x_i|^{pq}$, siehe auch [88]. Somit erhalten wir insgesamt

$$(\max\{1, 2^{s-1}\})^{-1} (1 + |\omega_i|^2)^s \leq (1 + |\omega_i|^{2s}) \leq 2(1 + |\omega_i|^2)^s,$$

woraus die allgemeine Behauptung folgt. \square

Es gibt nun weiterhin eine äquivalente Definition der Mixnormen, welche ohne Fouriertransformation auskommt. Eine solche konstruieren wir analog zur Einführung der Sobolev-Slobodeckij-Räume in der Theorie der gebrochenen, isotropen Sobolev-Räume, eine grundlegende Einführung in dieses Thema wird beispielsweise in [43] gegeben, ansonsten verweisen wir auf [96] und insbesondere [81]. Wir beschränken uns im folgenden auf die Fälle $0 \leq s \leq 2$. Die entsprechenden äquivalente Definitionen und Beweise lassen sich aber leicht auf beliebige $s \geq 0$ übertragen.

Zur Vereinfachung der Darstellung der etwas technischen Konstruktionen dieses Abschnittes führen wir die folgenden Notationen ein. Diese tragen dem Umstande Rechnung, daß wir zumeist auf eine Elektronkoordinate $x_i \in \mathbb{R}^3$ als ganzes zugreifen müssen, die einzelnen „Unterkoordinaten“ $x_{i,1}, x_{i,2}, x_{i,3} \in \mathbb{R}$ werden hier nur in Ausnahmefällen benötigt.

Für $h \in \mathbb{R}^3$ und $j = 1, \dots, N$ bezeichnen wir mit he_j den Vektor

$$he_j := (0, \dots, 0, h, 0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^{3N},$$

das heißt

$$(he_j)_i = \begin{cases} h_k, & \text{falls } i = 3j + k, k = 1, 2, 3, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Für $u \in \mathcal{D}$ definieren wir den auf das j -te Koordinatentripel wirkenden Differenzenoperator $\Delta_j(h)$ durch

$$(\Delta_j(h)u)(x) := u(x + he_j) - u(x), \quad x \in \mathbb{R}^{3N}.$$

Weiterhin sei für eine Teilmenge von Indizes $\mathbb{A} \subseteq \{1, \dots, N\}$ mit \mathbb{A}^* die Menge aller Auswahlabbildungen $\alpha : \mathbb{A} \rightarrow \{1, 2, 3\}$ bezeichnet und mit $dh^{\mathbb{A}}$ das $3|\mathbb{A}|$ -dimensionale Volumenelement bezüglich der dreidimensionalen Variablen h_i , $i \in \mathbb{A}$, es gilt also für $\mathbb{A} = \{i_1, \dots, i_{|\mathbb{A}|}\}$ und für eine entsprechend integrierbare Funktion $f : \mathbb{R}^{3|\mathbb{A}|} \rightarrow \mathbb{R}$:

$$\int_{\mathbb{R}^{3|\mathbb{A}|}} f dh^{\mathbb{A}} = \int_{\mathbb{R}^{3|\mathbb{A}|}} f dh_{i_1} dh_{i_2} \cdots dh_{i_{|\mathbb{A}|}},$$

entsprechend auch für andere Variablen. Schließlich notieren wir für $\alpha \in \mathbb{A}^*$:

$$\partial_{\alpha}^{\mathbb{A}} := \prod_{i \in \mathbb{A}} \frac{\partial}{\partial x_{i, \alpha(i)}}$$

und analog für $\mathbb{B} \subseteq \mathbb{A}$, $\alpha \in \mathbb{A}^*$:

$$\partial_{\alpha}^{\mathbb{B}} := \prod_{i \in \mathbb{B}} \frac{\partial}{\partial x_{i, \alpha(i)}}.$$

Sofort aus der Definition ersichtlich sind zunächst die Feststellungen

$$\|\cdot\|_{\text{mix}, 0, 0} = \|\cdot\|_0 \quad \text{und damit} \quad H_{\text{mix}}^{0, 0} = L^2$$

sowie

$$\|\cdot\|_{\text{mix}, 1, 0} = \|\cdot\|_1, \quad \text{also} \quad H_{\text{mix}}^{1, 0} = H^1.$$

Über die weiteren hier betrachteten ganzzahligen Fälle $s = 1$ und $s = 2$ halten wir fest:

Lemma 2.1.2. *Für $u \in \mathcal{D}$ ist*

$$\|u\|_{\text{mix}, 1, 0}^2 = \sum_{\mathbb{A} \subseteq \{1, \dots, N\}} \sum_{\alpha \in \mathbb{A}^*} \|\partial_{\alpha}^{\mathbb{A}} u\|_0^2. \quad (2.1.2)$$

und

$$\|u\|_{\text{mix}, 2, 0}^2 \sim \sum_{\mathbb{A} \subseteq \{1, \dots, N\}} \sum_{\alpha \in \mathbb{A}^*} \|(\partial_{\alpha}^{\mathbb{A}})^2 u\|_0^2.$$

Ersetzen wir u durch ∇u , so erhalten wir die entsprechenden Aussagen für $\|\cdot\|_{\text{mix}, s, 1}$, $s = 1, 2$.

Beweis. Es ist allgemein für $a_i \geq 0$, $i = 1, \dots, N$

$$\prod_{i=1}^N (1 + a_i) = \sum_{\mathbb{A} \subseteq \{1, \dots, N\}} \prod_{i \in \mathbb{A}} a_i.$$

Ist $a_i = |\omega_i|^2 = \sum_{j=1}^3 \omega_{i,j}^2$, so folgt

$$\prod_{i \in \mathbb{A}} a_i = \prod_{i \in \mathbb{A}} \sum_{j_i=1}^3 \omega_{i,j_i}^2 = \sum_{\alpha \in \mathbb{A}^*} \prod_{i \in \mathbb{A}} \omega_{i,\alpha(i)}^2,$$

woraus wir (2.1.2) erhalten. Ist $a_i = |\omega_i|^4$, so können wir

$$\sum_{j=1}^3 \omega_{i,j}^4 \leq \left(\sum_{j=1}^3 \omega_{i,j}^2 \right)^2 = |\omega_i|^4 \leq 3 \sum_{j=1}^3 \omega_{i,j}^4$$

abschätzen. Mit Lemma 2.1.1 erhalten wir hieraus die Behauptung. \square

Für nichtganzzahlige s ist der Beweis der folgenden Slobodeckij-artigen Charakterisierung der Mixnorm aufwändiger, folgt aber dem klassischen Fall isotroper Räume (siehe hierzu beispielsweise [10, 43]).

Satz 2.1.3. *Es sei $0 < s < 1$. Dann ist auf \mathcal{D} die Norm $\|\cdot\|_{\text{mix},s,0}$ äquivalent zu der durch*

$$\left(\sum_{\mathbb{A} \subseteq \{1, \dots, N\}} \int_{\mathbb{R}^{3|\mathbb{A}|}} \frac{\|\prod_{i \in \mathbb{A}} \Delta_i(h_i) u\|_0^2}{\prod_{i \in \mathbb{A}} |h_i|^{3+2s}} dh^{\mathbb{A}} \right)^{1/2} \quad (2.1.3)$$

definierten Norm.

Ist $1 < s < 2$, $s = 1 + \sigma$, $0 < \sigma < 1$, so ist die Norm $\|\cdot\|_{\text{mix},s,0}$ auf \mathcal{D} äquivalent zu der durch

$$\left(\sum_{\mathbb{A} \subseteq \{1, \dots, N\}} \sum_{\alpha \in \mathbb{A}^*} \int_{\mathbb{R}^{3|\mathbb{A}|}} \frac{\|\prod_{i \in \mathbb{A}} \Delta_i(h_i) (\partial_{\alpha}^{\mathbb{A}} u)\|_0^2}{\prod_{i \in \mathbb{A}} |h_i|^{3+2\sigma}} dh^{\mathbb{A}} \right)^{1/2} \quad (2.1.4)$$

definierten Norm.

Beweis. Wir führen den Beweis nur für den Fall $1 < s < 2$ aus. Der Beweis für $0 < s < 1$ ist weniger aufwändig und wird dem Leser überlassen.

Wir fixieren $\mathbb{A} \subseteq \{1, \dots, N\}$ und $\alpha \in \mathbb{A}^*$. Wie durch Induktion leicht eingesehen werden kann, ist für $v \in \mathcal{D}$

$$\mathcal{F} \left(\prod_{i \in \mathbb{A}} \Delta_i(h_i) v \right) (\omega) = \prod_{i \in \mathbb{A}} (e^{i\omega_i h_i} - 1) \hat{v}(\omega), \quad \omega \in \mathbb{R}^{3N}$$

und wegen

$$\mathcal{F}(\partial_\alpha^\mathbb{A} u)(\omega) = i^{|\mathbb{A}|} \prod_{i \in \mathbb{A}} \omega_{i, \alpha(i)} \hat{u}(\omega), \quad \omega \in \mathbb{R}^{3N}$$

für $u \in \mathcal{D}$ folgt daraus

$$\begin{aligned} \left\| \prod_{i \in \mathbb{A}} \Delta_i(h_i)(\partial_\alpha^\mathbb{A} u) \right\|_0^2 &= \left\| \mathcal{F} \left(\prod_{i \in \mathbb{A}} \Delta_i(h_i)(\partial_\alpha^\mathbb{A} u) \right) \right\|_0^2 \\ &= \int_{\mathbb{R}^{3N}} \prod_{i \in \mathbb{A}} (|e^{i\omega_i h_i} - 1|^2 |\omega_{i, \alpha(i)}|^2) |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega \end{aligned}$$

Das Doppelintegral in (2.1.4) liest sich nun als

$$\begin{aligned} &\int_{\mathbb{R}^{3N}} \prod_{i \in \mathbb{A}} |\omega_{i, \alpha(i)}|^2 |\hat{u}(\omega)|^2 \int_{\mathbb{R}^{3|\mathbb{A}|}} \prod_{i \in \mathbb{A}} (|e^{i\omega_i h_i} - 1|^2 |h_i|^{-3-2\sigma}) dh^\mathbb{A} d\omega \\ &= \int_{\mathbb{R}^{3N}} \prod_{i \in \mathbb{A}} (|\omega_{i, \alpha(i)}|^2 |\omega_i|^{2\sigma}) |\hat{u}(\omega)|^2 \int_{\mathbb{R}^{3|\mathbb{A}|}} \prod_{i \in \mathbb{A}} (|e^{i\frac{\omega_i}{|\omega_i|} h_i} - 1|^2 |h_i|^{-3-2\sigma}) dh^\mathbb{A} d\omega \end{aligned}$$

Das innere Integral definiert eine nur von \mathbb{A} , nicht jedoch von ω abhängige Konstante $c_\mathbb{A}$, $0 < c_\mathbb{A} < \infty$: Für ein $\omega_i \neq 0$ sei $M \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ die orthogonale Matrix, welche den Einheitsvektor $\omega_i/|\omega_i|$ auf $(0, 0, 1)$ abbildet. Mit der Transformation $y = Mh_i$ folgt

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} |e^{i\frac{\omega_i}{|\omega_i|} h_i} - 1|^2 |h_i|^{-3-2\sigma} dh_i &= \int_{\mathbb{R}^3} |e^{iy_3} - 1|^2 |y|^{-3-2\sigma} dy \\ &= 2 \int_{\mathbb{R}^3} (1 - \cos(y_3)) |y|^{-3-2\sigma} dy = 8\pi \int_0^\infty \frac{r - \sin(r)}{r^{2+2\sigma}} dr =: c. \end{aligned}$$

Da $r - \sin(r) \leq \min\{2r, r^3\}$ für $r > 0$ folgt

$$0 < c \leq 8\pi \int_0^1 \frac{1}{r^{2\sigma-1}} dr + 16\pi \int_1^\infty \frac{1}{r^{1+2\sigma}} dr < \infty,$$

also auch $0 < c_\mathbb{A} := c^{|\mathbb{A}|} < \infty$.

Summation über $\alpha \in \mathbb{A}^*$ führt zu

$$\sum_{\alpha \in \mathbb{A}^*} \int_{\mathbb{R}^{3|\mathbb{A}|}} \frac{\left\| \prod_{i \in \mathbb{A}} \Delta_i(h_i)(\partial_\alpha^\mathbb{A} u) \right\|_0^2}{\prod_{i \in \mathbb{A}} |h_i|^{3+2\sigma}} dh^\mathbb{A} = c_\mathbb{A} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \prod_{i \in \mathbb{A}} |\omega_i|^{2+2\sigma} |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega.$$

Summieren wir nun über $\mathbb{A} \subseteq \{1, \dots, N\}$, so können wir bis auf Konstanten den Ausdruck (2.1.4) nach oben und unten abschätzen durch

$$\int_{\mathbb{R}^{3N}} \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|^{2+2\sigma}) |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega,$$

wobei die jeweilige Konstante das Minimum beziehungsweise Maximum aller $c_{\mathbb{A}}$, $\mathbb{A} \subset \{1, \dots, N\}$ ist. Die Behauptung folgt schließlich aus Lemma 2.1.1. \square

Ersetzen wir in Satz 2.1.3 die Funktion u durch ∇u , so erhalten wir ganz analog entsprechend

Satz 2.1.4. *Es sei $0 < s < 1$. Dann ist auf \mathcal{D} die Halbnorm $|\cdot|_{\text{mix},s,1}$ äquivalent zu der durch*

$$\left(\sum_{\mathbb{A} \subset \{1, \dots, N\}} \int_{\mathbb{R}^{3|\mathbb{A}|}} \frac{\|\prod_{i \in \mathbb{A}} \Delta_i(h_i) \nabla u\|_0^2}{\prod_{i \in \mathbb{A}} |h_i|^{3+2s}} dh^{\mathbb{A}} \right)^{1/2} \quad (2.1.5)$$

definierten Norm.

Ist $1 < s < 2$, $s = 1 + \sigma$, $0 < \sigma < 1$, so ist die Halbnorm $|\cdot|_{\text{mix},s,1}$ auf \mathcal{D} äquivalent zu der durch

$$\left(\sum_{\mathbb{A} \subset \{1, \dots, N\}} \sum_{\alpha \in \mathbb{A}^*} \int_{\mathbb{R}^{3|\mathbb{A}|}} \frac{\|\prod_{i \in \mathbb{A}} \Delta_i(h_i) (\partial_{\alpha}^{\mathbb{A}} \nabla u)\|_0^2}{\prod_{i \in \mathbb{A}} |h_i|^{3+2\sigma}} dh^{\mathbb{A}} \right)^{1/2} \quad (2.1.6)$$

definierten Norm. Entsprechendes gilt für die Norm

$$\|\cdot\|_{\text{mix},s,1} = (\|\cdot\|_{\text{mix},s,0}^2 + |\cdot|_{\text{mix},s,1}^2)^{1/2}.$$

Wir wollen nun die Schar $H_{\text{mix}}^{s,\nu}$, $s \in \mathbb{R}$, genauer untersuchen. Zu diesem Zwecke betrachten wir für $\xi \in \mathbb{R}$ den durch

$$\mathcal{F}(\tilde{T}_{\xi} u)(\omega) := \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|^2)^{\xi/2} \hat{u}(\omega), \quad \omega \in \mathbb{R}^{3N},$$

für $u \in \mathcal{S}$ definierten Ausdruck. Für $s, r \in \mathbb{R}$, $r \geq s$, und $\nu = 0, 1$ definieren wir den Operator

$$T_{r,s} : H_{\text{mix}}^{r,\nu} \rightarrow H_{\text{mix}}^{s,\nu}$$

durch

$$T_{r,s} u := \tilde{T}_{r-s} u, \quad u \in \mathcal{D}.$$

Lemma 2.1.5. *Es seien $s, r \in \mathbb{R}$, $r \geq s$, und $\nu = 0, 1$ vorgegeben. Dann ist $T_{r,s} : H_{\text{mix}}^{r,\nu} \rightarrow H_{\text{mix}}^{s,\nu}$ ein wohldefinierter isometrischer Isomorphismus. Die Umkehrabbildung $T_{r,s}^{-1} : H_{\text{mix}}^{s,\nu} \rightarrow H_{\text{mix}}^{r,\nu}$ ist für $v \in \mathcal{S}$ gegeben durch*

$$T_{r,s}^{-1} v = \tilde{T}_{s-r} v.$$

Beweis. Es seien $s, r \in \mathbb{R}$, $r \geq s$, und $\nu = 0, 1$ vorgegeben. Es ist leicht einsichtig, daß $T_{r,s}$ auf \mathcal{D} wohldefiniert und wegen

$$\begin{aligned} \|\tilde{T}_{r-s}u\|_{\text{mix},s,\nu}^2 &= \int (1 + |\omega|^2)^\nu \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|^2)^s \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|^2)^{r-s} |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega \\ &= \|u\|_{\text{mix},r,\nu}^2 \end{aligned}$$

isometrisch ist, und damit auch $T_{r,s}$ als eindeutige Fortsetzung auf $H_{\text{mix}}^{r,\nu}$. Setzen wir nun $u := \tilde{T}_{s-r}v$ für $v \in \mathcal{S}$, so ist auch $u \in \mathcal{S}$ und $\|u\|_{\text{mix},r,\nu} = \|v\|_{\text{mix},s,\nu}$. Da auch \mathcal{S} dicht liegt in $H_{\text{mix}}^{s,\nu}$, folgt hieraus die Surjektivität von $T_{r,s}$ und die Gestalt von $T_{r,x}^{-1}$, somit die Behauptung. \square

Abschließend fassen wir noch einige grundlegende Eigenschaften der Räume $H_{\text{mix}}^{s,\nu}$ zusammen.

Lemma 2.1.6. *Es sei $s \in \mathbb{R}$ und $\nu = 0, 1$. Dann sind die Räume $H_{\text{mix}}^{s,\nu}$, versehen mit dem inneren Produkt*

$$(u, v)_{\text{mix},s,\nu} := \int_{\mathbb{R}^{3N}} \hat{u}(\omega) \overline{\hat{v}(\omega)} \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|^2)^s d\omega, \quad u, v \in \mathcal{D},$$

Hilbert-Räume.

Für $s \leq r$ gilt $\|\cdot\|_{\text{mix},s,\nu} \leq \|\cdot\|_{\text{mix},r,\nu}$ und $\|\cdot\|_{\text{mix},s,0} \leq \|\cdot\|_{\text{mix},s,1}$, also

$$H_{\text{mix}}^{r,\nu} \subset H_{\text{mix}}^{s,\nu} \quad \text{und} \quad H_{\text{mix}}^{s,1} \subset H_{\text{mix}}^{s,0}.$$

und insbesondere

$$H_{\text{mix}}^{0,0} = L^2 \quad \text{und} \quad H_{\text{mix}}^{0,1} = H^1.$$

Ist $s \geq 0$, so ist $H_{\text{mix}}^{-s,\nu}$ isometrisch isomorph zum Dualraum $(H_{\text{mix}}^{s,\nu})^*$ via der dualen Paarung $(\cdot, \cdot)_\nu$.

Beweis. Sofort aus der Definition ersichtlich sind die Einbettungseigenschaften sowie die Aussagen bezüglich der Räume $H_{\text{mix}}^{0,\nu}$. Aufgrund der in Lemma 2.1.5 gezeigten Eigenschaften der Operatoren $T_{r,s}$ sind alle Räume $H_{\text{mix}}^{s,\nu}$ (isometrisch) isomorph zu $H_{\text{mix}}^{0,\nu}$, also zum Hilbert-Raum L^2 beziehungsweise H^1 und damit selbst Hilbert-Räume. Fixieren wir $s \geq 0$, so gibt es aufgrund des Rieszschen Darstellungssatzes für jedes Funktional $\phi \in (H_{\text{mix}}^{s,\nu})^*$ eine Funktion $\tilde{u}_\phi \in H_{\text{mix}}^{s,\nu}$ mit $\phi = (\cdot, \tilde{u}_\phi)_{\text{mix},s,\nu}$ und $\|\phi\|_* = \|\tilde{u}_\phi\|_{\text{mix},s,\nu}$. Setzen wir nun $u_\phi := T_{s,-s}\tilde{u}_\phi$, so folgt $u_\phi \in H_{\text{mix}}^{-s,\nu}$, $\|u_\phi\|_{\text{mix},-s,\nu} = \|\phi\|_*$ und

$$\phi = (\cdot, \tilde{u}_\phi)_{\text{mix},s,\nu} = (\cdot, T_{-s,s}u_\phi)_{\text{mix},s,\nu} = (\cdot, u_\phi)_\nu,$$

welches schließlich die Behauptung impliziert. \square

Da für voll antisymmetrische Funktionen eine höhere Regularität zu erwarten ist, benötigen wir für deren Untersuchung die entsprechenden antisymmetrischen Pendanten der anisotropen Sobolev-Räume. Wir erinnern daran, daß eine Funktion $u \in \mathcal{D}$ *antisymmetrisch* ist, falls für alle Permutationen² $\pi \in \mathfrak{S}_N$

$$u(x_{\pi(1)}, \dots, x_{\pi(N)}) = \text{sgn}(\pi) u(x_1, \dots, x_N), \quad x \in \mathbb{R}^{3N}$$

gilt. Wir setzen

$$\mathcal{D}_a := \{u \in \mathcal{D} \mid u \text{ ist antisymmetrisch} \}$$

und definieren die antisymmetrischen Räume L_a^2 und H_a^1 als Vervollständigung von \mathcal{D}_a bezüglich der L^2 - beziehungsweise der H^1 -Norm. Ganz entsprechend seien weiterhin die Mixrräume $H_{\text{mix},a}^{s,\nu}$ als Vervollständigung von \mathcal{D}_a bezüglich $\|\cdot\|_{\text{mix},s,\nu}$ gegeben. Unmittelbar aus dieser Definition folgt, daß $H_{\text{mix},a}^{s,\nu}$ ein abgeschlossener Unterraum von $H_{\text{mix}}^{s,\nu}$ ist, $H_{\text{mix},a}^{s,\nu} \subset H_{\text{mix}}^{s,\nu}$, im allgemeinen ist diese Inklusion echt. Antisymmetrische Funktionen verschwinden entlang jeder Diagonalen

$$D_{ij} = \{x \in \mathbb{R}^{3N} \mid x_i = x_j\}, \quad i, j = 1, \dots, N, i \neq j.$$

Wir bemerken jedoch, daß auch für $u \in \mathcal{D}_a$ im allgemeinen gilt $\text{supp } u \cap D_{ij} \neq \emptyset$.

Da für eine antisymmetrische, glatte Funktion $u \in \mathcal{D}_a$ auch die Fouriertransformierte \hat{u} und damit die Funktion $\tilde{T}_\xi u$ antisymmetrisch ist für beliebige $\xi \in \mathbb{R}$, so erhalten wir wie im vorigen Lemma entsprechend

Lemma 2.1.7. *Es sei $s \in \mathbb{R}$ und $\nu = 0, 1$. Dann ist $H_{\text{mix},a}^{s,\nu}$, versehen mit dem inneren Produkt*

$$(u, v)_{\text{mix},s,\nu} := \int_{\mathbb{R}^{3N}} \hat{u}(\omega) \overline{\hat{v}(\omega)} \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|^2)^s d\omega, \quad u, v \in \mathcal{D}_a,$$

ein Hilbert-Raum. Für $s \leq r$ gilt

$$H_{\text{mix},a}^{r,\nu} \subset H_{\text{mix},a}^{s,\nu} \quad \text{und} \quad H_{\text{mix},a}^{s,1} \subset H_{\text{mix},a}^{s,0}.$$

Ist $s \geq 0$, so ist $H_{\text{mix},a}^{-s,\nu}$ isometrisch isomorph zum Dualraum $(H_{\text{mix},a}^{s,\nu})^*$.

Man beachte zum Beweis lediglich, daß hier $H_{\text{mix},a}^{0,0} = L_a^2$ beziehungsweise $H_{\text{mix},a}^{0,1} = H_a^1$ als abgeschlossene Unterräume von L^2 beziehungsweise H^1 selbst Hilbert-Räume sind.

²Mit \mathfrak{S}_N sei die Menge aller Permutationen π von N Elementen bezeichnet, mit $\text{sgn}(\pi)$ das Signum einer solchen Permutation.

2.2 Interpolation von anisotropen Sobolev-Räumen

Wir wollen zwischen den in den vorhergehenden Abschnitten definierten Mixräumen reell interpolieren und insbesondere zeigen, daß eine solche Interpolation zwischen den Räumen $H_{\text{mix}}^{s,\nu}$ (beziehungsweise $H_{\text{mix},a}^{s,\nu}$) wieder zu eben solchen Räumen führt, die Skalen ($H_{\text{mix}}^{s,\nu}$) und ($H_{\text{mix},a}^{s,\nu}$) also unter Interpolation abgeschlossen sind.

Für die allgemeinen Grundlagen der reellen Interpolation mittels K-Funktionalen verweisen wir auf [6, 9, 14, 15, 70, 75, 92, 96]. Da jedoch in der Literatur die Vorgehensweise und der Umfang sowie die Notation der Darstellung sehr uneinheitlich ist, sei des weiteren auf den Anhang verwiesen (Abschnitt A.3), in welchem wir versuchen, die wesentlichen Grundzüge der reellen Interpolationstheorie in einer einheitlichen, für unsere Zwecke angemessenen Form darzustellen.

Wie bereits in Lemma 2.1.6 bemerkt, ist $H_{\text{mix}}^{0,0} = L^2$ und $H_{\text{mix}}^{0,1} = H^1$ und es gilt für $\nu = 0, 1$ die Abschätzung

$$\|\cdot\|_{\text{mix},s,\nu} \leq \|\cdot\|_{\text{mix},r,\nu}, \quad \text{falls } s \leq r.$$

Insbesondere ist also $H_{\text{mix}}^{s,0} \hookrightarrow L^2$ und $H_{\text{mix}}^{s,1} \hookrightarrow H^1$ für $s \geq 0$, womit wir die Darstellung der Interpolationsnorm im Fall $Y \hookrightarrow X$ aus Abschnitt A.3 verwenden können.

Satz 2.2.1. *Es seien $\nu = 0, 1$, $s \geq 0$ und $0 < \theta < 1$. Dann gilt*

$$[H_{\text{mix}}^{0,\nu}, H_{\text{mix}}^{s,\nu}]_{\theta,2} = H_{\text{mix}}^{\theta s,\nu}$$

mit äquivalenten Normen.

Beweis. Es seien $\nu = 0, 1$, $s \geq 0$ und $0 < \theta < 1$ vorgegeben. Das entsprechende K-Funktional können wir dann als

$$K(u, t) = \inf_{v \in H_{\text{mix}}^{s,\nu}} (\|u - v\|_{\nu}^2 + t^2 \|v\|_{\text{mix},s,\nu}^2)^{1/2}, \quad 0 < t < 1, u \in H_{\text{mix}}^{0,\nu}$$

schreiben. Für festes $t \in (0, 1)$ und $u \in H_{\text{mix}}^{0,\nu}$ gilt

$$\begin{aligned} \|u - v\|_{\nu}^2 + t^2 \|v\|_{\text{mix},s,\nu}^2 &= \int (1 + |\omega|^2)^{\nu} |\hat{u}(\omega) - \hat{v}(\omega)|^2 d\omega \\ &\quad + t^2 \int (1 + |\omega|^2)^{\nu} \eta(\omega)^s |\hat{v}(\omega)|^2 d\omega \\ &= \int (1 + |\omega|^2)^{\nu} (|\hat{u}(\omega) - \hat{v}(\omega)|^2 + t^2 \eta(\omega)^s |\hat{v}(\omega)|^2) d\omega, \end{aligned} \tag{2.2.1}$$

wobei wir hier und im folgenden

$$\eta(\omega) := \prod_{i=1}^N (1 + |\omega|^2), \quad \omega \in \mathbb{R}^{3N},$$

schreiben. Wir konstruieren nun eine minimierende Funktion v punktweise. Hierzu betrachten wir für festes $\omega \in \mathbb{R}^{3N}$ die Funktion

$$f(z) := |\hat{u}(\omega) - z|^2 + t^2 \eta(\omega)^s |z|^2, \quad z \in \mathbb{C}.$$

Diese Funktion wird minimal bei

$$z_{min} = \frac{1}{1 + t^2 \eta(\omega)^s} \hat{u}(\omega) \quad (2.2.2)$$

und so setzen wir $\hat{v}_{u,t}(\omega) := z_{min}$. Somit folgt für $u \in H_{mix}^{0,\nu}$ und $0 < t < 1$:

$$\begin{aligned} \|v_{u,t}\|_{mix,s,\nu}^2 &= \int (1 + |\omega|^2)^\nu \eta(\omega)^s |\hat{v}_{u,t}(\omega)|^2 d\omega \\ &= \int (1 + |\omega|^2)^\nu \frac{\eta(\omega)^s}{(1 + t^2 \eta(\omega)^s)^2} |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega \\ &\leq \frac{1}{t^4} \int (1 + |\omega|^2)^\nu |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega < \infty, \end{aligned}$$

also $v_{u,t} \in H_{mix}^{s,\nu}$. Da v das Integral in (2.2.1) punktweise minimiert, also eine zulässige minimierende Funktion im K-Funktional ist, erhalten wir

$$\begin{aligned} K(u, t)^2 &= \inf_{v \in H_{mix}^{s,\nu}} (\|u - v\|_\nu^2 + t^2 \|v\|_{mix,s,\nu}^2) \\ &= \|u - v_{u,t}\|_\nu^2 + t^2 \|v_{u,t}\|_{mix,s,\nu}^2 \\ &= \int (1 + |\omega|^2)^\nu \left(\left(1 - \frac{1}{1 + t^2 \eta(\omega)^s}\right)^2 + t^2 \frac{\eta(\omega)^2}{(1 + t^2 \eta(\omega)^s)^2} \right) |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega \\ &= \int (1 + |\omega|^2)^\nu \frac{(t^2 \eta(\omega)^s)^2 + t^2 \eta(\omega)^s}{(1 + t^2 \eta(\omega)^s)^2} |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega \\ &= \int (1 + |\omega|^2)^\nu t^2 \frac{\eta(\omega)^s}{1 + t^2 \eta(\omega)^s} |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega \end{aligned}$$

und schließlich

$$\begin{aligned} \|u\|_{\theta,2}^2 &= \int_0^1 (t^{-\theta} K(u, t))^2 \frac{dt}{t} \\ &= \int_0^1 t^{-1-2\theta} \int (1 + |\omega|^2)^\nu t^2 \frac{\eta(\omega)^s}{1 + t^2 \eta(\omega)^s} |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega dt \\ &= \int (1 + |\omega|^2)^\nu |\hat{u}(\omega)|^2 \int_0^1 t^{1-2\theta} \frac{\eta(\omega)^s}{1 + t^2 \eta(\omega)^s} dt d\omega. \end{aligned}$$

Wir wollen zeigen, daß die Normen $\|\cdot\|_{\theta,2}$ und $\|\cdot\|_{\text{mix},\theta s,\nu}$ äquivalent sind, also von ω unabhängige Konstanten $c, C > 0$ finden mit

$$c \eta(\omega)^{\theta s} \leq \int_0^1 t^{1-2\theta} \frac{\eta(\omega)^s}{1+t^2 \eta(\omega)^s} dt \leq C \eta(\omega)^{\theta s}$$

oder äquivalent hierzu

$$c \leq \int_0^1 t^{1-2\theta} \frac{\eta(\omega)^{(1-\theta)s}}{1+t^2 \eta(\omega)^s} dt \leq C.$$

Via Substitution erhalten wir

$$\int_0^1 t^{1-2\theta} \frac{\eta(\omega)^{(1-\theta)s}}{1+t^2 \eta(\omega)^s} dt = \frac{1}{2} \int_0^{\eta(\omega)^s} \frac{1}{t^\theta(1+t)} dt$$

und hierfür gilt

$$0 < c := \frac{1}{2\theta} \left(1 - \frac{1}{2^\theta}\right) \leq \frac{1}{2} \int_0^{\eta(\omega)^s} \frac{1}{t^\theta(1+t)} dt \leq \frac{\pi}{2 \sin(\theta\pi)} =: C < \infty.$$

Hier verwenden wir das uneigentliche Integral

$$\int_0^\infty t^{-a}(1-t)^{-1} dt = \pi \sin(a\pi)^{-1}$$

für $0 < a < 1$ (siehe beispielsweise [12]). Da per definitionem \mathcal{D} dicht liegt sowohl in $H_{\text{mix}}^{0,\nu}$, als auch in $H_{\text{mix}}^{s,\nu}$, folgt die Behauptung aus der soeben gezeigten Normäquivalenz. \square

Wie üblich können wir die Beschränkung auf $H_{\text{mix}}^{0,\nu}$ in Satz 2.2.1 mit Hilfe des Reiterationssatzes A.3.8 aufheben und erhalten

Satz 2.2.2. *Es seien $0 \leq s \leq r$, $\nu = 0, 1$ und $0 < \theta < 1$. Dann gilt*

$$[H_{\text{mix}}^{s,\nu}, H_{\text{mix}}^{r,\nu}]_{\theta,2} = H_{\text{mix}}^{s+\theta(r-s),\nu}$$

mit äquivalenten Normen.

Da für $s \geq 0$ auch

$$\|\cdot\|_{\text{mix},-s,\nu} \leq \|\cdot\|_{\text{mix},0,\nu} = \|\cdot\|_\nu,$$

also insbesondere $L^2 \hookrightarrow H_{\text{mix}}^{-s,0}$ und $H^1 \hookrightarrow H_{\text{mix}}^{-s,1}$ gilt, können wir für $0 < \theta < 1$ ganz analog zu Satz 2.2.1

$$[H_{\text{mix}}^{-s,\nu}, H_{\text{mix}}^{0,\nu}]_{\theta,2} = H_{\text{mix}}^{-s(1-\theta),\nu}$$

mit äquivalenten Normen zeigen und damit dann

Satz 2.2.3. *Es seien $0 \leq s \leq r$, $\nu = 0, 1$ und $0 < \theta < 1$. Dann gilt*

$$[H_{\text{mix}}^{-r,\nu}, H_{\text{mix}}^{-s,\nu}]_{\theta,2} = H_{\text{mix}}^{-r+\theta(r-s),\nu}$$

mit äquivalenten Normen.

Dies können wir über die Identifizierung der Räume $H_{\text{mix}}^{-s,\nu}$ mit den Dualräumen $(H_{\text{mix}}^{s,\nu})^*$ aus Lemma 2.1.6 auch aus dem Dualitätssatz A.3.9 gewinnen. Die Räume $H_{\text{mix}}^{s,\nu}$, $s \in \mathbb{R}$, bilden folglich eine bezüglich reeller Interpolation abgeschlossene Schar. Desgleichen gilt auch für die antisymmetrischen Pendanten:

Satz 2.2.4. *Es seien $0 \leq s \leq r$, $\nu = 0, 1$ und $0 < \theta < 1$. Dann gelten*

$$[H_{\text{mix},a}^{s,\nu}, H_{\text{mix},a}^{r,\nu}]_{\theta,2} = H_{\text{mix},a}^{s+\theta(r-s),\nu}$$

und

$$[H_{\text{mix},a}^{-r,\nu}, H_{\text{mix},a}^{-s,\nu}]_{\theta,2} = H_{\text{mix},a}^{-r+\theta(r-s),\nu}$$

jeweils mit äquivalenten Normen.

Beweis. Der Beweis verläuft ganz so wie für den allgemeineren Fall. Jedoch ist hier bei unserer Konstruktion einer minimierenden Funktion $v_{u,t}$ (siehe (2.2.2)) die Antisymmetrie zu beachten. In der Tat ist mit $u \in \mathcal{D}_a$ auch \hat{u} antisymmetrisch. Da die Funktion $\omega \mapsto \eta(\omega)$ symmetrisch ist, so ist $\hat{v}_{u,t}$ und damit auch $v_{u,t}$ antisymmetrisch und wie oben folgt, daß $v_{u,t} \in H_{\text{mix},a}^{s,\nu}$ eine zulässige minimierende Funktion ist, welches dann schließlich wieder die Behauptung impliziert. \square

2.3 Ein Dichtheitsresultat für anisotrope Sobolev-Räume

Das Coulomb-Potential V des Hamilton-Operators ist singulär entlang der Diagonalen

$$D_{ij} = \{x \in \mathbb{R}^{3N} \mid x_i = x_j\}, \quad i, j = 1, \dots, N, i \neq j,$$

und an den Kernlokalitäten $a_1, \dots, a_K \in \mathbb{R}^3$, das heißt auf den Mengen

$$D_{a_k} := \{x \in \mathbb{R}^{3N} \mid x_i = a_k \text{ für ein } i = 1, \dots, N\}, \quad k = 1, \dots, K.$$

Aus diesem Grund wollen wir im folgenden Räume von Funktionen untersuchen, deren Träger von diesen Singularitäten wegbeschränkt sind. Auf diesen Räumen hat der Potentialoperator deshalb wesentlich bessere Eigenschaften, da das Potential auf den Trägern solcher Funktionen glatt ist. Dies kann für die Untersuchung beispielsweise der Regularität der elektronischen Schrödinger-Gleichung von Nutzen sein.

Es sei

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_D &:= \{u \in \mathcal{D} \mid (\text{supp } u) \cap D_{ij} = \emptyset \text{ für alle } i, j = 1, \dots, N, i \neq j\}, \\ \mathcal{D}_{\bar{a}} &:= \{u \in \mathcal{D} \mid (\text{supp } u) \cap D_{a_k} = \emptyset \text{ für alle } k = 1, \dots, K\}\end{aligned}\quad (2.3.1)$$

und

$$\mathcal{D}_{D, \bar{a}} := \mathcal{D}_D \cap \mathcal{D}_{\bar{a}}. \quad (2.3.2)$$

Die entsprechenden antisymmetrischen Pendanten seien mit $\mathcal{D}_{a,D}$, $\mathcal{D}_{a,\bar{a}}$ und $\mathcal{D}_{a,D,\bar{a}}$ bezeichnet. Schließen wir $\mathcal{D}_{D,\bar{a}}$ (beziehungsweise $\mathcal{D}_{a,D,\bar{a}}$) bezüglich der Mixnormen $\|\cdot\|_{\text{mix},s,\nu}$ ab, so erhalten wir die Räume

$$\begin{aligned}H_{\text{mix},D,\bar{a}}^{s,\nu} &:= \text{clos}_{\|\cdot\|_{\text{mix},s,\nu}} \mathcal{D}_{D,\bar{a}}, \\ H_{\text{mix},a,D,\bar{a}}^{s,\nu} &:= \text{clos}_{\|\cdot\|_{\text{mix},s,\nu}} \mathcal{D}_{a,D,\bar{a}},\end{aligned}\quad s \in \mathbb{R}, \nu = 0, 1.$$

Letztere sind somit (abgeschlossene) Unterräume von $H_{\text{mix},a}^{s,\nu}$, erstere von $H_{\text{mix}}^{s,\nu}$,

$$H_{\text{mix},D,\bar{a}}^{s,\nu} \subset H_{\text{mix}}^{s,\nu} \quad \text{und} \quad H_{\text{mix},a,D,\bar{a}}^{s,\nu} \subset H_{\text{mix},a}^{s,\nu},$$

und als solche wieder Hilbert-Räume. Im allgemeinen sind dies echte Unterräume. Wir werden nun die – in gewisser Weise zunächst erstaunliche – Aussage zeigen, daß dies jedoch für hinreichend kleine $s > 0$ und $\nu = 0$ nicht der Fall ist!

Lemma 2.3.1. *Es ist \mathcal{D}_D dicht in \mathcal{D} bezüglich der Norm $\|\cdot\|_{\text{mix},s,0}$ für $0 < s < 3/4$. Im antisymmetrischen Fall ist $\mathcal{D}_{a,D}$ dicht in \mathcal{D}_a bezüglich der Norm $\|\cdot\|_{\text{mix},s,0}$ für $0 < s < 5/4$.*

Beweis. Wir beweisen zunächst den antisymmetrischen Fall, welcher wegen möglicher $s > 1$ deutlich aufwändiger ist. Im Anschluss gehen wir kurz auf die Unterschiede im Beweis des ersten Falles ein.

Es reicht, die Behauptung für $1 < s < 5/4$ zu zeigen, aufgrund $\|\cdot\|_{\text{mix},r,0} \leq \|\cdot\|_{\text{mix},s,0}$ für $r \leq s$ folgt dann auch der allgemeine Fall. Sei also $s = 1 + \sigma$, $0 < \sigma < 1/4$. Nach Satz 2.1.3 ist $\|\cdot\|_{\text{mix},s,0}$ dann äquivalent zur durch

$$\left(\sum_{\mathbb{A} \subseteq \{1, \dots, N\}} \sum_{\alpha \in \mathbb{A}^*} \int_{\mathbb{R}^{3|\mathbb{A}|}} \frac{\|\prod_{i \in \mathbb{A}} \Delta_i(h_i) (\partial_\alpha^\mathbb{A} u)\|_0^2}{\prod_{i \in \mathbb{A}} |h_i|^{3+2\sigma}} dh^\mathbb{A} \right)^{1/2}. \quad (2.3.3)$$

definierten Norm. Es sei nun $u \in \mathcal{D}$ beliebig, so daß

$$u(x) = 0 \quad \text{für } x \in D_{ij}, i, j = 1, \dots, N, i \neq j. \quad (2.3.4)$$

Wie bereits bemerkt, erfüllt insbesondere jedes $u \in \mathcal{D}_a$ diese Bedingung. Seien $i_0, j_0 \in \{1, \dots, N\}$, $i_0 \neq j_0$. Wir zeigen nun zunächst, daß es eine Folge $(u_n) \subset \mathcal{D}$ gibt mit

$$\text{supp } (u_n) \cap D_{i_0 j_0} = \emptyset, \quad u_n(x) = 0 \text{ falls } u(x) = 0 \text{ und } \|u - u_n\|_{\text{mix},s,0} \rightarrow 0. \quad (2.3.5)$$

Indem wir iterativ alle möglichen Paare $i_0 \neq j_0$ durchlaufen, können wir so eine Folge $(v_n) \subset \mathcal{D}_D$ konstruieren, welche bezüglich $\|\cdot\|_{\text{mix},s,0}$ gegen u konvergiert. Beginnen wir mit einem antisymmetrischen $u \in \mathcal{D}_a$, so wird (v_n) nach unserer Konstruktion im allgemeinen jedoch nicht antisymmetrisch sein. Wir setzen $\tilde{v}_n := \mathcal{A}v_n \in \mathcal{D}_{a,D}$, wobei \mathcal{A} der Antisymmetrisierungsoperator

$$(\mathcal{A}u)(x) := \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\pi) u(x_{\pi(1)}, \dots, x_{\pi(N)}), \quad x \in \mathbb{R}^{3N}, \quad u \in \mathcal{D},$$

ist. Dieser definiert eine Orthogonalprojektion in $H_{\text{mix}}^{s,0}$ und somit folgt

$$\|u - \tilde{v}_n\|_{\text{mix},s,0} = \|\mathcal{A}(u - v_n)\|_{\text{mix},s,0} \leq \|u - v_n\|_{\text{mix},s,0},$$

woraus schließlich die Behauptung folgt.

Zu zeigen bleibt also (2.3.5), wobei wir ohne Beschränkung $i_0 = 1$ und $j_0 = 2$ annehmen können. Hierzu wählen wir eine glatte Abschneidefunktion $\tilde{w} : [0, \infty) \rightarrow [0, 1]$ mit

$$\tilde{w}(r) := \begin{cases} 0, & \text{falls } r < 1/2 \\ 1, & \text{falls } r > 1 \end{cases}$$

und setzen

$$u_n : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{R}, \quad u_n(x) := u(x) \tilde{w}(n|x_1 - x_2|), \quad x \in \mathbb{R}^{3N}.$$

Dann ist u_n glatt und es gilt $u_n(x) = 0$, falls $|x_1 - x_2| < 1/2n$. Weiterhin ist $u_n(x) = 0$, falls $u(x) = 0$ ist, die Folge (u_n) erfüllt also (2.3.5), falls $\|u - u_n\|_{\text{mix},s,0} \rightarrow 0$. Wir schreiben $w_n : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{R}$, $w_n(x) = 1 - \tilde{w}(n|x_1 - x_2|)$, also $u - u_n = uw_n$ und zeigen $\|uw_n\|_{\text{mix},s,0} \rightarrow 0$ in der äquivalenten Norm (2.3.3).

Fixieren wir in (2.3.3) ein $\mathbb{A} \in \{1, \dots, N\}$ und $\alpha \in \mathbb{A}^*$, so bleibt

$$\int_{\mathbb{R}^{3|\mathbb{A}|}} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \frac{|\prod_{i \in \mathbb{A}} \Delta_i(h_i) (\partial_\alpha^{\mathbb{A}}(uw_n))(x)|^2}{\prod_{i \in \mathbb{A}} |h_i|^{3+2\sigma}} dx dh^{\mathbb{A}} \quad (2.3.6)$$

abzuschätzen. Die $|\mathbb{A}|$ -vielen Integrationen über \mathbb{R}^3 zerlegen wir disjunkt in solche über $B(0, 1)$ und $\mathbb{R}^3 \setminus B(0, 1)$, (2.3.6) wird dann zu

$$\sum_{\mathbb{B} \subseteq \mathbb{A}} \int_{(\mathbb{R}^3 \setminus B(0,1))^{|\mathbb{A}|-|\mathbb{B}|}} \frac{1}{\prod_{i \in \mathbb{A} \setminus \mathbb{B}} |h_i|^{3+2\sigma}} \int_{B(0,1)^{|\mathbb{B}|}} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \frac{\left| \prod_{i \in \mathbb{A} \setminus \mathbb{B}} \Delta_i(h_i) (\prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i) (\partial_\alpha^{\mathbb{A}}(u w_n)))(x) \right|^2}{\prod_{i \in \mathbb{B}} |h_i|^{3+2\sigma}} dx dh^{\mathbb{B}} dh^{\mathbb{A} \setminus \mathbb{B}}. \quad (2.3.7)$$

Nun gilt aber stets

$$\int_{\mathbb{R}^3} |(\Delta(h)f)(x)|^2 dx \leq 2 \int_{\mathbb{R}^3} |f(x+h)|^2 dx + 2 \int_{\mathbb{R}^3} |f(x)|^2 dx = 4 \int_{\mathbb{R}^3} |f(x)|^2 dx \quad (2.3.8)$$

und da die Funktion $h \mapsto |h|^{-3-2\sigma}$ für jedes $\sigma > 0$ auf $\mathbb{R}^3 \setminus B(0,1)$ integrierbar ist, so können wir (2.3.7) bis auf eine Konstante abschätzen gegen

$$\sum_{\mathbb{B} \subset \mathbb{A}} \int_{B(0,1)^{|\mathbb{B}|}} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \frac{\left| \left(\prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i) (\partial_\alpha^{\mathbb{A}}(u w_n)) \right) (x) \right|^2}{\prod_{i \in \mathbb{B}} |h_i|^{3+2\sigma}} dx dh^{\mathbb{B}}. \quad (2.3.9)$$

Wir halten also weiter eine beliebige Indexmenge $\mathbb{B} \subset \mathbb{A}$ fest. Dann konvergiert $\prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i) (\partial_\alpha^{\mathbb{A}}(u w_n))$ und damit der Integrand fast überall gegen Null. Da $\text{supp}(u w_n) \subseteq \text{supp}(u)$ beschränkt ist und da $|h_i| \leq 1$ ist für alle $i \in \mathbb{B}$, verschwindet für genügend große $|x|$

$$\prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i) (\partial_\alpha^{\mathbb{A}}(u w_n))(x) = \sum_{\mathbb{C} \subseteq \mathbb{B}} (-1)^{|\mathbb{B}| - |\mathbb{C}|} \left(\partial_\alpha^{\mathbb{A}}(u w_n) \right) \left(x + \sum_{i \in \mathbb{C}} h_i e_i \right) \quad (2.3.10)$$

und die Integration bezüglich x kann auf eine hinreichend große Kugel $K \subset \mathbb{R}^{3N}$ beschränkt werden. Somit reicht es nach dem Lebesgueschen Konvergenzsatz aus, eine auf $B(0,1)^{|\mathbb{B}|} \times K$ integrierbare und von n unabhängige Majorante von

$$(h, x) \mapsto \frac{\left| \left(\prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i) (\partial_\alpha^{\mathbb{A}}(u w_n)) \right) (x) \right|^2}{\prod_{i \in \mathbb{B}} |h_i|^{3+2\sigma}} \quad (2.3.11)$$

zu finden. Dies werden wir im folgenden zeigen.

Wir haben die Fälle zu unterscheiden, welche der Indizes 1 und 2 jeweils in \mathbb{A} oder $\mathbb{B} \subset \mathbb{A}$ enthalten sind. Wir beginnen mit dem einfachsten Fall, es seien $1, 2 \notin \mathbb{A}$, insbesondere also auch $1, 2 \notin \mathbb{B}$. Da w_n nur von x_1 und x_2 abhängt ist dann

$$\prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i) (\partial_\alpha^{\mathbb{A}}(u w_n)) = w_n \prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i) (\partial_\alpha^{\mathbb{A}} u).$$

Ganz allgemein gilt nach dem Taylorschen Satz für genügend glatte Funktionen $f : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{R}$

$$(\Delta_i(h_i)f)(x) = f(x + h_i e_i) - f(x) = \sum_{l=1}^3 h_{i,l} \int_0^1 \frac{\partial}{\partial x_{i,l}} f(x + t h_i e_i) dt,$$

woraus hier iterativ

$$\left(\prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i) (\partial_\alpha^{\mathbb{A}} u) \right) (x) = \sum_{\beta \in \mathbb{B}^*} \left(\prod_{i \in \mathbb{B}} h_{i,\beta(i)} \right) \int_{[0,1]^{|\mathbb{B}|}} (\partial_\beta^{\mathbb{B}} \partial_\alpha^{\mathbb{A}} u)(x + \sum_{i \in \mathbb{B}} t_i h_i) dt^{\mathbb{B}} \quad (2.3.12)$$

folgt, also

$$\left| \left(\prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i)(\partial_\alpha^{\mathbb{A}} u) \right)(x) \right| \leq \sum_{\beta \in \mathbb{B}^*} \left(\prod_{i \in \mathbb{B}} |h_i| \right) \int_{[0,1]^{|\mathbb{B}|}} |\partial_\beta^{\mathbb{B}} \partial_\alpha^{\mathbb{A}} u(x + \sum_{i \in \mathbb{B}} t_i h_i)| dt^{\mathbb{B}}. \quad (2.3.13)$$

Da insbesondere $u \in \mathcal{D}$, so gibt es eine Konstante C mit $\|\partial_\beta^{\mathbb{B}} \partial_\alpha^{\mathbb{A}} u\|_\infty \leq C$ für alle $\mathbb{A}, \mathbb{B} \subset \{1, \dots, N\}$, $\alpha \in \mathbb{A}^*$, $\beta \in \mathbb{B}^*$. Weiterhin ist $\|w_n\|_\infty \leq 1$ und wir können bis auf eine Konstante abschätzen

$$|w_n(x) \left(\prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i)(\partial_\alpha^{\mathbb{A}} u) \right)(x)| \lesssim \prod_{i \in \mathbb{B}} |h_i|, \quad x \in \mathbb{R}^{3N},$$

und somit

$$\frac{\left| \left(\prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i)(\partial_\alpha^{\mathbb{A}} (u w_n)) \right)(x) \right|^2}{\prod_{i \in \mathbb{B}} |h_i|^{3+2\sigma}} \lesssim \frac{1}{\prod_{i \in \mathbb{B}} |h_i|^{1+2\sigma}}.$$

Die rechte Seite definiert nun eine in diesem Fall sogar für jedes $\sigma < 1$ über $K \times B(0,1)^{|\mathbb{B}|}$ integrierbare Majorante.

Betrachten wir nun den aufwändigsten Fall, nämlich $1, 2 \in \mathbb{B} \subset \mathbb{A}$. Dann ist

$$\prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i)(\partial_\alpha^{\mathbb{A}} (u w_n)) = \Delta_1(h_1) \Delta_2(h_2) \left(\frac{\partial^2}{\partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,\bar{k}}} (w_n \tilde{u}) \right),$$

wobei wir abkürzend $\bar{l} = \alpha(1)$, $\bar{k} = \alpha(2)$ und

$$\tilde{u} := \prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1,2\}} \Delta_i(h_i)(\partial_\alpha^{\mathbb{A} \setminus \{1,2\}} u)$$

schreiben. Zum einen können wir nun die rechte Seite wieder mit Hilfe des Satzes von Taylor schreiben als

$$\sum_{l=1}^3 \sum_{k=1}^3 h_{1,l} h_{2,k} \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial^4 (w_n \tilde{u})}{\partial x_{1,l} \partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,k} \partial x_{2,\bar{k}}} (x + t_1 h_1 e_1 + t_2 h_2 e_2) dt_1 dt_2,$$

also für $x \in \mathbb{R}^{3N}$:

$$\begin{aligned} & \left| \prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i)(\partial_\alpha^{\mathbb{A}} (u w_n))(x) \right| \\ & \leq \sum_{l=1}^3 \sum_{k=1}^3 |h_{1,l}| |h_{2,k}| \int_0^1 \int_0^1 \left| \frac{\partial^4 (w_n \tilde{u})}{\partial x_{1,l} \partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,k} \partial x_{2,\bar{k}}} (x + t_1 h_1 e_1 + t_2 h_2 e_2) \right| dt_1 dt_2. \end{aligned}$$

Der Integrand zerfällt in 16 Teile:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^4(w_n \tilde{u})}{\partial x_{1,l} \partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,k} \partial x_{2,\bar{k}}} &= \frac{\partial^4 w_n}{\partial x_{1,l} \partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,k} \partial x_{2,\bar{k}}} \tilde{u} \\ &+ \frac{\partial^3 w_n}{\partial x_{1,l} \partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,k}} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_{2,\bar{k}}} + \cdots + w_n \frac{\partial^4 \tilde{u}}{\partial x_{1,l} \partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,k} \partial x_{2,\bar{k}}}. \end{aligned}$$

Wie im ersten Teil folgt

$$\left\| \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_{2,\bar{k}}} \right\|_{\infty}, \dots, \left\| \frac{\partial^4 \tilde{u}}{\partial x_{1,l} \partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,k} \partial x_{2,\bar{k}}} \right\|_{\infty} \lesssim \prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1,2\}} |h_i|.$$

Aus Lemma A.2.2 folgern wir, daß die auftretenden Ableitungen von w_n der Ordnung $m \leq 4$ abgeschätzt werden können gegen n^m , also im ärgsten Fall gegen n^4 . Dieser Fall tritt genau einmal auf. Im entsprechenden Term wird nun allerdings \tilde{u} nicht abgeleitet. Da für beliebige $y \in \mathbb{R}^{3N}$ mit $y_1 = y_2$ aufgrund der Antisymmetrie hier $u(y) = 0$ gilt, so folgt, da die Differenzenoperatoren nicht auf die ersten beiden Koordinaten wirken, auch

$$\tilde{u}(y) = \left(\prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1,2\}} \Delta_i(h_i) (\partial_{\alpha}^{\mathbb{A} \setminus \{1,2\}} u) \right)(y) = 0, \quad \text{falls } y_1 = y_2.$$

Da \tilde{u} glatt ist, folgt hieraus mit dem Taylorschen Satz

$$|\tilde{u}(y)| \lesssim |y_1 - y_2| \prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1,2\}} |h_i|.$$

Nun ist

$$\frac{\partial^4 w_n}{\partial x_{1,l} \partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,k} \partial x_{2,\bar{k}}}(y) = 0, \quad \text{falls } |y_1 - y_2| \leq 1/2n \text{ oder } |y_1 - y_2| \geq 1/n,$$

also können wir $|y_1 - y_2| \leq 1/n$ auf dem Träger der Ableitung von w_n abschätzen. Somit lassen sich also alle 16 auftretenden Terme bis auf Konstanten beschränken durch

$$n^3 \prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1,2\}} |h_i|$$

und wir erhalten insgesamt

$$\left| \prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i) \partial_{\alpha}^{\mathbb{A}} (u w_n)(x) \right| \lesssim n^3 \prod_{i \in \mathbb{B}} |h_i|, \quad x \in \mathbb{R}^{3N}. \quad (2.3.14)$$

Für den gleichen Term zeigen wir nun noch eine andere Abschätzung: Zunächst gilt

$$\begin{aligned} \left| \prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i) (\partial_\alpha^{\mathbb{A}}(u w_n))(x) \right| &= \left| \Delta_1(h_1) \Delta_2(h_2) \left(\frac{\partial^2(w_n \tilde{u})}{\partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,\bar{k}}} \right)(x) \right| \\ &\leq \left| \frac{\partial^2(w_n \tilde{u})}{\partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,\bar{k}}} (x + h_1 e_1 + h_2 e_2) \right| + \left| \frac{\partial^2(w_n \tilde{u})}{\partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,\bar{k}}} (x + h_1 e_1) \right| \\ &\quad + \left| \frac{\partial^2(w_n \tilde{u})}{\partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,\bar{k}}} (x + h_2 e_2) \right| + \left| \frac{\partial^2(w_n \tilde{u})}{\partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,\bar{k}}} (x) \right|. \end{aligned}$$

Nun ist

$$\frac{\partial^2(w_n \tilde{u})}{\partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,\bar{k}}} = \frac{\partial^2 w_n}{\partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,\bar{k}}} \tilde{u} + \frac{\partial w_n}{\partial x_{1,\bar{l}}} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_{2,\bar{k}}} + \frac{\partial w_n}{\partial x_{2,\bar{k}}} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_{1,\bar{l}}} + w_n \frac{\partial^2(\tilde{u})}{\partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,\bar{k}}}.$$

Wir schätzen für beliebige $y \in \mathbb{R}^{3N}$ wieder

$$\left| \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_{2,\bar{k}}}(y) \right|, \left| \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_{1,\bar{l}}}(y) \right|, \left| \frac{\partial^2(\tilde{u})}{\partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,\bar{k}}}(y) \right| \lesssim \prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1,2\}} |h_i|$$

und die Ableitungen von w_n der Ordnung $m \leq 2$ durch n^m . Wie oben können wir nun im Fall $m = 2$

$$|\tilde{u}(y)| \leq C |y_1 - y_2| \prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1,2\}} |h_i| \lesssim \frac{1}{n} \prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1,2\}} |h_i|$$

auf dem Träger der Ableitung von w_n verwenden und erhalten somit

$$\left| \frac{\partial^2(w_n \tilde{u})}{\partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,\bar{k}}}(y) \right| \lesssim n \prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1,2\}} |h_i|$$

für beliebige $y \in \mathbb{R}^{3N}$. Es sei weiterhin

$$D_{12}^n := \{y \in \mathbb{R}^{3N} \mid |y_1 - y_2| \leq 1/n\}.$$

Auf $\mathbb{R}^{3N} \setminus D_{12}^n$ verschwindet w_n und damit auch alle Ableitungen von w_n und somit gilt

$$\left| \frac{\partial^2(w_n \tilde{u})}{\partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,\bar{k}}}(y) \right| = 0 \quad \text{falls } y \notin D_{12}^n, \quad \text{also} \quad \left| \frac{\partial^2(w_n \tilde{u})}{\partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,\bar{k}}}(y) \right| = \left| \frac{\partial^2(w_n \tilde{u})}{\partial x_{1,\bar{l}} \partial x_{2,\bar{k}}} \mathbb{1}_{D_{12}^n} \right|.$$

Wir erhalten

$$\begin{aligned} \left| \prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i)(\partial_\alpha^{\mathbb{A}}(u w_n))(x) \right| &\lesssim n \prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1,2\}} |h_i| \left(\mathbb{1}_{D_{12}^n}(x + h_1 e_1 + h_2 e_2) + \right. \\ &\quad \left. + \mathbb{1}_{D_{12}^n}(x + h_1 e_1) + \mathbb{1}_{D_{12}^n}(x + h_2 e_2) + \mathbb{1}_{D_{12}^n}(x) \right). \end{aligned} \quad (2.3.15)$$

Mit einem noch zu bestimmenden $\delta \in (1/2, 1)$ zerlegen wir

$$\left| \prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i)(\partial_\alpha^{\mathbb{A}}(u w_n))(x) \right|^2 = |\dots|^{2-2\delta} |\dots|^{2\delta}.$$

Den ersten Faktor schätzen wir nun mit (2.3.14) ab, den zweiten mit Hilfe von (2.3.15). Da $2\delta > 1$ gilt $(a + b + c + d)^{2\delta} \leq 2^{2\delta-1}(a^{2\delta} + b^{2\delta} + c^{2\delta} + d^{2\delta})$ für nichtnegative a, b, c, d und wir schließen auf

$$\begin{aligned} &\left| \prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i)(\partial_\alpha^{\mathbb{A}}(u w_n))(x) \right|^2 \\ &\lesssim n^{6-6\delta} \prod_{i \in \mathbb{B}} |h_i|^{2-2\delta} n^{2\delta} \prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1,2\}} |h_i|^{2\delta} \\ &\quad \left(\mathbb{1}_{D_{12}^n}(x + h_1 e_1 + h_2 e_2) + \dots + \mathbb{1}_{D_{12}^n}(x) \right)^{2\delta} \\ &\lesssim n^{6-4\delta} \prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1,2\}} |h_i|^2 |h_1|^{2-2\delta} |h_2|^{2-2\delta} \\ &\quad \left(\mathbb{1}_{D_{12}^n}(x + h_1 e_1 + h_2 e_2) + \dots + \mathbb{1}_{D_{12}^n}(x) \right). \end{aligned}$$

Nun kann n auf D_{12}^n abgeschätzt werden gegen $1/|y_1 - y_2|$, also insbesondere

$$n^{6-4\delta} \mathbb{1}_{D_{12}^n}(y) \leq \frac{1}{|y_1 - y_2|^{6-4\delta}}$$

unabhängig von n . Damit ist

$$\begin{aligned} g(h, x) &:= \frac{\prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1,2\}} |h_i|^2 |h_1|^{2-2\delta} |h_2|^{2-2\delta}}{\prod_{i \in \mathbb{B}} |h_i|^{3+2\sigma}} \\ &\quad \left(\frac{1}{|x_1 + h_1 - x_2 - h_2|^{6-4\delta}} + \dots + \frac{1}{|x_1 - x_2|^{6-4\delta}} \right) \\ &= \frac{1}{\prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1,2\}} |h_i|^{1+2\sigma} |h_1|^{1+2(\sigma+\delta)} |h_2|^{1+2(\sigma+\delta)}} \\ &\quad \left(\frac{1}{|x_1 + h_1 - x_2 - h_2|^{6-4\delta}} + \dots + \frac{1}{|x_1 - x_2|^{6-4\delta}} \right) \end{aligned}$$

eine von n unabhängige Majorante von (2.3.11). Da $\sigma < 1/4$, so ist g über $B(0,1)^{|\mathbb{B}|} \times K$ integrierbar: In der Tat können wir in diesem Fall δ derart wählen, daß $3/4 < \delta < 1 - \sigma$, also $1 + 2(\sigma + \delta) < 3$. Da sogar für beliebige $\sigma < 1$ die Abschätzung $1 + 2\sigma < 3$ gilt, so sind alle Terme

$$\frac{1}{|h_i|^{1+2\delta}}, \quad i \neq 1, 2, \quad \text{und} \quad \frac{1}{|h_1|^{1+2(\sigma+\delta)}}, \quad \frac{1}{|h_2|^{1+2(\sigma+\delta)}}$$

über $B(0,1)$ integrierbar. Für die Integration bezüglich x bemerken wir, daß für $x \in K$ und $h_1, h_2 \in B(0,1)$ die Relativkoordinate $y := x_1 + h_1 - x_2 - h_2$ beschränkt bleibt, $y \in B(0,R) \subset \mathbb{R}^3$. Mit einer geeigneten, beschränkten Menge $K' \subset \mathbb{R}^{3(N-1)}$ folgt

$$\begin{aligned} \int_K \frac{1}{|x_1 + h_1 - x_2 - h_2|^{6-4\delta}} dx &\leq \int_{K'} \int_{B(0,R)} \frac{1}{|y|^{6-4\delta}} dy dy' \\ &\leq C \int_0^R \frac{1}{r^{4-4\delta}} dr < \infty, \end{aligned}$$

da $4 - 4\delta < 1$ wegen $\delta > 3/4$ gilt. Für die anderen Summanden der Majoranten schließen wir selbstverständlich ganz analog.

Wir haben bislang lediglich die Grenzfälle behandelt, in denen entweder keiner der Indizes 1 und 2 in \mathbb{A} enthalten ist oder beide in $\mathbb{B} \subset \mathbb{A}$ enthalten sind. Der letztgenannte Fall stellt in der Tat den die möglichen Werte von s bestimmenden Teil dar: Um die Integrierbarkeit der Terme $|h_1|^{-1+2(\sigma+\delta)}$ um den Ursprung in \mathbb{R}^3 zu gewährleisten, muss nämlich stets $\delta < 1 - \sigma$ gelten. Für $\sigma \geq 1/4$ folgt also $\delta \leq 3/4$. Für diese Werte ist aber $|y|^{-(6-4\delta)}$ in \mathbb{R}^3 nicht mehr in einer Umgebung des Ursprungs integrierbar.

Die anderen Fälle lassen sich genauso behandeln wie der letzte. Da dann aber nicht beide Indizes in \mathbb{B} enthalten sind, sind die auftretenden Ableitungen von uw_n von kleinerer Ordnung. Dies wiederum führt zu Termen $|y|^{-\gamma}$ mit $\gamma < 4 - 4\delta$, in diesen Fällen können demnach höhere Werte von σ zugelassen werden, der geneigte Leser wird ohne Mühe in der Lage sein, diese Fälle nachzuvollziehen. Somit schließen wir den Beweis der Behauptung des Lemmas im antisymmetrischen Fall.

Der nichtantisymmetrische Fall ist deutlich leichter, der Beweis verläuft prinzipiell nach demselben Schema wie der soeben beschlossene. Wir wollen allerdings auf die zwei wesentlichen Unterschiede verweisen. Zum einen ist nun $s < 3/4 < 1$ und damit sind nach (2.1.3) die abzuschätzenden Terme von einfacherer Struktur, namentlich sind im Beweis nur Ableitungen der Ordnung höchstens zwei zu behandeln, welches den Aufwand deutlich reduziert. Auf der anderen Seite kann nun nicht mehr ausgenutzt werden, daß die abzuschätzenden Funktionen u beziehungsweise \tilde{u} samt bestimmter Ableitungen entlang der Diagonale $\{x_1 = x_2\}$

verschwinden, was genutzt werden konnte, um die schließlich auftretende Potenz von n zu verringern und damit die möglichen Werte von σ zu erhöhen. Diese Effekte führen dazu, daß wir uns in diesem Fall auf Werte $s = \sigma < 3/4$ beschränken müssen. \square

Es können also glatte Funktionen bezüglich der Norm $\|\cdot\|_{\text{mix},s,0}$ für $s < 3/4$ (beziehungsweise im antisymmetrischen Fall für $s < 5/4$) durch glatte Funktionen approximiert werden, deren Träger von den Diagonalen D_{ij} , $i \neq j$, wegbeschränkt sind. Ein ähnliches Resultat zeigen wir nun für Funktionen, die von den Kernsingularitäten D_{a_k} , $k = 1, \dots, K$ wegbeschränkt sind. Dieser Fall ist unkritischer in dem Sinne, daß eine solche Approximation sowohl für antisymmetrische als auch für nicht antisymmetrische Funktionen für alle $s < 3/2$ möglich ist.

Lemma 2.3.2. *Es ist sowohl $\mathcal{D}_{D,\bar{a}}$ dicht in \mathcal{D}_D also auch $\mathcal{D}_{a,D,\bar{a}}$ dicht in $\mathcal{D}_{a,D}$ bezüglich der Norm $\|\cdot\|_{\text{mix},s,0}$ für $0 < s < 3/2$.*

Beweis. Wir werden im antisymmetrischen Fall die Antisymmetrie nicht ausnutzen, können diesen also durch Antisymmetrisierung der approximierenden Folge auf den allgemeinen Fall zurückführen, dem wir uns im folgenden widmen. Sei $s < 3/2$ und $u \in \mathcal{D}_D$. Wir zeigen zunächst, daß es für $k_0 \in \{1, \dots, K\}$ eine Folge $(u_n) \subset \mathcal{D}$ gibt mit

$$\text{supp}(u_n) \cap D_{a_{k_0}} = \emptyset, \quad u_n(x) = 0 \text{ falls } u(x) = 0 \text{ und } \|u - u_n\|_{\text{mix},s,0} \rightarrow 0, \quad (2.3.16)$$

woraus dann iterativ die allgemeine Behauptung folgt. Auch (2.3.16) folgt iterativ, wenn wir zeigen, daß es für $i_0 \in \{1, \dots, N\}$ eine Folge $(u_n) \subset \mathcal{D}$ gibt mit $u_n(x) = 0$ falls $u(x) = 0$, $\|u - u_n\|_{\text{mix},s,0} \rightarrow 0$ und

$$\text{supp}(u_n) \cap \{x \in \mathbb{R}^{3N} \mid x_{i_0} = a_{k_0}\} = \emptyset.$$

Ohne Einschränkung können wir $a_{k_0} = 0$ und $i_0 = 1$ annehmen. Wir skizzieren nun den weiteren Beweis, der ähnlich wie der des vorigen Lemmas verläuft. Es sei \tilde{w} dieselbe Abschneidefunktion wie dort. Wir setzen nun

$$u_n : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{R}, \quad u_n(x) := u(x)\tilde{w}(n|x_1|), \quad x \in \mathbb{R}^{3N}$$

und $w_n(x) = 1 - \tilde{w}(n|x_1|)$, $x \in \mathbb{R}^{3N}$, also $u - u_n = uw_n$. Dann hat u_n die gewünschten Eigenschaften und es bleibt zu zeigen, daß $\|uw_n\|_{\text{mix},s,0} \rightarrow 0$, daß also, vermöge der Slobodeckij-Formulierung der Normen, für beliebige $\mathbb{A} \subset \{1, \dots, N\}$, $\mathbb{B} \subset \mathbb{A}$ und $\alpha \in \mathbb{A}^*$ gilt

$$\int_{B(0,1)^{|\mathbb{B}|}} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \frac{\left| \left(\prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i) (\partial_\alpha^\mathbb{A} (u w_n)) \right) (x) \right|^2}{\prod_{i \in \mathbb{B}} |h_i|^{3+2\sigma}} dx dh^\mathbb{B} \rightarrow 0.$$

Der Integrand konvergiert wiederum fast überall gegen Null. Um eine integrierbare Majorante zu konstruieren, sind hier die Fälle $1 \in \mathbb{B} \subset \mathbb{A}$, $1 \in \mathbb{A} \setminus \mathbb{B}$ und $1 \notin \mathbb{A}$ zu unterscheiden, wobei der erste der komplizierteste und die möglichen Werte für s bestimmende ist. Nur ihn wollen wir nun abschließend betrachten. Mit denselben Techniken wie im zweiten Teil des vorigen Beweises (hier nun allerdings treten höchstens Ableitungen zweiter Ordnung auf) können die beiden Abschätzungen

$$\left| \left(\prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i)(\partial_\alpha^{\mathbb{A}}(u w_n)) \right)(x) \right| \lesssim |h_1| n^2 \prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1\}} |h_i|$$

und

$$\left| \left(\prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i)(\partial_\alpha^{\mathbb{A}}(u w_n)) \right)(x) \right| \lesssim n \prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1\}} |h_i| (\mathbb{1}_{D_1^n}(x + h_1 e_1) - \mathbb{1}_{D_1^n}(x)),$$

$D_1^n = \{x \in \mathbb{R}^{3N} \mid |x_1| < 1/n\}$, gezeigt werden. Durch Mittelung mittels eines noch zu bestimmenden $\delta > 1/2$ erhalten wir

$$\begin{aligned} & \left| \left(\prod_{i \in \mathbb{B}} \Delta_i(h_i)(\partial_\alpha^{\mathbb{A}}(u w_n)) \right)(x) \right| \\ & \lesssim n^{4-2\delta} |h_1|^{2-2\delta} \prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1\}} |h_i|^2 (\mathbb{1}_{D_1^n}(x + h_1 e_1) - \mathbb{1}_{D_1^n}(x)) \\ & \lesssim |h_1|^{2-2\delta} \prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1\}} |h_i|^2 \left(\frac{1}{|x_1 + h_1|^{4-2\delta}} + \frac{1}{|x_1|^{4-2\delta}} \right). \end{aligned}$$

Eine Majorante des ganzen Integranden ist in diesem Fall also gegeben durch

$$(h, x) \mapsto |h_1|^{-(1+2(\sigma+\delta))} \prod_{i \in \mathbb{B} \setminus \{1\}} |h_i|^{-(1+2\sigma)} \left(\frac{1}{|x_1 + h_1|^{4-2\delta}} + \frac{1}{|x_1|^{4-2\delta}} \right).$$

Die Integrierbarkeit bezüglich h_1 erfordert wieder $\delta < 1 - \sigma$, jene bezüglich x_1 erzwingt $4 - 2\delta < 3$ und damit $\delta > 1/2$. Ein solches δ existiert für $\sigma < 1/2$, jedoch nicht für größere σ . \square

Bemerkung 2.3.3. *In der Tat enthält der Beweis des vorigen Lemmas sogar, daß $\mathcal{D}_{\vec{a}}$ dicht liegt in \mathcal{D} und $\mathcal{D}_{a,\vec{a}}$ dicht liegt in \mathcal{D}_a bezüglich $\|\cdot\|_{\text{mix},s,0}$ für alle $s < 3/2$.*

Die soeben gezeigten beiden Dichtheitsaussagen kumulieren nun unmittelbar in folgendem Satz .

Satz 2.3.4. *Für $0 < s < 3/4$ ist $H_{\text{mix},D,\vec{a}}^{s,0} = H_{\text{mix}}^{s,0}$ und für $0 < s < 5/4$ ist $H_{\text{mix},a,D,\vec{a}}^{s,0} = H_{\text{mix},a}^{s,0}$.*

2.4 Jastrow-Faktoren in anisotropen Sobolev-Räumen

In diesem Abschnitt untersuchen wir die Abbildungseigenschaften einer Klasse Operatoren, die durch Multiplikation mit einem Jastrow-Faktor gegeben sind, in anisotropen Sobolev-Räumen. Die hier gewonnenen Resultate sind Kernstück der Beweise der allgemeineren Regularitätsaussagen, die wir im nächsten Abschnitt für die elektronischen Wellenfunktionen beweisen werden.

Es seien für $i < j$ wieder $D_{ij} := \{x \in \mathbb{R}^{3N} \mid x_i = x_j\}$, und $D := \bigcup_{i < j} D_{ij}$ die Menge der Elektron-Elektron-Singularitäten. Wir betrachten Jastrow-Faktoren der folgenden Form: Es sei $F : \mathbb{R}^3 \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{R}$ eine glatte, lokal beschränkte Funktion, welche die Eigenschaft

$$|\partial^\alpha F(x)| \lesssim |x|^{1-|\alpha|}$$

für $|\alpha| > 0$ besitzt. Insbesondere gelte also

$$|\nabla F(x)| \lesssim 1 \quad \text{und} \quad |\Delta F(x)| \lesssim 1/|x|.$$

Weiterhin fordern wir $F(x) = F(-x)$ auf \mathbb{R}^3 . Mögliches Beispiel für eine solche Funktion ist etwa $F(x) := \exp(\phi(x))$, wobei ϕ glatt und beschränkt ist mit $\phi(x) = |x|$ für $|x| < 1$ und entsprechende Symmetrieeigenschaften hat.

Für eine glatte Funktion $v \in \mathcal{D}$ betrachten wir nun das zunächst nur auf $\mathbb{R}^{3N} \setminus D$ definierte Produkt

$$x \mapsto \prod_{i < j} F(x_i - x_j)v(x).$$

Hierdurch definieren wir einen Multiplikationsoperator auf verschiedenen anisotropen Sobolev-Räumen, dessen Wohldefiniertheit und Beschränktheit im folgenden jeweils untersucht wird.

Wir beginnen mit dem einfachsten Fall und definieren $T_0 : H_{\text{mix}}^{1,0} \rightarrow H_{\text{mix}}^{1,0}$ gerade durch

$$(T_0 v)(x) := \prod_{i < j} F(x_i - x_j)v(x)$$

für $x \notin D$ und $(T_0 v)(x) = 0$ auf D .

Satz 2.4.1. *Der Operator T_0 ist wohldefiniert und beschränkt.*

Beweis. Sei zunächst $v \in \mathcal{D}$. Nach Lemma 2.1.2 ist

$$\|v\|_{\text{mix},1,0}^2 = \sum_{\mathbb{A} \subset \{1, \dots, N\}} \sum_{\alpha \in \mathbb{A}^*} \|\partial_\alpha^{\mathbb{A}} v\|_0^2,$$

es seien also $\mathbb{A} \subset \{1, \dots, N\}$ und $\alpha \in \mathbb{A}^*$ beliebig vorgegeben. Wir zeigen, daß $\partial_{\mathbb{A}}^{\alpha}(T_0 v)$ im schwachen Sinne existiert und die Abschätzung

$$\|\partial_{\mathbb{A}}^{\alpha}(T_0 v)\|_0^2 \lesssim \|v\|_{\text{mix},1,0}^2$$

erfüllt.

Es sei hierzu zunächst F_{ε} eine am Ursprung, also der Singularität von F , ausgeglättete Funktion: Für $\varepsilon > 0$ sei $F_{\varepsilon} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ hinreichend glatt, beschränkt und erfülle $F_{\varepsilon} = F$ auf $\mathbb{R}^3 \setminus B(0, \varepsilon)$. Auf $B(0, \varepsilon)$ gelten weiterhin die Abschätzungen $|\partial^{\alpha} F_{\varepsilon}(x)| \lesssim \varepsilon^{1-|\alpha|}$.

Betrachten wir also die auf ganz \mathbb{R}^{3N} definierte, hinreichend glatte Funktion

$$x \mapsto \prod_{i < j} F_{\varepsilon}(x_i - x_j) v(x).$$

Für eine beliebige Testfunktion $\xi \in \mathcal{D}$ können wir nun partiell integrieren und erhalten

$$\int \prod_{i < j} F_{\varepsilon}(x_i - x_j) v \partial_{\mathbb{A}}^{\alpha} \xi dx = (-1)^{|\mathbb{A}|} \int \partial_{\mathbb{A}}^{\alpha} \left(\prod_{i < j} F_{\varepsilon}(x_i - x_j) v \right) \xi dx.$$

Nun ist

$$\partial_{\mathbb{A}}^{\alpha} = \prod_{k \in \mathbb{A}} \frac{\partial}{\partial x_{k, \alpha(k)}},$$

also

$$\partial_{\mathbb{A}}^{\alpha} \left(\prod_{i < j} F_{\varepsilon}(x_i - x_j) v \right) = \sum_{\mathbb{B} \subset \mathbb{A}} c_{\mathbb{B}} \partial_{\mathbb{B}}^{\alpha} \left(\prod_{i < j} F_{\varepsilon}(x_i - x_j) \right) \partial_{\mathbb{A} \setminus \mathbb{B}}^{\alpha} v, \quad (2.4.1)$$

wobei $c_{\mathbb{B}}$ die hier nicht näher spezifizierten Konstanten aus der entsprechenden Produktregel sind. Mittels vollständiger Induktion ist nun leicht zu sehen, daß

$$\partial_{\mathbb{B}}^{\alpha} \left(\prod_{i < j} F_{\varepsilon}(x_i - x_j) \right) = \sum_{\{\mathbb{C}_{ij}\}_{i < j}} \prod_{\mathbb{C}_{ij}} \partial_{\mathbb{C}_{ij}}^{\alpha} F_{\varepsilon}(x_i - x_j), \quad (2.4.2)$$

wobei sich die Summation über alle paarweise disjunkten Zerlegungen

$$\{\mathbb{C}_{ij} \subset \mathbb{B} \mid i < j, \bigcup \mathbb{C}_{ij} = \mathbb{B}, \mathbb{C}_{ij} \cap \mathbb{C}_{i'j'} = \emptyset\} \quad (2.4.3)$$

von \mathbb{B} erstreckt. Einen solchen Summanden gilt es abzuschätzen. Da ein Faktor $F_{\varepsilon}(x_i - x_j)$ nur von zwei Koordinatentripeln abhängt, so verschwindet ein Term $\partial_{\mathbb{C}_{ij}}^{\alpha} F_{\varepsilon}(x_i - x_j)$ nur dann nicht, falls einer der drei folgenden Fälle auftritt:

- (a) $|\mathbb{C}_{ij}| = 2$ und $\mathbb{C}_{ij} = \{i, j\}$
- (b) $|\mathbb{C}_{ij}| = 1$ und $\mathbb{C}_{ij} = \{i\}$ oder $\mathbb{C}_{ij} = \{j\}$
- (c) $\mathbb{C}_{ij} = \emptyset$.

Im dritten Fall folgt unmittelbar

$$|\partial_{\mathbb{C}_{ij}}^\alpha F_\varepsilon(x_i - x_j)| = |F_\varepsilon(x_i - x_j)| \lesssim 1.$$

Ebenso folgt in jedem der beiden zweiten Fälle sofort

$$|\partial_{\mathbb{C}_{ij}}^\alpha F_\varepsilon(x_i - x_j)| \lesssim 1.$$

Der erste Fall ist der interessante. Hier folgt aus den Eigenschaften von F_ε zunächst für $|x_i - x_j| \geq \varepsilon$:

$$|\partial_{\mathbb{C}_{ij}}^\alpha F_\varepsilon(x_i - x_j)| \lesssim 1/|x_i - x_j|.$$

Für $|x_i - x_j| < \varepsilon$ ist ebenfalls

$$|\partial_{\mathbb{C}_{ij}}^\alpha F_\varepsilon(x_i - x_j)| \lesssim 1/\varepsilon < 1/|x_i - x_j|.$$

Jeder Summand in (2.4.2) kann also bis auf Konstanten abgeschätzt werden gegen

$$\prod_{\mathbb{C}_{ij}=\{i,j\}} \frac{1}{|x_i - x_j|}.$$

Hierbei sei bemerkt, daß jeder Index i, j in höchstens einem Faktor auftreten kann, also insbesondere alle auftretenden Faktoren aus disjunkten Paaren von Indizes bestehen. Insgesamt folgt für (2.4.1):

$$\left| \partial_{\mathbb{A}}^\alpha \left(\prod_{i < j} F_\varepsilon(x_i - x_j) v \right) \right| \lesssim \left| \sum_{\mathbb{B} \subset \mathbb{A}} c_{\mathbb{B}} \sum_{\{\mathbb{C}_{ij}\}} \prod_{\mathbb{C}_{ij}=\{i,j\}} \frac{1}{|x_i - x_j|} \partial_{\mathbb{A} \setminus \mathbb{B}}^\alpha v \right| =: g_{\mathbb{A}}.$$

Die Majorante $g_{\mathbb{A}}$ ist unabhängig von ε und quadratintegrierbar, wie iterativ aus der Hardy-Ungleichung (A.1.9) folgt: Es gilt nämlich für einen auftretenden Summanden:

$$\begin{aligned} \int \prod_{\mathbb{C}_{ij}=\{i,j\}} \frac{(\partial_{\mathbb{A} \setminus \mathbb{B}}^\alpha v)^2}{|x_i - x_j|^2} dx &\lesssim \int \prod_{i \in \cup_{\mathbb{C}_{ij}=\{i,j\}} \mathbb{C}_{ij}} (1 + |\omega_i|^2)^{1/2} |\widehat{\partial_{\mathbb{A} \setminus \mathbb{B}}^\alpha v}|^2 d\omega \\ &\lesssim \int \prod_{i \in \mathbb{A}} (1 + |\omega_i|^2) |\widehat{v}|^2 d\omega. \end{aligned}$$

Damit ist für jede Testfunktion $\xi \in \mathcal{D}$ das Produkt $\xi \cdot \sum_{\mathbb{B} \subset \mathbb{A}} g_{\mathbb{A}}$ integrierbar mit

$$\int \xi \cdot \sum_{\mathbb{B} \subset \mathbb{A}} g_{\mathbb{A}} dx \lesssim \|v\|_{\text{mix},1,0} \|\xi\|_0$$

und somit insgesamt

$$\left| \int \prod_{i<j} F_\varepsilon(x_i - x_j) v \partial_{\mathbb{A}}^\alpha \xi dx \right| = \left| \int \partial_{\mathbb{A}}^\alpha \left(\prod_{i<j} F_\varepsilon(x_i - x_j) v \right) \xi dx \right| \lesssim \|v\|_{\text{mix},1,0} \|\xi\|_0$$

unabhängig von ε . Nun konvergieren die Integranden punktweise fast überall:

$$\prod_{i<j} F_\varepsilon(x_i - x_j) v \partial_{\mathbb{A}}^\alpha \xi \rightarrow \prod_{i<j} F(x_i - x_j) v \partial_{\mathbb{A}}^\alpha \xi$$

und

$$\partial_{\mathbb{A}}^\alpha \left(\prod_{i<j} F_\varepsilon(x_i - x_j) v \right) \xi \rightarrow \partial_{\mathbb{A}}^\alpha \left(\prod_{i<j} F(x_i - x_j) v \right) \xi.$$

Somit folgt aus dem Satz über die majorisierte Konvergenz für feste $v, \xi \in \mathcal{D}$:

$$\int \prod_{i<j} F(x_i - x_j) v \partial_{\mathbb{A}}^\alpha \xi dx = \int \partial_{\mathbb{A}}^\alpha \left(\prod_{i<j} F(x_i - x_j) v \right) \xi dx,$$

es existiert also $\partial_{\mathbb{A}}^\alpha \left(\prod_{i<j} F(x_i - x_j) v \right)$ im schwachen Sinne und es gilt

$$\left| \int \partial_{\mathbb{A}}^\alpha \left(\prod_{i<j} F(x_i - x_j) v \right) \xi dx \right| \lesssim \|v\|_{\text{mix},1,0} \|\xi\|_0$$

also

$$\left\| \partial_{\mathbb{A}}^\alpha \left(\prod_{i<j} F(x_i - x_j) v \right) \right\|_0 \lesssim \|v\|_{\text{mix},1,0}$$

und damit $\|T_0 v\|_{\text{mix},1,0} \lesssim \|v\|_{\text{mix},1,0}$ für alle $v \in \mathcal{D}$. Aufgrund der Dichtheit von \mathcal{D} in $H_{\text{mix}}^{1,0}$ folgt hieraus die Behauptung. \square

Der Satz 2.4.1 ist, wie gesehen, recht einfach zu beweisen, hat jedoch den Nachteil, daß die in ihm betrachteten Räume $H_{\text{mix}}^{1,0}$, also $\nu = 0$, gerade keinen isotropen Anteil haben. Für die Lösungs- und Regularitätstheorie der elektronischen Schrödinger-Gleichung werden jedoch Mixräume der Form $H_{\text{mix}}^{s,1}$ benötigt, welche Unterräume von H^1 sind. In diese Richtung werden wir nun das soeben Bewiesene verallgemeinern.

In Satz 2.4.1 ist die höchste auftretende Ableitung von zweiter Ordnung, die entsprechenden Terme der Form $1/|x - y|^2$ können also mit der Hardy-Ungleichung (A.1.9) abgeschätzt werden. Diese ist jedoch nur anwendbar für Terme $1/|x - y|^\delta$, $\delta < 3$. Ein Beweis für eine Einbettung der Form $T : H_{\text{mix}}^{1,1} \rightarrow H_{\text{mix}}^{1,1}$ würde allerdings Ableitungen dritter Ordnung beinhalten und damit auf Terme der Form $1/|x - y|^4$ führen, die somit mittels der Hardy-Ungleichung nicht mehr

abgeschätzt werden können. In der Tat ist eine solche Abbildung im allgemeinen auch nicht wohldefiniert, wie schon das folgende einfache Beispiel zeigt:

Es sei F durch das oben angegebene Beispiel definiert, also $F(r) = e^{|r|}$ für $|r| < 1$ und außerhalb der Einheitskugel geeignet fortgesetzt. Wir betrachten für $n = 2$ eine glatte Funktion $v : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ mit beschränktem Träger, welche $v(x, y) = 1$ erfüllt falls $|x - y| < 1$ und $|(x, y)| < K < \infty$, um die für uns interessante Raumdiagonale sei also v gerade konstant Eins. Es gilt sicherlich $v \in \mathcal{D} \subset H_{\text{mix}}^{1,1}$. Betrachten wir nun Tv , also im wesentlichen die Funktion $x \mapsto e^{|x-y|}v(x, y)$ so liegt Tv nicht in $H_{\text{mix}}^{1,1}$: Die $\|\cdot\|_{\text{mix},1,1}$ -Norm setzt sich zusammen aus Termen der Form $\|\partial_{\mathbb{A}}^\alpha \nabla u\|_2$, wobei hier $\mathbb{A} \subset \{1, 2\}$ und $\alpha \in \mathbb{A}^*$, insbesondere tritt also beispielsweise ein Term der Form

$$\int \left| \frac{\partial^3 (e^{|x-y|}v(x, y))}{\partial_{x,i} \partial_{x,j} \partial_{y,k}} \right|^2 d(x, y)$$

auf mit $i, j, k = 1, 2, 3$. Nehmen wir ohne Einschränkung $i = 1, j = 2, k = 3$ an, so enthält der Integrand für $|x - y| < 1$ Terme der Form

$$\frac{e^{2|x-y|}(x_1 - y_1)^2(x_2 - y_2)^2(x_3 - y_3)^2}{|x - y|^{10}},$$

welche nicht integrierbar sind. Somit folgt $\|Tv\|_{\text{mix},1,1} = \infty$.

Wir können also nicht erwarten, daß die hier betrachteten Jastrow-Faktoren beschränkte Operatoren in $H_{\text{mix}}^{1,1}$ definieren. Zur genaueren weiteren Analyse fahren wir nun auf zweierlei Wegen fort. Zunächst formulieren wir die Abbildung in gebrochene, anisotrope Sobolev-Räume $H_{\text{mix}}^{s,1}$ für geeignete $s < 1$ und schließlich in geeignet gewichtete Räume $H_{\text{mix},w}^{1,1}$.

Betrachten wir also zuerst für $s > 0$ den Multiplikationsoperator in gebrochene Mixräume $T_s : H_{\text{mix}}^{1,1} \rightarrow H_{\text{mix}}^{s,1}$, welcher wieder durch

$$(T_s v)(x) := \prod_{i < j} F(x_i - x_j) v(x)$$

für $x \notin D$ und $(T_s v)(x) = 0$ auf D gegeben ist. Hier erhalten wir

Satz 2.4.2. *Für $s < 3/4$ ist der Operator T_s wohldefiniert und beschränkt.*

Beweis. Der Beweis hier verläuft zunächst anders als der vorige, wir verwenden die Interpolationsresultate aus Abschnitt 2.2.

Es sei $s < 3/4$ gegeben. Der Interpolationssatz 2.2.1 zeigt, daß hier gilt:

$$H_{\text{mix}}^{s,1} = [H_{\text{mix}}^{0,1}, H_{\text{mix}}^{1,1}]_{s,2} = [H^1, H_{\text{mix}}^{1,1}]_{s,2}$$

mit äquivalenten Normen. Es sei zunächst wieder $v \in \mathcal{D}$. Wir zeigen

$$u := T_s v \in [H^1, H_{\text{mix}}^{1,1}]_{s,2}$$

und genauer

$$\|u\|_{s,2} \lesssim \|v\|_{\text{mix},1,1},$$

woraus unmittelbar die Behauptung folgt. Aufgrund der Definition der Interpolationsnorm reicht es hierzu aus zu zeigen, daß es ein $\gamma > s$ gibt mit

$$K(u, t)^2 = K(u, t, H^1, H_{\text{mix}}^{1,1})^2 \lesssim t^{2\gamma} \|v\|_{\text{mix},1,1}^2.$$

Es ist also

$$K(u, t)^2 = \inf_{w \in H_{\text{mix}}^{1,1}} \|u - w\|_1^2 + t^2 \|w\|_{\text{mix},1,1}^2$$

abzuschätzen. Für $\varepsilon > 0$ setzen wir

$$w_\varepsilon(x) := \prod_{i < j} F_\varepsilon(x_i - x_j)v,$$

wobei wieder F_ε wie im Beweis des Satzes 2.4.1 gewählt sei.

Es gilt $w_\varepsilon \in \mathcal{D} \subset H_{\text{mix}}^{1,1}$ und damit

$$\begin{aligned} K(u, t)^2 &\leq \|u - w_\varepsilon\|_1^2 + t^2 \|w_\varepsilon\|_{\text{mix},1,1}^2 \\ &= \left\| \left(\prod_{i < j} F(x_i - x_j) - \prod_{i < j} F_\varepsilon(x_i - x_j) \right) v \right\|_1^2 + t^2 \left\| \prod_{i < j} F_\varepsilon(x_i - x_j) v \right\|_{\text{mix},1,1}^2. \end{aligned}$$

Betrachten wir zunächst den ersten Summanden. Es sei D eine der in der Norm zu betrachtenden Ableitungen erster Ordnung, mit $\mathcal{F}_{\text{diff}}$ sei hilfsweise die Differenz

$$\mathcal{F}_{\text{diff}} := \prod_{i < j} F(x_i - x_j) - \prod_{i < j} F_\varepsilon(x_i - x_j)$$

bezeichnet. Sowohl $\mathcal{F}_{\text{diff}}$ als auch $D\mathcal{F}_{\text{diff}}$ sind beschränkt. Wegen

$$D(\mathcal{F}_{\text{diff}}v) = D\mathcal{F}_{\text{diff}}v + \mathcal{F}_{\text{diff}}Dv$$

sind zwei Summanden zu betrachten. Wir integrieren über \mathbb{R}^{3N} , da jedoch beide Summanden verschwinden, falls $|x_i - x_j| > \varepsilon$ für alle $i < j$ gilt, können wir im folgenden die Integration auf die Menge

$$M := \bigcup_{i < j} M_{ij}, \quad M_{ij} := \{x \in \mathbb{R}^{3N} \mid |x_i - x_j| < \varepsilon\},$$

beschränken. Für den ersten Summanden gilt mit einem beliebigen $\delta < 3$ aufgrund der Hardy-Ungleichung (A.1.9)

$$\begin{aligned} \int_M (D\mathcal{F}_{\text{diff}})^2 v^2 dx &\lesssim \int_M v^2 dx = \varepsilon^\delta \int_M \varepsilon^{-\delta} v^2 dx < \varepsilon^\delta \sum_{i < j} \int_{M_{ij}} \frac{v^2}{|x_i - x_j|^\delta} dx \\ &\lesssim \varepsilon^\delta \|v\|_{\text{mix}, \delta/4, 0} \leq \varepsilon^\delta \|v\|_{\text{mix}, 1, 1}, \end{aligned}$$

für den zweiten Summanden ganz analog

$$\begin{aligned} \int_M (\mathcal{F}_{\text{diff}})^2 (Dv)^2 dx &\lesssim \int_M (Dv)^2 dx = \varepsilon^\delta \int_M \varepsilon^{-\delta} (Dv)^2 dx \\ &< \varepsilon^\delta \sum_{i < j} \int_{M_{ij}} \frac{(Dv)^2}{|x_i - x_j|^\delta} dx \lesssim \varepsilon^\delta \|(Dv)\|_{\text{mix}, \delta/4, 0} \leq \varepsilon^\delta \|v\|_{\text{mix}, 1, 1}. \end{aligned}$$

Betrachten wir nun den hinteren Term $\|\mathcal{F}_\varepsilon v\|_{\text{mix}, 1, 1}^2$ des K-Funktional, wobei wir hilfsweise

$$\mathcal{F}_\varepsilon(x) := \prod_{i < j} F_\varepsilon(x_i - x_j)$$

setzen. Hierzu halten wir $\mathbb{A} \subset \{1, \dots, N\}$, $\alpha \in \mathbb{A}^*$ sowie eine beliebige Ableitung D aus dem Gradienten fest, ohne Einschränkung können wir hierfür $D = \partial/\partial_{1,1}$ wählen. Wie im Beweis von Satz 2.4.1 erhalten wir zunächst

$$\begin{aligned} D\partial_{\mathbb{A}}^\alpha(\mathcal{F}_\varepsilon v) &= \partial_{\mathbb{A}}^\alpha(D\mathcal{F}_\varepsilon v) + \partial_{\mathbb{A}}^\alpha(\mathcal{F}_\varepsilon Dv) \\ &= \sum_{\mathbb{B} \subset \mathbb{A}} c_{\mathbb{B}} \partial_{\mathbb{B}}^\alpha(D\mathcal{F}_\varepsilon) \partial_{\mathbb{A} \setminus \mathbb{B}}^\alpha v + \sum_{\mathbb{B} \subset \mathbb{A}} c_{\mathbb{B}} \partial_{\mathbb{B}}^\alpha(\partial_{\mathbb{A}}^\alpha(\mathcal{F}_\varepsilon v)) \partial_{\mathbb{A} \setminus \mathbb{B}}^\alpha Dv. \end{aligned} \quad (2.4.4)$$

Ganz analog zu oben können wir die zweiten Summanden abschätzen:

$$\left| \sum_{\mathbb{B} \subset \mathbb{A}} c_{\mathbb{B}} \partial_{\mathbb{B}}^\alpha(\partial_{\mathbb{A}}^\alpha(\mathcal{F}_\varepsilon v)) \partial_{\mathbb{A} \setminus \mathbb{B}}^\alpha Dv \right| \lesssim \left| \sum_{\mathbb{B} \subset \mathbb{A}} c_{\mathbb{B}} \sum_{\{\mathbb{C}_{ij}\}} \prod_{\mathbb{C}_{ij}=\{i,j\}} \frac{1}{|x_i - x_j|} \partial_{\mathbb{A} \setminus \mathbb{B}}^\alpha Dv \right|,$$

wobei sich die Summation wieder über alle Zerlegungen von \mathbb{B} der Form (2.4.3) erstreckt. Mit Hilfe der Hardy-Ungleichung (A.1.9) erhalten wir auch hier:

$$\int \left| \sum_{\mathbb{B} \subset \mathbb{A}} c_{\mathbb{B}} \partial_{\mathbb{B}}^\alpha(\partial_{\mathbb{A}}^\alpha(\mathcal{F}_\varepsilon v)) \partial_{\mathbb{A} \setminus \mathbb{B}}^\alpha Dv \right|^2 dx \lesssim \|v\|_{\text{mix}, 1, 1}^2.$$

Die Abschätzung der ersten Summanden in (2.4.4) gestaltet sich aufwändiger. Wegen $D = \partial/\partial_{1,1}$ erhalten wir zunächst

$$\partial_{\mathbb{B}}^\alpha D(\mathcal{F}_\varepsilon) = \sum_{\{\mathbb{C}_{ij}\}} \sum_{l > 1} \partial_{\mathbb{C}_{ij}}^\alpha D F_\varepsilon(x_1 - x_l) \cdot \prod_{i < j, (i,j) \neq (1,l)} \partial_{\mathbb{C}_{ij}}^\alpha F_\varepsilon(x_i - x_j). \quad (2.4.5)$$

Falls ein $\mathbb{C}_{ij} = \emptyset$ oder $\mathbb{C}_{ij} = \{i\}, \{j\}$ ist, so kann der entsprechende Faktor im hinteren Term wieder gegen eine Konstante abgeschätzt werden, im Falle $\mathbb{C}_{ij} = \{i, j\}$ bis auf eine Konstante gegen $1/|x_i - x_j|$. In allen anderen Fällen verschwindet der Faktor und damit der ganze Summand. Der erste Term enthält eine zusätzliche Ableitung, jedoch erhalten wir auch hier wieder

$$\begin{aligned} |\partial_{\mathbb{C}_{ij}}^\alpha DF_\varepsilon(x_1 - x_l)| &= |DF_\varepsilon(x_1 - x_l)| \lesssim 1, \quad \text{falls } \mathbb{C}_{1l} = \emptyset \\ |\partial_{\mathbb{C}_{ij}}^\alpha DF_\varepsilon(x_1 - x_l)| &= |D\partial_{x_{1,\alpha(l)}} F_\varepsilon(x_1 - x_l)| \lesssim 1/|x_1 - x_l|, \quad \text{falls } \mathbb{C}_{1l} = \{1\} \\ |\partial_{\mathbb{C}_{ij}}^\alpha DF_\varepsilon(x_1 - x_l)| &= |D\partial_{x_{l,\alpha(l)}} F_\varepsilon(x_1 - x_l)| \lesssim 1/|x_1 - x_l|, \quad \text{falls } \mathbb{C}_{1l} = \{l\}. \end{aligned}$$

Ist nun $\mathbb{C}_{1l} = \{1, l\}$, so gilt nach Definition von F_ε

$$|D\partial_{x_{l,\alpha(l)}} \partial_{x_{1,\alpha(l)}} F_\varepsilon(x_1 - x_l)| \lesssim \begin{cases} 1/|x_1 - x_l|^2, & \text{falls } |x_1 - x_l| > \varepsilon \\ 1/\varepsilon^2 & \text{falls } |x_1 - x_l| < \varepsilon. \end{cases}$$

Für ein noch zu bestimmendes $\tilde{\delta} > 1/2$, also $2 - \tilde{\delta} < 3/2$, insgesamt abschätzen

$$|D\partial_{x_{l,\alpha(l)}} \partial_{x_{1,\alpha(l)}} F_\varepsilon(x_1 - x_l)| \lesssim \frac{1}{\varepsilon^{\tilde{\delta}}} \frac{1}{|x_1 - x_l|^{2-\tilde{\delta}}}$$

Aus dem hinteren Term in (2.4.5) erhalten wir einen relevanten Term $1/|x_i - x_j|$ nur dann, wenn $\mathbb{C}_{ij} = \{i, j\}$ gilt, in diesem Fall kann aber im ersten Term höchstens ein Term der Form $1/|x_1 - x_j|$ auftreten. Da $2 - \tilde{\delta} < 3/2$ können wir alle auftretenden Terme noch immer mit der Hardy-Ungleichung (A.1.9) abschätzen:

$$\int \frac{1}{|x_1 - x_l|^{4-2\tilde{\delta}}} \prod_{\mathbb{C}_{ij}=\{i,j\}} \frac{(\partial_{\mathbb{A}\setminus\mathbb{B}}^\alpha v)^2}{|x_i - x_j|^2} dx \lesssim \|v\|_{\text{mix},3/4,1}^2 \leq \|v\|_{\text{mix},1,1}^2.$$

Da wir ohne Beschränkung $\varepsilon < 1$, also $1 < 1/\varepsilon$ annehmen können, folgt insgesamt

$$\sum_{\mathbb{B}\subset\mathbb{A}} c_{\mathbb{B}} \int (\partial_{\mathbb{B}}^\alpha (D\mathcal{F}_\varepsilon) \partial_{\mathbb{A}\setminus\mathbb{B}}^\alpha v)^2 dx \lesssim \frac{1}{\varepsilon^{2\tilde{\delta}}} \|v\|_{\text{mix},1,1}^2$$

und damit auch

$$\int (D\partial_{\mathbb{A}}^\alpha (\mathcal{F}_\varepsilon v))^2 dx \lesssim \frac{1}{\varepsilon^{2\tilde{\delta}}} \|v\|_{\text{mix},1,1}^2 \quad \text{und} \quad \|\mathcal{F}_\varepsilon v\|_{\text{mix},1,1}^2 \lesssim \frac{1}{\varepsilon^{2\tilde{\delta}}} \|v\|_{\text{mix},1,1}^2.$$

Wählen wir nun $\tilde{\delta} = -(\delta - 4)/2 > 1/2$, so erhalten wir

$$K(u, t)^2 \lesssim (\varepsilon^\delta + t^2 \varepsilon^{\delta-4}) \|v\|_{\text{mix},1,1}^2.$$

Wir setzen weiter $\varepsilon := t^{1/2}$ und gelangen zu

$$K(u, t)^2 \lesssim t^{\delta/2} \|v\|_{\text{mix},1,1}^2.$$

Da $s < 3/4$ können wir schließlich δ mit $4s < \delta < 3$ wählen, also

$$s < \gamma := \delta/4 < 3/4,$$

womit die Behauptung bewiesen ist. \square

Wir gehen noch kurz auf den antisymmetrischen Fall ein. Hier sei $T_a : H_{\text{mix},a}^{1,1} \rightarrow H_{\text{mix},a}^{1,1}$, wobei wieder

$$(T_a v)(x) := \prod_{i < j} F(x_i - x_j) v(x)$$

für $x \notin D$ und $(T_a v)(x) = 0$ auf D , $v \in \mathcal{D}_a$. Wir erhalten

Satz 2.4.3. *Der Operator T_a ist wohldefiniert und beschränkt.*

Beweis. Da wir es hier mit ganzzahligen Ableitungen zu tun haben, können wir wie im Beweis des Satzes 2.4.1 verfahren. Wieder betrachten wir für $v \in \mathcal{D}_a$ und $\varepsilon > 0$ zunächst das geglättete Produkt $\mathcal{F}_\varepsilon v := \prod_{i < j} F_\varepsilon(x_i - x_j)v$. Wegen

$$\|v\|_{\text{mix},1,1}^2 = \sum_{A \subset \{1, \dots, N\}} \sum_{\alpha \in A^*} \|\partial_\alpha^\mathbb{A} v\|_1^2$$

treten hier bei der Abschätzung von $\|\mathcal{F}_\varepsilon v\|_{\text{mix},1,1}$ im Gegensatz zum $H_{\text{mix}}^{1,0}$ -Fall dritte Ableitungen von Termen der Form $F_\varepsilon(x_i - x_j)v$ auf. Diese können wir bis auf Konstanten abschätzen gegen

$$\frac{1}{|x_i - x_j|^2},$$

sind also im Ganzen mit Integralen der Form

$$\int \frac{\tilde{v}^2}{|x_i - x_j|^4} dx$$

konfrontiert, auf welche wir die Hardy-Ungleichung (A.1.9) nicht mehr anwenden können. Hier bemerken wir nun, daß mit v auch $\mathcal{F}_\varepsilon v$ antisymmetrisch ist. Diese Antisymmetrie impliziert insbesondere, daß sowohl v als auch $\mathcal{F}_\varepsilon v$ entlang jeder Diagonalen D_{ij} verschwinden. Somit können wir hier die erweiterte Hardy-Ungleichung (A.1.10) anwenden, mit welcher wir zur Abschätzung

$$\|\partial_\alpha^\mathbb{A}(\mathcal{F}_\varepsilon v)\|_1^2 \lesssim \|v\|_{\text{mix},1,1}$$

gelangen. Die Aussage folgt hieraus wieder mit Hilfe des Satzes von Lebesgue durch Grenzübergang zu $\varepsilon \rightarrow 0$ und der Dichtheit von \mathcal{D}_a in $H_{\text{mix},a}^{1,1}$. \square

An dieser Stelle bemerken wir, daß in diesem Beweis nicht die Hardy-Ungleichung (A.1.10) den die Regularität limitierenden Faktor darstellt: Diese würde die Behandlung von Integralen $\int v^2/|x_i - x_j|^\delta$ für $\delta < 5$ erlauben, also höhere Ableitungen von \mathcal{F}_ε ermöglichen. Da jedoch als Definitionsbereich des Operators gerade $H_{\text{mix},a}^{1,1}$ gewählt wurde, beschränkt hier v selbst die Ordnung der möglichen Ableitungen. Es ist zu erwarten, daß bei Wahl des Definitionsgebietes als $H_{\text{mix},a}^{\tilde{s},1}$ mit $\tilde{s} > 1$ der Jastrow-Faktor beschränkte Multiplikationsoperatoren in Räume $H_{\text{mix},a}^{s,1}$ definiert für $s > 1$. Jedoch ist die bekannte anisotrope Regularität des regulären Teils u_0 einer antisymmetrischen Eigenfunktion des elektronischen Hamilton-Operators auf $H_{\text{mix},a}^{1,1}$ beschränkt (siehe auch Abschnitt 3.1).

Zum Abschluss dieses Abschnittes betrachten wir gewichtete, anisotrope Sobolev-Räume. Im Gegensatz zum soeben bewiesenen Satz betrachten wir nun jeweils volle gemischte Ableitungen. Dem singulären Verhalten tragen wir Rechnung, in dem wir den entsprechenden anisotropen Sobolev-Raum geeignet gewichten.

Die in den Beweisen auftretenden Probleme werden durch die Singularitäten der Funktionen $F(x_i - x_j)$ verursacht, finden also gerade entlang der Diagonalen D_{ij} statt. Entsprechend definieren wir passend gewichtete Räume: Es sei $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow [0, \infty)$ beschränkt und glatt auf $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ derart, daß $\psi(x) = |x|$ gilt für $|x| < 1$. Für $\sigma > 0$ definieren wir das Gewicht

$$w = w_\sigma : \mathbb{R} \rightarrow [0, \infty), \quad w(x) := \prod_{i < j} \psi(x_i - x_j)^\sigma$$

und damit die gewichtete L^2 -Norm

$$\|u\|_{0,w}^2 := \int |u(x)|^2 w(x) dx$$

sowie die gewichtete $\|\cdot\|_{\text{mix},1,1}$ -Norm

$$\|u\|_{\text{mix},w,1,1}^2 := \sum_{A \subset \{1, \dots, N\}} \sum_{\alpha \in A^*} \|\nabla \partial_A^\alpha u\|_{0,w}^2.$$

Die für uns interessanten gewichteten anisotropen Sobolev-Räume $H_{\text{mix},w}^{1,1}$ seien schließlich wieder als Vervollständigung von \mathcal{D} bezüglich $\|u\|_{\text{mix},w,1,1}$ definiert. Damit ist für $\sigma = 0$ gerade $H_{\text{mix},w}^{1,1} = H_{\text{mix}}^{1,1}$. Zur allgemeinen Theorie der gewichteten Sobolev-Räume verweisen wir auf [62, 63, 84].

Wieder sei der Multiplikationsoperator $T_w : H_{\text{mix}}^{1,1} \rightarrow H_{\text{mix},w}^{1,1}$ gegeben durch

$$(T_w v)(x) := \prod_{i < j} F(x_i - x_j) v(x)$$

für $x \notin D$ und $(T_w v)(x) = 0$ auf D .

Satz 2.4.4. Für $\sigma > 1$ ist der Operator T_w wohldefiniert und beschränkt.

Beweis. Es sei zunächst wieder $v \in \mathcal{D}$, für $\varepsilon > 0$ ist die Funktion

$$x \mapsto \mathcal{F}_\varepsilon(x)v(x)$$

glatt. Wir haben zunächst die Norm $\|\mathcal{F}_\varepsilon v\|_{\text{mix},w,1,1}$ abzuschätzen und halten hierzu $\mathbb{A} \subset \{1, \dots, N\}$, $\alpha \in \mathbb{A}^*$ sowie eine beliebige Ableitung $D = \partial/\partial x_{k,l}$ aus dem Gradienten fest. Den Ausdruck $\partial_{\mathbb{A}}^\alpha D(\mathcal{F}_\varepsilon v)$ haben wir bereits im Beweis des Satzes 2.4.2 betrachtet. Ähnlich wie dort bereitet nur der Fall Probleme, in dem ein Term $F_\varepsilon(x_i - x_j)$ dreimal nach Komponenten von x_i beziehungsweise x_j abgeleitet wird, dies resultiert hier in einem Term der Ordnung $1/|x_i - x_j|^2$, welcher in der Tat nicht quadratintegrabel ist. Zu betrachten ist jedoch die gewichtete L^2 -Norm, der entsprechende Term liest sich dann als

$$\int \frac{v^2}{|x_i - x_j|^4} w_\sigma dx = \int \frac{v^2}{|x_i - x_j|^4} \prod_{i < j} \psi(x_i - x_j)^\sigma dx.$$

Für $|x_i - x_j| \geq 1$ können wir den Integranden beispielsweise gegen $\|v\|_0^2$ abschätzen, für $|x_i - x_j| < 1$ wegen $\sigma > 1$ mit der Hardy-Ungleichung A.1.9 wie folgt:

$$\int_{\{|x_i - x_j| < 1\}} \frac{v^2}{|x_i - x_j|^4} \prod_{i < j} |x_i - x_j|^\sigma dx \lesssim \|v\|_{\text{mix},3/4,0} \|v\|_{\text{mix},1,1}.$$

Die aus niedrigeren Ableitungen resultierenden Terme bereiten keine weiteren Probleme. Da das Gewicht beschränkt ist, erhalten wir somit insgesamt

$$\|\partial_{\mathbb{A}}^\alpha D(\mathcal{F}_\varepsilon v)\|_{0,w} \lesssim \|v\|_{\text{mix},1,1}$$

und damit $\|\mathcal{F}_\varepsilon v\|_{\text{mix},w,1,1} \lesssim \|v\|_{\text{mix},1,1}$. Nun konvergiert $\mathcal{F}_\varepsilon v \rightarrow T_w v$ für $\varepsilon \rightarrow 0$ punktweise außerhalb der Singularitätenmenge D , also insbesondere fast überall. Wie im Beweis des Satzes 2.4.1 können wir aufgrund der obigen Abschätzung mit dem Satz von Lebesgue zum Grenzwert übergehen und erhalten in der Tat

$$\|T_w v\|_{\text{mix},w,1,1} \lesssim \|v\|_{\text{mix},1,1}.$$

Aufgrund der Dichtheit von \mathcal{D} in $H_{\text{mix}}^{1,1}$ folgt hieraus wieder die Behauptung. \square

3 Anwendungen auf die Schrödinger-Gleichung

Wir wollen hier nun einige der im vorigen Abschnitt gewonnenen Aussagen über die Struktur der anisotropen Sobolev-Räume auf die Eigenfunktionen der elektronischen Schrödinger-Gleichung anwenden und so weitergehende Regularitätsaussagen gewinnen.

3.1 Regularität in $H_{\text{mix}}^{1,0}$, $H_{\text{mix}}^{s,1}$ und $H_{\text{mix,w}}^{1,1}$

Kern- und Ausgangspunkt der folgenden Überlegungen ist die zentrale Aussage aus [109], welche wir im folgenden zunächst zusammenfassen. Es sei

$$F(x) := \exp(\phi(x)), \quad x \in \mathbb{R}^3,$$

ein Jastrow-Faktor, wobei $\phi : \mathbb{R}^3 \rightarrow [0, \infty)$ glatt und beschränkt ist mit $\phi(x) = |x|$ für $|x| < 1$ sowie $\phi(-x) = \phi(x)$ auf ganz \mathbb{R}^3 . Wir haben in den vorigen Abschnitten bereits festgestellt, daß dann das Produkt

$$x \mapsto \prod_{i < j} F(x_i - x_j)$$

die Voraussetzungen zu den in Abschnitt 2.4 bewiesenen Aussagen erfüllt. Es sei nun u eine Eigenfunktion des elektronischen Hamilton-Operators. Solche existieren, wie im ersten Abschnitt ausgeführt, und liegen im allgemeinen zunächst in H^1 . Die Funktion u können wir nun darstellen in der Form

$$u(x) = \prod_{i < j} F(x_i - x_j) u_0(x)$$

mit dem regularisierten Teil u_0 der Eigenfunktion, der entsprechend durch

$$u_0(x) := \prod_{i < j} F(x_i - x_j)^{-1} u(x)$$

gegeben ist. Die für uns entscheidende Regularitätsaussage zu u_0 , wie sie in [108, 109] bewiesen wird, formulieren wir in folgendem Satz.

Satz 3.1.1. *Es gilt $u_0 \in H_{mix}^{1,1}$.*

Wir haben bereits im einleitenden Teil motiviert, daß eine solche Regularitätsaussage für die volle Eigenfunktion nicht erwartet werden kann, in der Tat werden wir im nächsten Abschnitt zeigen, daß dies im allgemeinen nicht gilt.

Nun ist der Jastrow-Faktor F derart gewählt, daß sich die in Abschnitt 2.4 gewonnenen Aussagen auf ihn anwenden lassen, es gilt nämlich

$$u = Tu_0,$$

wobei T einer der im vorigen Abschnitt untersuchten Multiplikationsoperatoren T_0 , T_s beziehungsweise T_w ist. Nach Satz 3.1.1 liegt $u_0 \in H_{mix}^{1,1} \subset H_{mix}^{1,0}$, die Sätze 2.4.1, 2.4.2 und 2.4.4 führen also unmittelbar zu den folgenden Regularitätssausagen, die den Kern dieser Arbeit darstellen.

Satz 3.1.2. *Es sei $u \in H^1$ eine Eigenfunktion des elektronischen Hamilton-Operators. Dann gilt für u :*

- (i) $u \in H_{mix}^{1,0}$,
- (ii) $u \in H_{mix}^{s,1}$ für jedes $s < 3/4$,
- (iii) $u \in H_{mix,w}^{1,1}$, für jedes Gewicht $w = w_\sigma$, $\sigma > 1$.

Ist der rein antisymmetrische Fall von Interesse, gehen wir also zunächst von einer Eigenfunktion $u \in H_a^1$ aus, so bemerken wir, daß dann auch der reguläre Teil u_0 antisymmetrisch ist, da aus den Eigenschaften von ϕ unmittelbar

$$F(x_i - x_j) = F(x_j - x_i)$$

folgt, der gesamte Faktor also symmetrisch ist und sich die Antisymmetrie von u somit auf u_0 vererbt. Entsprechend gilt also hier $u_0 \in H_{mix,a}^{1,1}$. Wieder folgt hier aus der entsprechenden Abbildungseigenschaft des Operators T_a (Satz 2.4.3) das entsprechende Regularitätsresultat für die Eigenfunktion u :

Satz 3.1.3. *Es sei $u \in H_a^1$ eine vollständig antisymmetrische Eigenfunktion des elektronischen Hamilton-Operators. Dann gilt $u \in H_{mix,a}^{1,1}$.*

Diese Aussage ist bereits aus [105, 107] bekannt, dort findet der Leser einen direkten Beweis. Wir bemerken, daß in unserem Fall die Antisymmetrie nur ausgenutzt wurde, um geeignete, bessere Abbildungseigenschaften des Jastrow-Faktors zu zeigen, nicht jedoch, um eine höhere Regularität des regulären Teils u_0 selbst zu zeigen. Es ist eine offene Frage, ob $u_0 \in H_{mix,a}^{s,1}$ für gewisse $s > 1$ (siehe auch die Bemerkung nach Satz 2.4.2).

Über die Regularitätsaussagen des Satzes 3.1.2 hinaus ist es sowohl analytisch als auch numerisch von besonderem Interesse, ob die Eigenfunktionen samt ihren gemischten Ableitungen sogar exponentiell abfallen, also in einem geeignet exponentiell gewichteten anisotropen Sobolev-Raum liegt (siehe [108–110] und Abschnitt 3.3). Wie im ersten Abschnitt bemerkt, fällt sowohl jede Eigenfunktion u selbst als auch ihre ersten Ableitungen exponentiell im L^2 -Sinne ab. Um Ähnliches in unserem Fall zu formulieren, benötigen wir exponentiell gewichtete anisotrope Sobolev-Räume, wir orientieren uns hier an [110].

Für $\gamma \geq 0$ sei das exponentielle Gewicht $w_\gamma : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow [0, \infty)$ gegeben durch

$$w_\gamma(x) := \prod_{i=1}^N e^{\gamma|x_i|}, \quad x \in \mathbb{R}^{3N}.$$

Hiermit können wir zunächst für $s = 0, 1$ die Räume $H_{\text{mix,exp}}^{s,1}$ definieren als Vervollständigung von \mathcal{D} unter den gewichteten Normen

$$\|u\|_{\text{mix,exp},0,1}^2 = \|u\|_{1,\text{exp}}^2 := \int (|u(x)|^2 + |\nabla u(x)|^2) w_\gamma(x) dx$$

beziehungsweise

$$\|u\|_{\text{mix,exp},1,1}^2 = \sum_{\mathbb{A} \subseteq \{1, \dots, N\}} \sum_{\alpha \in \mathbb{A}^*} \int |\partial_\alpha^{\mathbb{A}} u|^2 w_\gamma(x) dx.$$

Für $0 < s < 1$ definieren wir $H_{\text{mix,exp}}^{s,1}$ gemäß [110] via Interpolation durch

$$H_{\text{mix,exp}}^{s,1} := [H_{\text{mix,exp}}^{0,1}, H_{\text{mix,exp}}^{1,1}]_{s,2}.$$

Es ist nun leicht einzusehen, daß für glattes $u \in \mathcal{D}$ gilt: $u \in H_{\text{exp}}^1$, falls $w_\gamma u \in H^1$ ist. Die entsprechende Aussage für $s = 1$ finden wir in [108, 109]: Ist $w_\gamma u \in H_{\text{mix}}^{1,1}$, so ist $u \in H_{\text{mix,exp}}^{1,1}$. Durch reelle Interpolation erhalten wir hieraus, daß $u \in H_{\text{mix,exp}}^{s,1}$ liegt, falls $w_\gamma u \in H_{\text{mix}}^{s,1}$, $0 < s < 1$.

Ist nun u_0 wie oben der regularisierte Teil einer Eigenfunktion der Schrödinger-Gleichung, so wird in [109] über die Aussage von Satz 3.1.1 hinaus sogar das folgende bewiesen.

Satz 3.1.4. *Es gilt $w_\gamma u_0 \in H_{\text{mix}}^{1,1}$.*

Wählen wir nun abermals den Vorfaktor im Multiplikationsoperator T_s wie oben, so erhalten wir wiederum aus Satz 2.4.2, daß auch

$$w_\gamma u = w_\gamma \prod_{i < j} F(x_i - x_j) u_0 = \prod_{i < j} F(x_i - x_j) w_\gamma u_0 = T_s(w_\gamma u_0)$$

in $H_{\text{mix}}^{s,1}$ liegt für alle $s < 3/4$. Wir haben somit in der Tat bewiesen, daß die Eigenfunktionen u in der dargestellten Weise quasi samt ihrer gebrochenen anisotropen Ableitungen exponentiell abfallen:

Satz 3.1.5. *Es sei $u \in H^1$ eine Eigenfunktion des elektronischen Hamilton-Operators. Dann gilt $u \in H_{\text{mix},\text{exp}}^{s,1}$ für jedes $s < 3/4$.*

Da auch die Gewichtsfunktion w_γ symmetrisch ist bezüglich der Vertauschung von Elektronenkoordinaten, so lässt sich dieses Ergebnis auch hier ganz analog zu oben auf den antisymmetrischen Fall übertragen, wir erhalten hier:

Satz 3.1.6. *Es sei $u \in H_a^1$ eine vollständig antisymmetrische Eigenfunktion des elektronischen Hamilton-Operators. Dann gilt $u \in H_{\text{mix},\text{exp},a}^{1,1}$, wobei hier $H_{\text{mix},\text{exp},a}^{1,1}$ das antisymmetrische exponentiell gewichtete Pendant zu $H_{\text{mix},\text{exp}}^{1,1}$ ist.*

3.2 Optimalität

Im vorigen Abschnitt konnten wir zeigen, daß jede Eigenfunktion u des elektronischen Hamilton-Operators sowohl im Raum $H_{\text{mix}}^{s,1}$ liegt für jedes $s < 3/4$ als auch im gewichteten Raum $H_{\text{mix},w}^{1,1}$ für $w = w_\sigma$, $\sigma > 1$. Im antisymmetrischen Fall gilt sogar $u \in H_{\text{mix}}^{1,1}$.

Da die Eigenfunktionen des elektronischen Hamilton-Operators mit Ausnahme des Falles $N = 1$, also des Wasserstoffatoms, nicht analytisch bekannt sind, ist die Frage nach der Optimalität der gewonnenen Aussagen schwer zu beantworten.

Der zum Wasserstoffatom gehörenden Modell-Hamilton-Operator

$$H = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{|x|}$$

besitzt hingegen bekannte Eigenfunktionen, welche in nahezu jedem Lehrbuch zur Theorie der Quantenmechanik berechnet werden, siehe beispielsweise [94]. Die zum kleinsten Eigenwert $-1/4$ gehörende Eigenfunktion ist dann gegeben durch

$$u_{000}(x) = ce^{-|x|/2}, \quad x \in \mathbb{R}^3.$$

Um die Regularität dieser Funktion im Sinne von (zunächst isotropen) Sobolev-Räumen zu untersuchen, benötigen wir die Fouriertransformierte von u_{000} . Diese wird beispielsweise in [107] berechnet. Für unsere Zwecke reicht die Feststellung, daß sie sich für $|\omega| \rightarrow \infty$ asymptotisch wie $1/|\omega|^4$ verhält. Da die entsprechenden Ableitungen in \mathbb{R}^3 quadratintegrierbar bleiben müssen, folgt hieraus unmittelbar, daß $u_{000} \in H^{\tilde{s}}$ für $\tilde{s} < 5/2$, jedoch nicht mehr für $\tilde{s} = 5/2$. Nun fallen für $N = 1$ die anisotropen Sobolev-Räume gerade mit entsprechenden isotropen

Sobolev-Räumen zusammen: $H_{\text{mix}}^{s,1} = H^{s+1}$. Das Beispiel des Wasserstoffatoms zeigt also, daß $s = 3/2$ eine erste obere Grenze für die gemischte Regularität der Eigenfunktionen darstellt.

Betrachten wir für $N \geq 2$ zunächst den Hamilton-Operator

$$-\Delta - \sum_{i=1}^N \frac{Z}{|x_i|} \quad (3.2.1)$$

eines Atoms, dessen Kern die Ladung Z hat und im Ursprung fixiert ist, wobei wir hier also vorerst die Elektron-Elektron-Interaktion ignorieren. Die Eigenfunktionen dieses Operators sind dann gerade Produkte von Wasserstoff-Eigenfunktionen. Eine detaillierte Analyse der Regularität dieser Zustandsfunktionen ist in [107] zu finden und besagt, daß die Eigenfunktionen des Operators (3.2.1) sich ganz entsprechend den Wasserstoffwellenfunktionen verhalten, also wieder in $H_{\text{mix}}^{s,1}$ liegen für $s < 3/2$ und diese Grenze auch hier scharf ist. Wir halten demnach fest, daß der Einfluss der Kernsingularitäten die gemischte Regularität der Wellenfunktion genau auf $H_{\text{mix}}^{s,1}$, $s < 3/2$, beschränkt.

Die Elektron-Elektron-Singularitäten $1/|x_i - x_j|$ ist allerdings im Sinne der anisotropen Sobolev-Räume von höherer Ordnung als die Kernsingularitäten $1/|x_i|$, da erstere von zwei Elektronenpositionen abhängen und deshalb beispielsweise ein gemischter Ableitungsoperator wie er in der Norm $H_{\text{mix}}^{1,1}$ auftritt als dritte Ableitung auf einem derartigen Summanden der Interelektronenwechselwirkung agiert, jedoch nur als zweite Ableitung auf einem Term des Kernpotentials. Da letztlich in beiden Fällen die entstehenden Ableitungen quadratintegrierbar sein müssen, ist in unserem Sinne das Elektron-Elektron-Potential V_{ee} als singulärer als das Elektron-Kern-Potential V_{ne} anzusehen. Aus diesem Grunde ist es durchaus zu erwarten, daß der volle Hamilton-Operator schlechtere Regularitätseigenschaften hat als (3.2.1). Nun können die Eigenfunktionen des vollen Operators nicht explizit bestimmt werden, wir können jedoch den Einfluss von V_{ee} auf die Regularitätseigenschaften des Operators untersuchen, indem wir V_{ne} durch ein harmonisches Potential ersetzen:

Wir betrachten in diesem Sinne den folgendem Hamilton-Operator in \mathbb{R}^6 :

$$H_{\text{Hook}} = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{k}{2}(|x|^2 + |y|^2) + \frac{1}{|x-y|}, \quad x, y \in \mathbb{R}^3. \quad (3.2.2)$$

Das durch dieses Modell beschriebene theoretische System wird in der Literatur als *Hookium* oder *Harmonium* bezeichnet. Ersetzen wir den zweiten Term wieder durch das entsprechende Kernpotential V_{ne} , so erhalten wir den vollen elektronische Hamilton-Operator des Heliums. Da das harmonische Potential im Gegensatz zu V_{ne} glatt ist, so ist zu erwarten, daß die Regularitätseigenschaften von H_{Hook} im wesentlichen von V_{ee} bestimmt werden. Das Hookium hat nun den

– für uns entscheidenden – Vorteil, daß (für die Wahl $k = 1/4$) der Grundzustand von H_{Hook} explizit bestimmbar ist und durch die Funktion

$$u_{\text{Hook}}(x, y) = c \left(1 + \frac{1}{2}|x - y|\right) e^{-(|x|^2/4 + |y|^2/4)}, \quad x, y \in \mathbb{R}^3,$$

gegeben ist ([55, 56]). Deshalb können die Regularitätseigenschaften des Hookiums, im Gegensatz zu denen der Eigenfunktionen der vor elektronischen Hamilton-Operatoren, genau untersucht werden. Da der Exponentialterm glatt ist, wird die Regularität von u_{Hook} im wesentlichen durch das Verhalten von $(x, y) \mapsto |x - y|$ in $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ beeinflusst.

Zunächst betrachten wir gewichtete Sobolev-Räume und bestimmen, für welche $\sigma > 0$ die Funktion u_{Hook} noch in $H_{\text{mix},w}^{1,1}$ enthalten ist. Ist hierbei – wie in Abschnitt 2.4 – $\partial_{\mathbb{A}}^\alpha D$ ein in der Norm auftretender Ableitungsausdruck, so ist es leicht zu sehen, daß $|\partial_{\mathbb{A}}^\alpha D u_{\text{Hook}}|$ einen Term der Ordnung

$$\frac{1}{|x - y|^2} e^{-1/4(|x|^2 + |y|^2)}$$

enthält, $\|\partial_{\mathbb{A}}^\alpha D u_{\text{Hook}}\|_{0,w}$ also einen Term

$$\int_{|x-y|<1} \frac{1}{|x - y|^4} e^{-1/2(|x|^2 + |y|^2)} |x - y|^\sigma d(x, y).$$

Dieser ist genau dann endlich, falls $\sigma > 1$ gilt. Unter der Annahme, daß die Regularitätseigenschaften des Hookiums durch V_{ee} bestimmt werden und dementsprechend mit denen des elektronischen Hamilton-Operators vergleichbar sind, zeigt dies also, daß die Voraussetzungen des Satzes 2.4.4 scharf sind, dieser also in diesem Sinne optimal ist.

Die genaue Bestimmung der ungewichteten, gebrochenen anisotropen Sobolev-Regulartät von u_{Hook} gestaltet sich etwas komplizierter. Zunächst ist es mit Hilfe der Sobolev-Slobodeckij-Formulierung der Norm $\|\cdot\|_{\text{mix},s,1}$ leicht einzusehen, daß die Funktion u_{Hook} in jedem $H_{\text{mix}}^{s,1}$ liegt für $s < 3/4$, somit also zumindest die nach Satz 2.4.2 zu erwartende Regularität besitzt. Um die Optimalität einer solchen Aussage zu überprüfen, benötigen wir jedoch genauere Methoden. Hier erweist es sich als zweckmäßig, die Fouriertransformierte \hat{u}_{Hook} zu betrachten. Diese ist beispielsweise in [83] zu finden, da wir jedoch für die Bestimmung der Regularität nur am asymptotischen Verhalten von $\hat{u}_{\text{Hook}}(\omega, \eta)$ für $|\omega|, |\eta| \rightarrow \infty$ interessiert sind, wählen wir hier einen anderen Weg, siehe hierzu auch [28]. Da es für unsere Zwecke auf die genauen Konstanten nicht ankommt, betrachten wir im folgenden die Funktion

$$f(x, y) := |x - y| e^{-\frac{1}{2}(|x|^2 + |y|^2)}, \quad x, y \in \mathbb{R}^3.$$

Desweiteren sei

$$\tilde{f}(x, y) := |\tilde{x}|e^{-\frac{1}{4}(|\tilde{x}|^2+|\tilde{y}|^2)} = |\tilde{x}|e^{-\frac{1}{4}|\tilde{x}|^2} e^{-\frac{1}{4}|\tilde{y}|^2}, \quad \tilde{x}, \tilde{y} \in \mathbb{R}^3.$$

Hier besteht unmittelbar der Zusammenhang $f(x, y) = \tilde{f}(x - y, x + y)$. Die Funktion \tilde{f} hat die vorteilhaften Eigenschaften, daß sie zum einen sowohl jeweils rotationssymmetrisch in \tilde{x} und \tilde{y} ist, als auch ein Tensorprodukt zweier dreidimensionaler Funktionen. Wir betrachten zunächst die Fouriertransformierte $\mathcal{F}\tilde{f}$ von \tilde{f} . Da diese Funktion in \tilde{x} und \tilde{y} entkoppelt, ist $\mathcal{F}\tilde{f}$ das Tensorprodukt der einzelnen Fouriertransformierten der Faktoren. Nun ist der zweite Faktor $\tilde{y} \mapsto e^{-\frac{1}{4}|\tilde{y}|^2}$ eine Gauss-Funktion, deren Fouriertransformierte selbst wieder eine Gauss-Funktion ist. Es ist also nur der erste Faktor $\tilde{x} \mapsto \tilde{\phi}(\tilde{x}) := |\tilde{x}|e^{-\frac{1}{4}|\tilde{x}|^2}$ zu transformieren. Hier nutzen wir die Rotationssymmetrie und bemerken

$$\tilde{\phi}(\tilde{x}) = \phi(|\tilde{x}|), \quad \text{wobei } \phi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \phi(r) := re^{-\frac{1}{4}r^2},$$

eine glatte Funktion ist. Weiterhin gilt $\tilde{\phi}(Q\tilde{x}) = \tilde{\phi}(\tilde{x})$ für jede orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$. Wählen wir jeweils $Q = Q_\omega$ in Abhängigkeit von $\omega \neq 0$ derart, daß beispielsweise $Q^T\omega/|\omega| = e_3$ gilt, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \int e^{-i\omega\tilde{x}} \tilde{\phi}(\tilde{x}) d\tilde{x} &= \int e^{-iQ^T\omega\tilde{x}} \tilde{\phi}(Q\tilde{x}) d\tilde{x} \\ &= \int e^{-i|\omega|\tilde{x}_3} \phi(|\tilde{x}|) d\tilde{x}, \end{aligned}$$

woraus mittels Transformation auf Kugelkoordinaten

$$(\mathcal{F}\tilde{\phi})(\tilde{\omega}) = \frac{c}{|\tilde{\omega}|} \int_0^\infty \phi(r) \sin(|\tilde{\omega}|r) dr$$

folgt. Ein uneigentliches Integral dieser Form können wir ganz allgemein für beliebige, hinreichend glatte Funktionen ϕ , die für $|x| \rightarrow \infty$ hinreichend schnell gegen 0 fallen, mittels mehrfacher partieller Integration folgendermaßen behandeln:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \phi(r) \sin(|\tilde{\omega}|r) dr &= \frac{\phi(0)}{|\tilde{\omega}|} - \frac{\phi''(0)}{|\tilde{\omega}|^3} + \frac{1}{|\tilde{\omega}|^4} \int_0^\infty \phi^{(4)}(r) \sin(|\tilde{\omega}|r) dr \\ &= \frac{\phi(0)}{|\tilde{\omega}|} - \frac{\phi''(0)}{|\tilde{\omega}|^3} + O\left(\frac{1}{|\tilde{\omega}|^4}\right) \end{aligned}$$

für $|\tilde{\omega}| \rightarrow \infty$. Asymptotisch für $|\tilde{\omega}| \rightarrow \infty$ verhält sich $(\mathcal{F}\tilde{\phi})(\tilde{\omega})$ demnach wie

$$\frac{\phi(0)}{|\tilde{\omega}|^2} - \frac{\phi''(0)}{|\tilde{\omega}|^4}.$$

Für unser spezielles ϕ ist nun $\phi(0) = 0$ und $\phi''(0) \neq 0$, wonach sich $\mathcal{F}\tilde{\phi}$ asymptotisch wie $1/|\tilde{\omega}|^4$ verhält, die ganze Fouriertransformierte von \tilde{f} also wie

$$\frac{1}{|\tilde{\omega}|^4} e^{-c|\tilde{\eta}|^2} \quad \text{für } |\tilde{\omega}| \rightarrow \infty.$$

Aus der Definition der Fouriertransformation folgt unmittelbar

$$\hat{f}(\omega, \eta) = (\mathcal{F}\tilde{f})\left(\frac{\omega - \eta}{2}, \frac{\omega + \eta}{2}\right),$$

für $|\omega - \eta| = |\tilde{\omega}| \rightarrow \infty$ verhält sich \hat{f} also wie

$$\frac{1}{|\omega - \eta|^4} e^{-c|\omega + \eta|^2}.$$

Wir sind an der Norm $\|f\|_{\text{mix},s,1}$ interessiert, also an

$$\int (1 + |\omega|^2 + |\eta|^2)(1 + |\omega|^2)^s (1 + |\eta|^2)^s |\hat{f}(\omega, \eta)|^2 d(\omega, \eta).$$

Der Integrand spaltet sich auf in eine Reihe von positiven Summanden, wir betrachten den für das Verhalten bei unendlich relevanten Teil, welcher sich asymptotisch für $|\omega - \eta| \rightarrow \infty$ wie

$$\frac{(|\omega|^2 + |\eta|^2)|\omega|^{2s}|\eta|^{2s}}{|\omega - \eta|^8} e^{-2c|\omega + \eta|^2}$$

verhält und schätzen dies nach unten ab. Hierzu schränken wir zunächst das Integral ein auf die Menge $\{|\omega + \eta| \leq 1\}$, auf welcher der Exponentialterm von Null wegbeschränkt bleibt. Auf dieser Menge können wir $\eta = -\omega + h$ schreiben, $|h| \leq 1$ und $|\omega - \eta| \rightarrow \infty$ ist dort gleichbedeutend mit $|\omega| \rightarrow \infty$. Schränken wir uns des weiteren beispielsweise auf die Menge $\{|\omega| > 2\}$ ein, erhalten wir dort

$$\frac{(|\omega|^2 + |\eta|^2)|\omega|^{2s}|\eta|^{2s}}{|\omega - \eta|^8} e^{-2c|\omega + \eta|^2} \gtrsim \frac{1}{|\omega|^{6-4s}}.$$

Dieser Term ist über $\{|\omega| > 2\} \subset \mathbb{R}^3$ genau dann integrierbar, wenn $6 - 4s > 3$, also $s < 3/4$. Hieraus folgt, daß $\|f\|_{\text{mix},s,1}$ nicht mehr endlich sein kann, falls $s \geq 3/4$ gilt, tatsächlich gilt also $u_{\text{Hook}} \in H_{\text{mix}}^{s,1}$ genau dann, wenn $s < 3/4$. Unter der oben erwähnten Annahme, daß das Hookium in der Tat die Regularitätseigenschaften der Elektron-Elektron-Wechselwirkung widerspiegelt und diese deshalb mit denen der elektronischen Schrödinger-Gleichung vergleichbar sind, zeigt dies also, daß auch die Aussage des zweiten Teils des Satzes 3.1.2 scharf ist. Für beliebige Eigenfunktionen u der elektronischen Schrödinger-Gleichung kann also nicht erwartet werden, daß diese eine höhere Regularität haben als die von uns bewiesene: $u \in H_{\text{mix}}^{s,1}$ genau dann, wenn $s < 3/4$.

3.3 Approximation von Wellenfunktionen

In diesem Abschnitt möchten wir abschließend kurz die Implikationen der in dieser Arbeit bewiesenen Regularitätsaussagen im Kontext der numerischen Analysis skizzieren.

Die numerische Behandlung der elektronischen Schrödinger-Gleichung mit herkömmlichen Diskretisierungsmethoden gestaltet sich aufgrund des *Fluches der Dimension* als ausgesprochen schwierig und ist in den meisten Fällen nicht durchführbar: Ein System mit N Elektronen führt schon bei einer vollen Diskretisierung mit beispielsweise 10^2 Gitterpunkten in jeder Raumrichtung auf ein zu lösendes System mit 10^{6N} Unbekannten, was schon für niedrige N nicht mehr beherrschbar ist. Aus diesem Grund haben sich in der Praxis vor allem Methoden zur Lösung der Schrödinger-Gleichung durchgesetzt, die weniger auf einer direkten Diskretisierung der Gleichung beruhen, als vielmehr auf vereinfachten Modellen basieren wie beispielsweise Dichtefunktional- oder auch Hartree-Fock-Methoden ([18, 44, 66, 67]). Mit diesen Techniken ist es möglich, praxisrelevante Systeme zu modellieren, jedoch besitzen sie unter anderem zumeist den inhärenten Nachteil, daß sie auf vereinfachten Modellen beruhen, ihre Genauigkeit somit durch diesen Modellierungsfehler beschränkt sein kann. Für viele Anwendungen ist die Güte der resultierenden Lösungen durchaus ausreichend, in gewissen Situationen stellt dies jedoch eine echte Einschränkung dar. Mittels einer direkten Approximation der Schrödinger-Gleichung ließen sich – zumindest theoretisch – die Wellenfunktionen mit beliebiger Güte näherungsweise berechnen, ohne jeweils auf Anpassungen des Modells oder der Ansätze angewiesen zu sein. Neben grundsätzlichem theoretischen Interesse haben entsprechende Verfahren somit auch praktische Relevanz.

Eine Methode hierzu ist es, nicht auf den vollen Diskretisierungsgittern zu rechnen, sondern sich der Theorie der sogenannten Dünne Gitter zu bedienen. Auf Anfängen in den 1960er Jahren basierend wird sie seit den 1990er Jahren auch zur Lösung partieller Differentialgleichungsprobleme verwendet ([13, 111]). Grundidee ist hierbei, daß für Funktionen, die gewisse anisotrope Regularität besitzen, a priori Diskretisierungsschemata konstruiert werden können, die bei vergleichbarer Genauigkeit substantiell weniger Freiheitsgrade besitzen, der numerische Aufwand sich also fundamental verringern läßt. Aus diesem Grunde sind in den letzten Jahren auf Dünne Gittern basierende Methoden auch zur numerischen Behandlung der Schrödinger-Gleichung erdacht worden (beispielsweise [27, 35, 37, 110]).

Wir stellen kurz die Grundidee anhand sogenannter *hyperbolischer Kreuze*

nach [106] vor. Ist eine Funktion $u \in H_{\text{mix}}^{s,1}$ gegeben, so ist also

$$\int (1 + |\omega|^2) \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|^2)^s |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega < \infty.$$

Dies bedeutet unter anderem, daß für wachsendes $(1 + |\omega_i|^2)$ die Fourier-Transformierte $|\hat{u}|$ hinreichend schnell fallen muss, der betragsmäßige Hauptanteil von \hat{u} also in dem Bereich konzentriert ist, in dem $\prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|^2)$ klein ist. Die Rate des Abfalls von $|\hat{u}|$ und damit das Volumen dieses Bereiches wird gerade durch den Parameter s , also durch die anisotrope Sobolev-Regularität bestimmt. Diese relevanten Gebiete bilden nun sogenannte *hyperbolische Kreuze*, genauer können wir eine Folge solcher Bereiche für $L \in \mathbb{N}$ durch

$$\Omega_L := \left\{ \omega \in \mathbb{R}^{3N} \mid \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|^2) \leq 4^L \right\}$$

definieren. Dementsprechend approximieren wir $u \in H_{\text{mix}}^{s,1}$ durch den Anteil u_L , der im Fourierraum in Ω_L liegt, $u_L := \mathcal{F}^{-1}(\mathbb{1}_{\Omega_L} \hat{u})$. Es folgt unmittelbar, daß der H^1 -Approximationsfehler durch

$$\|u - u_L\|_1 \leq \frac{1}{2^{Ls}} \|u\|_{\text{mix},s,1}$$

abgeschätzt werden kann.

Im Falle isotroper Sobolev-Regularität, $\tilde{u} \in H^{\tilde{s}+1}$, also

$$\int \left(\sum_{i=1}^N (1 + |\omega_i|^2) \right)^{\tilde{s}+1} |(\mathcal{F}\tilde{u})(\omega)|^2 d\omega < \infty,$$

wäre das entsprechende Diskretisierungsgebiet durch eine Kugel

$$\tilde{\Omega}_L := \left\{ \omega \in \mathbb{R}^{3N} \mid \sum_{i=1}^N (1 + |\omega_i|^2) \leq 4^L \right\}$$

gegeben, um für den entsprechenden Anteil \tilde{u}_L die Abschätzung

$$\|\tilde{u} - \tilde{u}_L\|_1 \leq \frac{1}{2^{L\tilde{s}}} \|\tilde{u}\|_{\tilde{s}+1}$$

zu erreichen. Die entscheidende Beobachtung ist hier, daß ein hyperbolisches Kreuz Ω_L im Vergleich zur Kugel $\tilde{\Omega}_L$ für wachsende N immer kleineres Volumen besitzt. Eine im Sinne anisotroper Sobolev-Räume glatte Funktion $u \in H_{\text{mix}}^{s,1}$ ist

also im Vergleich zu einer isotrop-glatten Funktion $u \in H^{s+1}$ im Fourierbereich auf einem asymptotisch immer kleineren Gebiet konzentriert.

Zerlegt man das Gebiet Ω_L (beziehungsweise ein geeignet angepasstes Gebiet) und damit u_L nun geeignet weiter und stellt man die resultierenden Teilfunktionen als Fourierreihen dar, so kann die Gesamtmenge der resultierenden Ansatzfunktionen als unendlich ausgedehntes Dünnes Gitter aufgefasst werden. Auch wenn eine solche Darstellung im Vergleich zu einer vollen Diskretisierung sehr effizient ist, so sind zur Approximation von u_L noch immer unendlich viele Ansatzfunktionen notwendig. Um zu einer tatsächlichen – endlichen – Diskretisierung mit vergleichbaren Approximationseigenschaften zu gelangen, muss die Funktion u und damit u_L zusätzliche Regularitätseigenschaften im Fourierbereich besitzen. Eine hierzu hinreichende solche Eigenschaft ist nun gerade, daß $u(x)$ im Ortsbereich exponentiell abklingt für $|x| \rightarrow \infty$, u also in einem exponentiell gewichteten anisotropen Sobolev-Raum liegt. Gerade dies konnte in Satz 3.1.5 für die Eigenfunktionen der elektronischen Schrödinger-Gleichung gezeigt werden.

Eine solche exponentiell gewichtete anisotrope Sobolev-Regularität kann nun ausgenutzt werden, um ausgehend von den obigen Überlegungen explizite Approximationsschemata zu konstruieren. Hierbei wird die Güte der Approximation – wie zu erwarten ist – von der anisotropen Regularität von u , also durch den Parameter s bestimmt. Ausgehend von auf Wavelets basierenden dünnen Gittern konnte Zeiser beispielsweise ein Approximationsschema entwickeln, in dem sich der H^1 -Approximationsfehler in der Zahl n der Unbekannten asymptotisch durch $n^{-s/3}$ abschätzen lässt ([110]). Die bisher bekannte $H_{\text{mix}}^{1/2,1}$ -Regularität einer Eigenfunktion der Schrödinger-Gleichung führt somit auf eine asymptotische Approximationsrate von $n^{-1/6}$. Die verbesserte, optimale Regularität zeigt, daß hier eine Rate von annähernd $n^{-1/4}$ erwartet werden kann.

In jüngster Zeit nun rücken des weiteren nichtlineare Approximationsschemata und adaptive dünne Gitter in den Fokus der Aufmerksamkeit [28,40]. Die Analyse derartiger Methoden benötigt zumeist über die Ergebnisse dieser Arbeit hinaus Regularitätsaussagen in Bestapproximationsräumen, welche eng gekoppelt sind mit der Besov-Regularität der elektronischen Wellenfunktionen.

Anhang

A.1 Hardy-Ungleichungen

Die Hardy-Ungleichung ist ein altbekanntes und wichtiges Hilfsmittel der Analysis und insbesondere der Theorie der (gewichteten) Sobolev-Räume. Sie stellt in ihrer einfachsten Form das wichtigste Hilfsmittel schon zum Beweis der Wohldefiniertheit und Beschränktheit des Hamilton-Operators dar, wir benötigen Sie darüber hinaus an zentraler Stelle in den Beweisen des Abschnittes 2.4.

In ihrer einfachsten, eindimensionalen Version lautet die Hardy-Ungleichung

$$\int_0^\infty \left(\frac{1}{x} \int_0^x f(t) dt \right)^p dx \leq \left(\frac{p}{p-1} \right)^p \int_0^\infty f(x)^p dx$$

für $1 < p$ und $f \geq 0$ und wurde bereits in den 1920er Jahren von Hardy gefunden ([42]) und seitdem in verschiedenste Richtungen verallgemeinert ([62, 64, 65]).

Bei der Frage nach einer allgemeinen, mehrdimensionalen Variante der Hardy-Ungleichung ist man mit der Frage konfrontiert, für welche Funktionen eine solche gelten kann. Wir wollen hier nicht auf die allgemeinst mögliche Versionen eingehen, für derartige Fragen verweisen wir auf die angegebene Literatur, und nehmen jedenfalls immer an, daß die zugrundeliegende Funktion u in $\mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$ liegt. Dann gelten zunächst folgenden Abschätzungen ([4, 68, 102]):

Für $s < d/2$ ist

$$\int \frac{u(x)^2}{|x|^{2s}} dx \leq c_s \int \frac{|\nabla u(x)|^2}{|x|^{2s-2}} dx \quad (\text{A.1.1})$$

und

$$\int \frac{u(x)^2}{|x|^{2s}} dx \leq c_s \int |\omega|^{2s} |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega. \quad (\text{A.1.2})$$

Die Einschränkung auf $s < d/2$ ist hier fundamental wichtig, da sonst im allgemeinen die linke Seite singularär wird, der Integrand somit nicht mehr lokal in \mathbb{R}^d integrierbar ist. Auch auf die von s und d abhängenden Konstanten c_s wollen wir hier nicht genauer eingehen und verweisen auf [102] und [78], in denen weitgehende Verallgemeinerungen zu finden sind sowie auf die Referenzen in [22]. Insbesondere finden sich dort L^p -Versionen von (A.1.1) und genaue Untersuchungen der entsprechenden Konstanten.

Für $s > d/2$ gelten die angegebenen Versionen im allgemeinen nicht mehr, hier müssen weitergehende Anforderungen an das Verhalten von u an der Singularität, also am Ursprung, gestellt werden: Für glatte $u \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$ gilt ([102]):

$$\int \frac{|u(x) - \sum_{|\alpha| \leq [s-d/2]} (\alpha!)^{-1} (D^\alpha u)(0) x^\alpha|^2}{|x|^{2s}} dx \leq c_s \int |\omega|^{2s} |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega. \quad (\text{A.1.3})$$

Verschwundet also insbesondere u am Ursprung, so gilt (A.1.2) sogar für $s < d/2 + 1$.

Wir benötigen hier zunächst insbesondere die beiden Spezialfälle $s = 2$ und $s = 4$ in \mathbb{R}^3 , welche

$$\int \frac{u(x)^2}{|x|^2} dx \leq 4 \int |\nabla u(x)|^2 dx, \quad u \in \mathcal{D}, \quad (\text{A.1.4})$$

und

$$\int \frac{u(x)^2}{|x|^4} dx \leq 4 \int \frac{|\nabla u(x)|^2}{|x|^2} dx, \quad u \in \mathcal{D}, u(0) = 0 \quad (\text{A.1.5})$$

lauten und beispielsweise explizit auch in [105] bewiesen werden, siehe ansonsten auch [47].

Zur Behandlung der elektronischen Hamilton-Operatoren benötigen wir „Zwei-Teilchen-Varianten“ der Hardy-Ungleichung, es sei somit u eine glatte Funktionen, die auf \mathbb{R}^6 definiert ist, $u \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^6)$. Die Argumente bezeichnen wir wieder mit $x, y \in \mathbb{R}^3$, desweiteren schreiben wir $\phi(x, y) := 1/|x - y|$. Zunächst folgt aus (A.1.4):

$$\begin{aligned} \int \phi^2 u^2 d(x, y) &= \int \frac{u^2(x, y)}{|x - y|^2} d(x, y) \lesssim \int |\nabla_x u(x, y)|^2 d(x, y), \\ \int \phi^2 u^2 d(x, y) &= \int \frac{u^2(x, y)}{|x - y|^2} d(x, y) \lesssim \int |\nabla_y u(x, y)|^2 d(x, y) \end{aligned} \quad (\text{A.1.6})$$

und hieraus dann

$$\begin{aligned} \int \phi^2 u^2 d(x, y) &= \int \frac{u^2(x, y)}{|x - y|^2} d(x, y) \\ &\lesssim \int (|\nabla_x u(x, y)|^2 + |\nabla_y u(x, y)|^2) d(x, y) \\ &= 2|u|_1^2. \end{aligned} \quad (\text{A.1.7})$$

Gilt sogar $u(x, y) = 0$ für $x = y$, so können wir aus (A.1.6) und (A.1.5) auf

$$\begin{aligned} \int \phi^4 u^2 d(x, y) &= \int \frac{u^2(x, y)}{|x - y|^4} d(x, y) \\ &\lesssim \sum_{k,l=1}^3 \int ((\partial_{x_k y_l} u)(x, y))^2 d(x, y) \\ &\leq \|u\|_{\text{mix},1,0}^2 \end{aligned} \quad (\text{A.1.8})$$

schließen.

Diese Abschätzung in ganzzahligen anisotropen Sobolev-Räumen ist für unsere Belange jedoch zu ungenau, wir benötigen gebrochene Varianten. Ausgangspunkt ist hierbei zunächst (A.1.2). Es sei also $s < 3/2$ und $u \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^6)$. Aus (A.1.2) folgt dann sowohl

$$\int \phi^{2s} u^2 d(x, y) \lesssim \int |\omega_1|^{2s} |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega \leq \int (1 + |\omega_1|^2)^s |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega,$$

als auch

$$\int \phi^{2s} u^2 d(x, y) \lesssim \int |\omega_2|^{2s} |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega \leq \int (1 + |\omega_2|^2)^s |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega.$$

Wir bemerken nun, daß beide Seiten jeweils als gewichtete L^2 -Normen interpretiert werden können, beide Abschätzungen also als Beschränktheitsaussagen für die entsprechenden Einbettungen. Nun ist es leicht zu zeigen, daß die reelle Interpolation zwischen L^2 -Räumen mit Gewichten w_1 beziehungsweise w_2 in einen gewichteten L^2 -Raum mit Gewicht $w_1^{1-\theta} w_2^\theta$ resultiert (für einen Beweis verweisen wir auf [92] und auf den sehr ähnlichen Beweis des Satzes 2.2.1). Aus dem Standardresultat der Interpolationstheorie erhalten wir somit für $\theta = 1/2$:

$$\int \phi^{2s} u^2 d(x, y) \lesssim \int (1 + |\omega_1|^2)^{s/2} (1 + |\omega_2|^2)^{s/2} |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega = \|u\|_{\text{mix},s/2,0}, \quad (\text{A.1.9})$$

Gilt darüber hinaus $u(x, y) = 0$ für $x = y$, welches beispielsweise der Fall ist, wenn u antisymmetrisch ist, können wir eine ähnliche Überlegung sogar für $s < 5/2$ anstellen. In diesem Fall schließen wir aus

$$\int \phi^{2s} u^2 d(x, y) \lesssim \int |\omega_1|^{2s} |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega \leq \int (1 + |\omega|^2)(1 + |\omega_1|^2)^{s-1} |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega$$

beziehungsweise

$$\int \phi^{2s} u^2 d(x, y) \lesssim \int (1 + |\omega|^2)(1 + |\omega_2|^2)^{s-1} |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega$$

mittels Interpolation auf

$$\begin{aligned} \int \phi^{2s} u^2 d(x, y) &\lesssim \int (1 + |\omega|^2)(1 + |\omega_1|^2)^{(s-1)/2}(1 + |\omega_2|^2)^{(s-1)/2} |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega \\ &= \|u\|_{\text{mix},(s-1)/2,1}. \end{aligned} \tag{A.1.10}$$

A.2 Abschneidefunktionen

In den Beweisen der Dichtheitsaussagen für anisotrope Sobolev-Räume in Abschnitt 2.3 haben wir Gebrauch gemacht von gewissen Abschätzungen der Ableitungen der dort betrachteten Abschneidefunktionen. Diese Aussagen sind im wesentlichen intuitiv völlig einsichtig, die genauen Beweise jedoch recht technisch, wir tragen diese hier nun nach. Hierbei geht es im wesentlichen darum, partielle Ableitungen von zusammengesetzten Funktionen auszurechnen. Hierzu benötigen wir eine mehrdimensionale Version der Kettenregel. Eine solche wird zumeist *verallgemeinerte Formel von Faá di Bruno* genannt, siehe hierzu [20, 32, 45]. In der Notation aus [20] kann eine solche wie folgt angegeben werden.

Es seien $u : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ und $v : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ hinreichend oft differenzierbare Funktionen. Die Komponenten von u seien $u = (u_1, \dots, u_m)$ benannt, die Koordinaten in \mathbb{R}^n bezeichnen wir mit $\mathbb{R}^n \ni x = (x_1, \dots, x_n)$, jene in \mathbb{R}^m mit $\mathbb{R}^m \ni z = (z_1, \dots, z_m)$. Für einen beliebigen Multiindex $\alpha \in \mathbb{N}^n$ gilt dann für $x_0 \in \mathbb{R}^n$ mit $y_0 := u(x_0)$:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial^{|\alpha|}(v \circ u)}{\partial x^\alpha}(x_0) \\ &= \sum_{\substack{\lambda \in \mathbb{N}^m \\ 1 \leq |\lambda| \leq |\alpha|}} \frac{\partial^{|\lambda|} v}{\partial z^\lambda}(z_0) \sum_{s=1}^{|\alpha|} \sum_{P(s, \alpha, \lambda)} \alpha! \prod_{j=1}^s \frac{1}{k_j! (l_j!)^{|k_j|}} \left(\frac{\partial^{l_j} u}{\partial x^{l_j}}(x_0) \right)^{k_j}, \end{aligned} \tag{A.2.1}$$

wobei mit

$$\left(\frac{\partial^{l_j} u}{\partial x^{l_j}}(x_0) \right)^{k_j} = \left(\frac{\partial^{l_j} u_1}{\partial x^{l_j}}(x_0), \dots, \frac{\partial^{l_j} u_m}{\partial x^{l_j}}(x_0) \right)^{k_j}$$

und

$$\begin{aligned} P(s, \alpha, \lambda) &= \{(k_1, \dots, k_s, l_1, \dots, l_s) \mid k_i \in \mathbb{N}^m, l_i \in \mathbb{N}^n, |k_i| > 0, \\ &0 \prec l_1 \prec \dots \prec l_s, \sum_{i=1}^s k_i = \lambda, \sum_{i=1}^s |k_i| l_i = \alpha\} \end{aligned}$$

bezeichnet sind, zur Ordnung $\alpha \prec \beta$ siehe [20].

Es sei nun eine glatte Funktion $\tilde{w} : [0, \infty) \rightarrow [0, 1]$ mit

$$\tilde{w}(r) = \begin{cases} 0, & \text{falls } r < 1/2, \\ 1, & \text{falls } r > 1, \end{cases}$$

vorgegeben. Wir arbeiten hier im \mathbb{R}^6 , welchen wir mit $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ identifizieren. Die entsprechenden Variablen nennen wir $(x, y) \in \mathbb{R}^6$, $x, y \in \mathbb{R}^3$. Weiterhin sei $w_n : \mathbb{R}^6 \rightarrow \mathbb{R}$ für $n \in \mathbb{N}$ definiert durch

$$w_n(x, y) := 1 - \tilde{w}(n|x - y|), \quad (x, y) \in \mathbb{R}^6.$$

Diese Funktionen sind komponiert aus dem glatten Teil w selbst und der Betragsfunktion, wir benötigen somit zunächst Abschätzungen über die Ableitungen der Funktion

$$(x, y) \mapsto |x - y|,$$

welche auch an anderer Stelle von Interesse sind.

Lemma A.2.1. *Es sei*

$$f : \mathbb{R}^6 \setminus \{(x, y) \in \mathbb{R}^6 \mid x = y\} \rightarrow \mathbb{R}, \quad f(x, y) := |x - y|.$$

Für beliebige Multiindizes $\alpha \in \mathbb{N}^6$ gibt es $C > 0$ mit

$$|D^\alpha f| \leq C f^{1-|\alpha|}.$$

Beweis. Es sei ein Multiindex $\alpha \in \mathbb{N}^6$ vorgegeben. Für $|\alpha| = 0$ ist nichts zu zeigen. Es sei also $|\alpha| > 0$. Wir setzen $u : \mathbb{R}^6 \rightarrow \mathbb{R}^3$, $u(x, y) = x - y$ und $v : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, $v(z) = |z|$, also $f = v \circ u$. Um die Ableitungen von f zu bestimmen, verwenden wir (A.2.1). Da hier nun für beliebige Multiindizes $\beta \in \mathbb{N}^6$, $|\beta| \geq 1$, $1 \leq i \leq 3$ gilt:

$$|D^\beta u_i| = 0, \text{ falls } |\beta| > 1 \text{ und } |D^\beta u_i| = 1, \text{ falls } |\beta| = 1,$$

so gibt es für

$$\lambda \in \mathbb{N}^3, \quad 1 \leq |\lambda| \leq |\alpha|, \quad s \in \{1, \dots, |\alpha|\}$$

und

$$(k_1, \dots, k_s, l_s, \dots, l_s) \in P(s, \alpha, \lambda)$$

genau eine der beiden folgenden Möglichkeiten:

Entweder es gibt $j \in \{1, \dots, s\}$ mit $|l_j| > 1$, dann ist der entsprechende Faktor und damit auch der ganze Summand gleich Null. Oder aber es gilt $|l_j| = 1$ für

alle $j = 1, \dots, s$. Dies aber kann dann wegen $|\alpha| = \sum_{i=1}^s |k_i| |l_i| = \sum_{j=1}^s |k_j|$ und $|\lambda| = \sum_{j=1}^s |k_j|$ nur der Fall sein, falls $|\lambda| = |\alpha|$. Wir erhalten somit:

$$|D^\alpha(v \circ u)(x, y)| \leq C \sum_{\substack{\lambda \in \mathbb{N}^3 \\ |\lambda| = |\alpha|}} |(D^\lambda v)(x - y)|.$$

Es reicht also aus zu zeigen, daß für beliebige $\lambda \in \mathbb{N}^3$

$$|(D^\lambda v)| \leq C v^{1-|\lambda|}.$$

Hierzu schreiben wir $\tilde{u} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, $\tilde{u}(z) = z_1^2 + z_2^2 + z_3^2$ und $\tilde{v} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $\tilde{v}(r) = r^{1/2}$, also $v = \tilde{v} \circ \tilde{u}$. Die Kettenregel (A.2.1) können wir in diesem Fall wie folgt schreiben (man beachte $m = 1$, für diesen speziellen Fall siehe auch [41]):

$$D^\lambda(\tilde{v} \circ \tilde{u}) = \sum_{l=1}^{|\lambda|} (\tilde{v}^{(l)} \circ \tilde{u}) \sum_{s=1}^{|\lambda|} \sum_{P(s, \lambda, l)} \lambda! \prod_{j=1}^s \frac{(D^{l_j} \tilde{u})^{k_j}}{k_j! (l_j!)^{k_j}}. \quad (\text{A.2.2})$$

Nun ist $\tilde{v}^{(l)}(r) = c_l 1/r^{\frac{2l-1}{2}}$, also $\tilde{v}^{(l)} \circ \tilde{u} = v^{1-2l}$. Es verbleibt, die Ableitungen von \tilde{u} genauer abzuschätzen. Dazu bemerken wir zunächst, daß

$$D^{l_j} \tilde{u}(z) = \begin{cases} 0, & \text{falls } |l_j| > 2, \\ 0 \text{ oder } 2, & \text{falls } |l_j| = 2 \\ z_{i_j} & \text{falls } |l_j| = 1. \end{cases}$$

Für ein beliebiges $s \in \{1, \dots, |\lambda|\}$ und $(k_1, \dots, k_s, l_1, \dots, l_s) \in P(s, \lambda, l)$ tritt genau einer der beiden folgenden Fälle ein: Entweder gibt es $j \in \{1, \dots, s\}$ mit $|l_j| > 2$ oder es gilt $|l_j| \leq 2$ für alle $j = 1, \dots, s$. Im ersten Fall verschwindet einer der Faktoren in (A.2.2) und damit der entsprechende Summand. Setzen wir $M_i = \{j \in \{1, \dots, s\} \mid |l_j| = i\}$, so folgt im zweiten Fall $\{1, \dots, s\} = M_1 \cup M_2$ und $l = \sum_{j \in M_1} k_j + \sum_{j \in M_2} k_j$, also $|\lambda| = \sum_{j \in M_1} k_j + 2 \sum_{j \in M_2} k_j$ und somit

$$|\lambda| = 2l - \sum_{j \in M_1} k_j.$$

Dieser zweite Fall kann also für $2l < |\lambda|$ nicht auftreten, weshalb die entsprechenden Summanden sämtlich verschwinden. Für $2l = |\lambda|$ ist hier dann $|M_1| = 0$, das heißt, alle auftretenden Ableitungen von \tilde{u} sind von zweiter Ordnung und

deshalb konstant. Im Fall $2l > |\lambda|$ schließen wir wie folgt:

$$\begin{aligned}
\left| \prod_{j=1}^s \frac{(D^{l_j} \tilde{u}(z))^{k_j}}{k_j! (l_j!)^{k_j}} \right| &= \left| \prod_{j \in M_1} \frac{(D^{l_j} \tilde{u}(z))^{k_j}}{k_j! (l_j!)^{k_j}} \right| \left| \prod_{j \in M_2} \frac{(D^{l_j} \tilde{u}(z))^{k_j}}{k_j! (l_j!)^{k_j}} \right| \\
&= C \left| \prod_{j \in M_1} \frac{(D^{l_j} \tilde{u}(z))^{k_j}}{k_j! (l_j!)^{k_j}} \right| \\
&\leq C \frac{\prod_{j \in M_1} |z_{i_j}|^{k_j}}{\prod_{j \in M_1} k_j! (l_j!)^{k_j}} \\
&\leq C \prod_{j \in M_1} |z|^{k_j} = C |z|^{\sum_{j \in M_1} k_j} \\
&= C |z|^{2l - |\lambda|} = C v(z)^{2l - |\lambda|}.
\end{aligned}$$

Zusammengenommen erhalten wir somit schließlich wie gewünscht

$$|D^\lambda(\tilde{v} \circ \tilde{u})| \leq C \sum_{l=|\lambda|/2}^{|\lambda|} v^{1-2l} \cdot v^{2l-|\lambda|} \leq C v^{1-|\lambda|}.$$

□

Hieraus können wir nun die benötigten Abschätzungen der Ableitungen der Abschneidefunktion w_n gewinnen.

Lemma A.2.2. *Für beliebige Multiindizes $\alpha \in \mathbb{N}^6$ gibt es $C > 0$ mit*

$$\|D^\alpha w_n\|_\infty \leq C n^{|\alpha|}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Beweis. Es sei ein Multiindex $\alpha \in \mathbb{N}^6$ vorgegeben. Für $|\alpha| = 0$ ist nichts zu zeigen. es sei also $|\alpha| > 0$. Dann gilt

$$D^\alpha w_n(x, y) = 0, \quad \text{falls } |x - y| < \frac{1}{2n} \text{ oder } |x - y| > \frac{1}{n}. \quad (\text{A.2.3})$$

Für festes n sei $g : \mathbb{R}^6 \rightarrow \mathbb{R}$, $g(x, y) := n|x - y| = nf(x, y)$. Dann ist

$$D^\alpha w_n = -D^\alpha(\tilde{w} \circ g).$$

Da wir $|x - y| \geq 1/2n$ annehmen können, so ist auch g glatt. Die Kettenregel (A.2.1) wird hier zu

$$D^\alpha(\tilde{w} \circ g) = \sum_{l=1}^{|\alpha|} (\tilde{w}^{(l)} \circ g) \sum_{s=1}^{|\alpha|} \sum_{P(s, \alpha, l)} \alpha! \prod_{j=1}^s \frac{(D^{l_j} g)^{k_j}}{k_j! (l_j!)^{k_j}}$$

und da alle Ableitungen von \tilde{w} beschränkt sind, reicht es aus, für $\beta \in \mathbb{N}^6$, $1 \leq |\beta|$

$$|D^\beta g(x, y)| \leq cn^{|\beta|}, \quad (x, y) \in \mathbb{R}^6, 1/2n \leq |x - y| \leq 1/n,$$

zu zeigen. Wir können hier also $|x - y| \leq 1/n \leq 1$ und $1/|x - y| \leq 2n$ abschätzen, womit diese Behauptung nun unmittelbar aus dem vorangegangenen Lemma A.2.1 folgt. \square

A.3 Interpolation von Banach-Räumen

Das Standardproblem der Interpolationstheorie von Banach-Räumen ist das folgende. Vorgegeben seien Banach-Räume X, Y, V, W und ein geeignet definierter Operator T , der sowohl stetig von X nach V als auch stetig von Y nach W abbildet. Gesucht ist nun eine Methode, die es erlaubt, neue Banach-Räume $[X, Y]_\theta$ und $[V, W]_\theta$, welche in einem gewissen Sinne „zwischen“ X und Y (beziehungsweise V und W) liegen, derart zu konstruieren, daß T als Abbildung von $[X, Y]_\theta$ nach $[V, W]_\theta$ stetig bleibt. Es ist eine Vielzahl solcher Konstruktionsverfahren erdacht worden, welche sich in zwei Gruppen aufteilen lassen: Zum einen sind dies komplexe Methoden, welche auf funktionentheoretischen Überlegungen beruhen und auf verschiedenen Wegen von Calderón [16, 17], Lions [72] und Krejn [61] eingeführt wurden (siehe auch [9, 96]). Die zweite Gruppe sind die sogenannten reellen Interpolationsmethoden. Diese umfasst eine Vielzahl von verschiedenen Verfahren (Lions' und Peetre's „mean method“ [74], Lions' „trace method“ [71], Gagliardo [33] und andere), welche jedoch sämtlich äquivalent sind zur Interpolation via sogenannter K -Funktionale, die, etwas später eingeführt, von Peetre ([85, 86]) geprägt wurde. Es gibt einige Abhandlungen zu diesem Thema, allen voran möchten wir [9, 15] erwähnen, sowie [1, 5, 6, 8, 24, 77, 86, 89, 96]. Diese Quellen unterscheiden sich jedoch stark hinsichtlich Notation, Definitionen und der generellen Herangehensweise sowie auch der Auswahl der betrachteten und bewiesenen Aussagen. Da jedoch die Interpolation ein wesentliches Hilfsmittel in dieser Arbeit darstellt, möchten wir im folgenden die grundlegenden Ideen und wichtigen Resultate dieser Theorie in einer einheitlichen Form und Sprache darstellen, die für unsere Zwecke geeignet erscheint.

Grundlagen

Es seien X und Y zwei Banach-Räume, die beide in einen Vektorraum \mathcal{X} eingebettet sind. In dieser Situation ist die Summe $X + Y$ wohldefiniert und wir nennen das Paar $\{X, Y\}$ ein *Interpolutionspaar*. Es ist möglich, wenngleich für unsere Belange nicht nötig, die Theorie auf semi- oder quasinormierte Räume

auszudehnen. Die Räume $X + Y$ und $X \cap Y$ seien versehen mit den Normen

$$\|u\|_{X+Y} := \inf_{\substack{u=x+y \\ x \in X, y \in Y}} (\|x\|_X + \|y\|_Y), \quad u \in X + Y$$

beziehungsweise

$$\|v\|_{X \cap Y} := \max\{\|v\|_X, \|v\|_Y\}, \quad v \in X \cap Y.$$

Dann sind $X + Y$ und $X \cap Y$ Banach-Räume mit

$$X \cap Y \hookrightarrow X, Y \hookrightarrow X + Y.$$

Für $u \in X + Y$ und $t > 0$ definieren wir nun das K -Funktional via

$$K(u, t) = K(u, t, X, Y) := \inf_{\substack{u=x+y \\ x \in X, y \in Y}} (\|x\|_X + t\|y\|_Y).$$

Das folgende Lemma enthält einige Eigenschaften, die sich ohne Mühe aus dieser Definition ableiten lassen.

Lemma A.3.1. *Für festes $t > 0$ ist das Funktional $K(\cdot, t)$ eine zu $\|\cdot\|_{X+Y}$ äquivalente Norm auf $X + Y$. Für $s, t > 0$ gilt*

$$\min\{1, t/s\}K(u, s) \leq K(u, t) \leq \max\{1, t/s\}K(u, s). \quad (\text{A.3.1})$$

Für fixiertes $u \in X + Y$ ist die Abbildung $K(u, \cdot)$ positiv, monoton wachsend und stetig. Schließlich definieren für $1 \leq p < \infty$ die Funktionale

$$\inf_{\substack{u=x+y \\ x \in X, y \in Y}} (\|x\|_X^p + t^p\|y\|_Y^p)^{1/p}$$

zum K -Funktional äquivalente Ausdrücke.

Mit Hilfe des K -Funktionals können wir nun die Interpolationsräume als gewisse Unterräume von $X + Y$ definieren:

Definition A.3.2. *Für $-\infty < \theta < \infty$ und $1 \leq q \leq \infty$ definieren wir für $u \in X + Y$*

$$\|u\|_{\theta, q} := \begin{cases} \left(\int_0^\infty (t^{-\theta} K(u, t))^q \frac{dt}{t} \right)^{1/q}, & 1 \leq q < \infty \\ \sup_{0 < t < \infty} t^{-\theta} K(u, t), & q = \infty \end{cases}$$

und damit die Räume

$$[X, Y]_{\theta, q} := \{u \in X + Y \mid \|u\|_{\theta, q} < \infty\}.$$

Lemma A.3.3. *Die Räume $[X, Y]_{\theta, q}$ sind nichttrivial nur, falls $1 \leq q < \infty$ und $0 < \theta < 1$ oder $q = \infty$ und $0 \leq \theta \leq 1$. In diesen Fällen bilden sie, versehen mit der Norm $\|\cdot\|_{\theta, q}$, Banach-Räume.*

Beweis. Wir beschränken uns auf den Fall $q < \infty$. Dann gilt mit (A.3.1) für $u \in X + Y$

$$\begin{aligned} \|u\|_{\theta, q}^q &= \int_0^\infty (t^{-\theta} K(u, t))^q \frac{dt}{t} \\ &\geq K(u, 1)^q \int_0^\infty t^{-\theta q - 1} \min(1, t)^q dt \\ &= K(u, 1)^q \left(\int_0^1 t^{(1-\theta)q-1} dt + \int_1^\infty t^{-\theta q - 1} dt \right) =: aK(u, 1)^q. \end{aligned} \quad (\text{A.3.2})$$

Die Konstante a ist nur dann endlich, falls $(1 - \theta)q > 0$ und $\theta q > 0$, woraus die erste Behauptung folgt. Es ist nicht schwer zu sehen, daß $[X, Y]_{\theta, q}$ ein normierter Raum ist. Wir erinnern nun daran, daß ein solcher genau dann vollständig ist, wenn jede absolut konvergente Reihe auch konvergiert. Es sei also $(u_n)_n \subset [X, Y]_{\theta, q}$ absolut summierbar. Dann folgt

$$\sum_{n=0}^\infty \|u_n\|_{X+Y} = \sum_{n=0}^\infty K(u_n, 1) \leq a^{1/q} \sum_{n=0}^\infty \|u_n\|_{\theta, q} < \infty$$

und da $X + Y$ vollständig ist, gibt es $u \in X + Y$ mit $u = \sum_{n=0}^\infty u_n$. Hierfür gilt nun aber

$$K(u, t) \leq \sum_{n=0}^\infty K(u_n, t)$$

und dies resultiert in

$$\|u\|_{\theta, q} \leq \sum_{n=0}^\infty \|u_n\|_{\theta, q} < \infty.$$

Also ist u ein Element in $[X, Y]_{\theta, q}$ und

$$\|u - \sum_{n=0}^N u_n\|_{\theta, q} \leq \sum_{n=N}^\infty \|u_n\|_{\theta, q} \rightarrow 0$$

für $N \rightarrow \infty$ und somit ist die Vollständigkeit von $[X, Y]_{\theta, q}$ gezeigt. \square

Im weiteren Verlauf wird eine alternative Definition der Interpolationsräume von großem Nutzen sein, nämlich jene über sogenannte J-Funktionale. Für $u \in X \cap Y$ und $t > 0$ definieren wir das J-Funktional via

$$J(u, t) = J(u, t, X, Y) := \max\{\|u\|_X, t\|u\|_Y\}.$$

Ganz analog zu Lemma A.3.1 ist für festes $u \in X \cap Y$ die Funktion $J(\cdot, u)$ stetig, monoton wachsend und positiv. Für festes $t > 0$ ist $J(t, \cdot)$ eine äquivalente Norm auf $X \cap Y$ und schließlich gelten für $s, t > 0$, $u \in X \cap Y$ die Abschätzungen

$$\min\{1, t/s\}J(u, s) \leq J(u, t) \leq \max\{1, t/s\}J(u, s) \quad (\text{A.3.3})$$

und

$$K(u, t) \leq \min\{1, t/s\}J(u, s). \quad (\text{A.3.4})$$

Aus letzterem folgt

$$J(u, t) \geq \theta(1 - \theta)t^\theta \|u\|_{\theta, q}. \quad (\text{A.3.5})$$

Es sei nun $1 \leq q < \infty$ und $0 < \theta < 1$ oder $q = \infty$ und $0 \leq \theta \leq 1$. Die J-Interpolationsräume $[X, Y]_{\theta, q, J}$ bestehen aus solchen Elementen $u \in X + Y$, die eine Darstellung¹

$$u = \int_0^\infty f(t) \frac{dt}{t} \quad (\text{A.3.6})$$

besitzen, wobei f eine messbare Funktion mit Werten in $X \cap Y$ ist, die

$$\int_0^\infty (t^{-\theta} J(f(t), t))^q \frac{dt}{t} < \infty \quad (\text{A.3.7})$$

erfüllt. Auf $[X, Y]_{\theta, q, J}$ definieren wir die Norm

$$\|u\|_{\theta, q, J} := \inf \left(\int_0^\infty (t^{-\theta} J(f(t), t))^q \frac{dt}{t} \right)^{1/q},$$

wobei sich das Infimum über alle möglichen Darstellungen (A.3.6) erstreckt, die (A.3.7) erfüllen. Wir bemerken, daß wir hier, wie bei K-Funktionalen, auch andere Werte von θ zulassen könnten, die resultierenden Räume dann jedoch trivial werden, das heißt, nur das Nullelement enthalten. Der folgende Äquivalenzsatz besagt nun, daß beide Typen von Interpolationsmethoden dieselben Räume definieren.

Satz A.3.4. *Es sei $0 < \theta < 1$ und $1 \leq q \leq \infty$. Dann ist*

$$[X, Y]_{\theta, q} = [X, Y]_{\theta, q, J}$$

mit äquivalenten Normen.

¹Das Integral ist als Bochnerintegral zu verstehen. Zur Integrationstheorie von Funktionen mit Werten in Banach-Räumen verweisen wir auf [11, 25, 34, 46, 103].

Beweis. Wir beschränken uns auf $q < \infty$, halten zunächst $u \in [X, Y]_{\theta, q, J}$ fest und betrachten eine zulässige Zerlegung $u = \int_0^\infty f(s) ds/s$. Mit (A.3.4) erhalten wir

$$\begin{aligned} K(u, t) &\leq \int_0^\infty K(f(s), t) \frac{ds}{s} \leq \int_0^\infty \min\{1, t/s\} J(f(s), s) \frac{ds}{s} \\ &\leq \int_0^\infty \min\{1, 1/s\} J(f(st), st) \frac{ds}{s} \end{aligned}$$

und damit

$$\begin{aligned} \|u\|_{\theta, q} &\leq \left(\int_0^\infty \left(\int_0^\infty t^{-\theta} \min\{1, 1/s\} J(f(st), st) \frac{ds}{s} \right)^q \frac{dt}{t} \right)^{1/q} \\ &= \int_0^\infty \min\{1, 1/s\} s^\theta \frac{ds}{s} \left(\int_0^\infty (t^{-\theta} J(f(t), t))^q \frac{dt}{t} \right)^{1/q} \\ &= \frac{1}{\theta(1-\theta)} \left(\int_0^\infty (t^{-\theta} J(f(t), t))^q \frac{dt}{t} \right)^{1/q}. \end{aligned}$$

Dies gilt für alle möglichen Darstellungen (A.3.6) und somit folgt

$$\|u\|_{\theta, q} \leq \frac{1}{\theta(1-\theta)} \|u\|_{\theta, q, J}.$$

Es sei nun andererseits $u \in [X, Y]_{\theta, q}$ vorgegeben. Nach der Definition des K-Funktional gibt es dann für jedes $m \in \mathbb{Z}$ Elemente $x_m \in X$ und $y_m \in Y$, so daß $u = x_m + y_m$ ist und

$$\|x_m\|_X + 2^m \|y_m\|_Y \leq 2K(u, 2^m)$$

gilt. Nun gilt aber wegen der Monotonie des K-Funktional für alle $t > 0$

$$t^{-\theta} K(u, t) = \left(\int_t^\infty s^{-\theta q} \frac{ds}{s} \right)^{1/q} K(u, t) \leq \|u\|_{\theta, q}, \quad (\text{A.3.8})$$

woraus hier insbesondere

$$\begin{aligned} \|x_m\|_X &\leq 2^{1+m\theta} \|u\|_{\theta, q}, \\ \|y_m\|_X &\leq 2^{1+m(\theta-1)} \|u\|_{\theta, q} \end{aligned} \quad (\text{A.3.9})$$

folgt. Insbesondere also $\|x_m\|_X \rightarrow 0$ für $m \rightarrow -\infty$ und $\|y_m\|_Y \rightarrow 0$, falls $m \rightarrow \infty$. Nun ist $x_m - x_{m-1} = y_m - y_{m-1} \in X \cap Y$ und wir können $f : (0, \infty) \rightarrow X \cap Y$ definieren durch

$$f(t) := (x_m - x_{m-1})/\ln 2 = (y_m - y_{m-1})/\ln 2, \quad \text{falls } 2^{m-1} \leq t < 2^m.$$

Dann ist f sicherlich meßbar und erfüllt für $M, N \in \mathbb{N}$

$$\begin{aligned} \left\| u - \int_{2^{-M}}^{2^N} f(t) \frac{dt}{t} \right\|_{X+Y} &= \left\| u - \sum_{m=1-M}^N (x_m - x_{m-1}) / \ln 2 \int_{2^{m-1}}^{2^m} \frac{dt}{t} \right\|_{X+Y} \\ &= \left\| u - \sum_{m=1-M}^N (x_m - x_{m-1}) \right\|_{X+Y} \\ &= \|u - x_N + x_{-M}\|_{X+Y} \\ &\leq \|y_N\|_Y + \|x_{-M}\|_X \rightarrow 0 \end{aligned}$$

für $M, N \rightarrow \infty$. Somit definiert f eine zulässige Darstellung von u .

Schließlich folgt mit der Monotonie des K-Funktional, (A.3.1) und (A.3.9) für $2^{m-1} \leq t < 2^m$:

$$\begin{aligned} J(f(t), t) &= \max\{\|f(t)\|_X, t\|f(t)\|_Y\} \leq \|f(t)\|_X + t\|f(t)\|_Y \\ &\lesssim \|x_m\|_X + t\|y_m\|_Y + \|x_{m-1}\|_X + t\|y_{m-1}\|_Y \\ &\leq \|x_m\|_X + 2^m\|y_m\|_Y + 2(\|x_{m-1}\|_X + 2^{m-1}\|y_{m-1}\|_Y) \\ &\lesssim K(u, 2^m) + 2K(u, 2^{m-1}) \\ &\leq 2^m/tK(u, 2^m) + 2K(u, t) \\ &\lesssim K(u, t) \end{aligned}$$

und somit auch $\|u\|_{\theta, q, J} \lesssim \|u\|_{\theta, q}$. □

Wir können nun einige strukturelle Eigenschaften der Interpolationsräume festhalten.

Satz A.3.5. *Es seien $1 \leq q < \infty$ und $0 < \theta < 1$ oder $q = \infty$ und $0 \leq \theta \leq 1$. Dann gelten folgende Aussagen.*

- (i) $[X, Y]_{\theta, q} = [Y, X]_{1-\theta, q}$.
- (ii) $X \cap Y \hookrightarrow [X, Y]_{\theta, q} \hookrightarrow X + Y$. Falls $X = Y$ ist, so gilt $[X, Y]_{\theta, q} = X = Y$.
- (iii) $X \hookrightarrow [X, Y]_{0, \infty}$ und $Y \hookrightarrow [X, Y]_{1, \infty}$.
- (iv) Falls $0 < \theta < 1$ ist und $1 \leq q \leq r \leq \infty$, so gilt

$$[X, Y]_{\theta, 1} \hookrightarrow [X, Y]_{\theta, q} \hookrightarrow [X, Y]_{\theta, r} \hookrightarrow [X, Y]_{\theta, \infty}.$$

- (v) Falls $0 < \theta < 1$ ist und $1 \leq q < \infty$, so ist $X \cap Y$ dicht in $[X, Y]_{\theta, q}$.

Beweis. (i) Die Behauptung folgt aus der Beobachtung

$$K(u, t, X, Y) = tK(u, t^{-1}, Y, X).$$

(ii) Aus (A.3.2) folgt

$$\|u\|_{\theta, q} \geq a^{1/q} K(u, 1) = a^{1/q} \|u\|_{X+Y},$$

also der erste Teil der Behauptung. Die zweite Abschätzung folgt analog aus

$$K(u, t) \leq \min\{1, t\} \|u\|_{X \cap Y}.$$

Die Aussagen für $X = Y$ erhält man hieraus sofort.

(iii) Dies folgt unmittelbar aus der Definition.

(iv) Mit (A.3.8) gilt für $q \leq r$

$$\|u\|_{\theta, r}^r \leq \int_0^\infty (t^{-\theta} K(u, t))^q \frac{dt}{t} \left(\sup_{t>0} t^{-\theta} K(u, t) \right)^{r-q} \lesssim \|u\|_{\theta, q}^r.$$

(v) Für $u \in [X, Y]_{\theta, q} = [X, Y]_{\theta, q, J}$ betrachten wir eine Darstellung der Form (A.3.6), $u = \int_0^\infty f(t) dt/t$. Wir definieren $u_n \in X \cap Y$ via

$$u_n := \int_{1/n}^n f(t) \frac{dt}{t}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Wegen

$$\|u - u_n\|_{\theta, q}^q = \|u - u_n\|_{\theta, q, J}^q \leq \int_{(0, 1/n) \cup (n, \infty)} (t^{-\theta} J(f(t), t))^q \frac{dt}{t} \rightarrow 0$$

für $n \rightarrow \infty$, konvergiert $(u_n)_n$ in $[X, Y]_{\theta, q}$ gegen u woraus die Behauptung folgt. □

Wir beenden diesen Abschnitt mit dem Nachweis, daß die hier konstruierten Interpolationsräume in der Tat das in der Einleitung beschriebene Standardproblem der Interpolationstheorie zu lösen in der Lage sind.

Satz A.3.6. *Es seien $0 < \theta < 1$ und $1 \leq q \leq \infty$ sowie $\{X, Y\}$ und $\{V, W\}$ zwei Interpolationspaare. Weiterhin sei*

$$T : X + Y \rightarrow V + W$$

ein linearer Operator, so daß die Einschränkungen

$$T : X \rightarrow Y \quad \text{and} \quad T : Y \rightarrow W$$

wohldefiniert und beschränkt sind mit den Normen $\|T\|_{X,V}$ bzw. $\|T\|_{Y,W}$. Dann ist auch die Einschränkung

$$T : [X, Y]_{\theta, q} \rightarrow [V, W]_{\theta, q}$$

ein wohldefinierter beschränkter Operator mit Norm

$$\|T\|_{[X, Y]_{\theta, q}, [V, W]_{\theta, q}} \leq \|T\|_{X, V}^{1-\theta} \|T\|_{Y, W}^{\theta}.$$

Beweis. Für $x \in X$ und $y \in Y$ gilt

$$\|Tx\|_V \leq \|T\|_{X, V} \|x\|_X \quad \text{und} \quad \|Ty\|_W \leq \|T\|_{Y, W} \|y\|_Y.$$

Für $u \in [X, Y]_{\theta, q}$ folgt

$$\begin{aligned} K(Tu, t, V, W) &\leq \inf_{u=x+y} (\|Tx\|_V + t\|Ty\|_Y) \\ &\leq \|T\|_{X, V} \inf_{u=x+y} (\|x\|_X + t \frac{\|T\|_{Y, W}}{\|T\|_{X, V}} \|y\|_Y) \\ &= \|T\|_{X, V} K(u, t \frac{\|T\|_{Y, W}}{\|T\|_{X, V}}, X, Y). \end{aligned}$$

Hieraus folgt

$$\begin{aligned} \|Tu\|_{\theta, q}^q &\leq \|T\|_{X, V}^q \int_0^\infty (t^{-\theta} K(u, t \frac{\|T\|_{Y, W}}{\|T\|_{X, V}}, X, Y))^q \frac{dt}{t} \\ &= \|T\|_{X, V}^q \left(\frac{\|T\|_{Y, W}}{\|T\|_{X, V}} \right)^{\theta q} \int_0^\infty (t^{-\theta} K(u, t, X, Y))^q \frac{dt}{t} \\ &= \|T\|_{X, V}^{(1-\theta)q} \|T\|_{Y, W}^{\theta q} \|u\|_{\theta, q}^q. \end{aligned}$$

□

Schließlich erhalten wir hieraus die übliche interpolatorische Ungleichung:

Korollar A.3.7. *Es seien $0 < \theta < 1$ und $1 \leq q \leq \infty$. Dann gilt*

$$\|u\|_{\theta, q} \leq \|u\|_X^{1-\theta} \|u\|_Y^{\theta}$$

für alle $u \in X \cap Y$.

Beweis. Es sei $u \in X \cap Y$. Wir betrachten die Abbildung T , die jedem $\lambda \in \mathbb{C}$ das Element $T\lambda := \lambda u$ zuordnet. Dann ist $\|T\|_{\mathbb{C},X} = \|u\|_X$, $\|T\|_{\mathbb{C},Y} = \|u\|_Y$ und $\|T\|_{\mathbb{C},[X,Y]_{\theta,q}} = \|u\|_{\theta,q}$. Wegen $[\mathbb{C}, \mathbb{C}]_{\theta,q} = \mathbb{C}$ folgt die Behauptung aus Satz A.3.6. \square

Reiterationssatz

Die Interpolation via K-Funktionalen ist stabil in dem Sinne, daß die Interpolation von Interpolationsräumen wieder in Interpolationsräume mündet. Dies ist die Aussage des folgenden wichtigen und häufig nützlichen Reiterations- oder Stabilitätssatzes:

Satz A.3.8. *Es seien $\{X, Y\}$ ein Interpolationspaar und $0 \leq \theta_0, \theta_1 \leq 1$ sowie $1 \leq q_0, q_1 \leq \infty$. Dann gilt für alle $0 < \theta < 1$ und $1 \leq q \leq \infty$*

$$\left[[X, Y]_{\theta_0, q_0}, [X, Y]_{\theta_1, q_1} \right]_{\theta, q} = [X, Y]_{\theta', q},$$

mit $\theta' = (1 - \theta)\theta_0 + \theta\theta_1$.

Beweis. Für $\theta_0 = \theta_1$ ist die Behauptung mit Teil (ii) des Satzes A.3.5 bereits bewiesen. Wir nehmen also $\theta_0 \neq \theta_1$ an. Im weiteren bezeichnen wir $Y_i = [X, Y]_{\theta_i, q_i}$, $i = 0, 1$. Es sei zuerst $u \in [Y_0, Y_1]_{\theta, q} \subseteq Y_0 + Y_1$. Für jede Zerlegung $u = y_0 + y_1$ mit $y_0 \in Y_0$, $y_1 \in Y_1$, gilt mit (A.3.8)

$$\begin{aligned} K(u, t, X, Y) &\leq K(y_0, t, X, Y) + K(y_1, t, X, Y) \\ &\lesssim t^{\theta_0} \|y_0\|_{\theta_0, q_0, X, Y} + t^{\theta_1} \|y_1\|_{\theta_1, q_1, X, Y} \\ &= t^{\theta_0} (\|y_0\|_{\theta_0, q_0, X, Y} + t^{\theta_1 - \theta_0} \|y_1\|_{\theta_1, q_1, X, Y}), \end{aligned}$$

also folgt $K(u, t, X, Y) \lesssim t^{\theta_0} K(u, t^{\theta_1 - \theta_0}, Y_0, Y_1)$. Damit erhalten wir die erste Abschätzung

$$\begin{aligned} \|u\|_{\theta', q, X, Y}^q &= \int_0^\infty (t^{-\theta'} K(u, t, X, Y))^q \frac{dt}{t} \\ &\lesssim \int_0^\infty (t^{\theta_0 - \theta'} K(u, t^{\theta_1 - \theta_0}, Y_0, Y_1))^q \frac{dt}{t} \\ &\sim \int_0^\infty (t^{-\theta} K(u, t, Y_0, Y_1))^q \frac{dt}{t} \\ &= \|u\|_{\theta, q, Y_0, Y_1}^q. \end{aligned}$$

Andererseits sei nun $u \in [X, Y]_{\theta', q} = [X, Y]_{\theta', q, J}$. Wir betrachten eine beliebige Darstellung der Form (A.3.6), also $u = \int_0^\infty f(s) ds/s$, $f : (0, \infty) \rightarrow X \cap Y$. Wir erhalten mit (A.3.5)

$$\|f(t)\|_{\theta_i, q_i, X, Y} \lesssim t^{-\theta_i} J(f(t), t, X, Y), \quad i = 0, 1,$$

und deshalb

$$\begin{aligned} J(f(t), t^{\theta_1 - \theta_0}, Y_0, Y_1) &= \max\{\|f(t)\|_{\theta_0, q_0, X, Y}, t^{\theta_1 - \theta_0} \|f(t)\|_{\theta_1, q_1, X, Y}\} \\ &\lesssim \max\{t^{-\theta_0} J(f(t), t, X, Y), t^{\theta_1 - \theta_0} t^{-\theta_1} J(f(t), t, X, Y)\} \\ &= t^{-\theta_0} J(f(t), t, X, Y). \end{aligned}$$

Wegen $X \cap Y \subset Y_0 \cap Y_1$ definiert f insbesondere auch eine Darstellung von u bezüglich des Paares $\{Y_0, Y_1\}$ und wir erhalten

$$\begin{aligned} \|u\|_{\theta, q, Y_0, Y_1}^q &= \|u\|_{\theta, q, Y_0, Y_1, J}^q \leq \int_0^\infty (t^{-\theta} J(f(t), t, Y_0, Y_1))^q \frac{dt}{t} \\ &\sim \int_0^\infty (t^{\theta_0 - \theta'} J(f(t), t^{\theta_1 - \theta_0}, Y_0, Y_1))^q \frac{dt}{t} \\ &\lesssim \int_0^\infty (t^{\theta_0 - \theta'} t^{-\theta_0} J(f(t), t, X, Y))^q \frac{dt}{t} \\ &= \int_0^\infty (t^{-\theta'} J(f(t), t, X, Y))^q \frac{dt}{t}. \end{aligned}$$

Bilden wir das Infimum über alle möglichen Darstellungen der Form (A.3.6), so folgt schließlich

$$\|u\|_{\theta, q, Y_0, Y_1} \lesssim \|u\|_{\theta', q, X, Y, J} = \|u\|_{\theta', q, X, Y},$$

was zu zeigen war. □

Dualitätssatz

Der Dualitätssatz besagt, daß der Dualraum eines Interpolationsraumes gerade der Interpolationsraum der entsprechenden Dualräume ist.

Satz A.3.9. *Es seien $0 < \theta < 1$ und $1 \leq q < \infty$. Den zu q konjugierten Exponenten bezeichnen wir mit p , also $1/q + 1/p = 1$. Ist dann $X \cap Y$ dicht sowohl in X als auch in Y , so gilt*

$$([X, Y]_{\theta, q})^* = [X^*, Y^*]_{\theta, p} = [Y^*, X^*]_{1 - \theta, p}. \quad (\text{A.3.10})$$

Der Beweis gestaltet sich aufwendiger als jener des Reiterationssatzes und benötigt die beiden folgenden Hilfslemmata.

Lemma A.3.10. *Ist $X \cap Y$ dicht sowohl in X , als auch in Y , so ist $X \cap Y$ dicht in $X + Y$ und $\{X^*, Y^*\}$ ist ein Interpolationspaar. Weiterhin gelten*

$$X^* + Y^* = (X \cap Y)^* \quad \text{und} \quad X^* \cap Y^* = (X + Y)^* \quad (\text{A.3.11})$$

und schließlich

$$K(f, t, X^*, Y^*) = \sup_{0 \neq u \in X \cap Y} \frac{|\langle f, u \rangle|}{J(u, t^{-1}, X, Y)}, \quad f \in X^* + Y^* \quad (\text{A.3.12})$$

sowie

$$J(g, t, X^*, Y^*) = \sup_{0 \neq u \in X + Y} \frac{|\langle g, u \rangle|}{K(u, t^{-1}, X, Y)}, \quad g \in X^* \cap Y^*. \quad (\text{A.3.13})$$

Beweis. Es sei zunächst $u \in X + Y$, $u = x + y$, $x \in X$, $y \in Y$. Es seien weiterhin $(x_n), (y_n) \subset X \cap Y$ mit $\|x - x_n\|_X \rightarrow 0$, $\|y - y_n\|_Y \rightarrow 0$ für $n \rightarrow \infty$. Mit $u_n := x_n + y_n \in X \cap Y$ ist dann

$$\|u - u_n\|_{X+Y} \leq \|x - x_n\|_X + \|y - y_n\|_Y \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

Somit ist $X \cap Y$ dicht auch in $X + Y$. Weiterhin folgt aus den Voraussetzungen, daß sowohl X^* , als auch Y^* dicht sind in $(X \cap Y)^*$ und somit $\{X^*, Y^*\}$ ein Interpolationspaar bilden.

Als nächstes zeigen wir (A.3.12) und damit auch den ersten Teil von (A.3.11). Es sei also $f \in X^* + Y^*$. Für eine beliebige Darstellung $f = f_x + f_y$ mit $f_x \in X^*$, $f_y \in Y^*$ und beliebiges $u \in X \cap Y$ erhalten wir

$$\begin{aligned} |\langle f, u \rangle| &= |\langle f_x, u \rangle + \langle f_y, u \rangle| \\ &\leq \|f_x\|_{X^*} \|u\|_X + \|f_y\|_{Y^*} \|u\|_Y \\ &\leq (\|f_x\|_{X^*} + t \|f_y\|_{Y^*}) \max\{\|u\|_X, t^{-1} \|u\|_Y\}, \end{aligned}$$

also

$$|\langle f, u \rangle| \leq K(f, t, X^*, Y^*) J(u, t^{-1}, X, Y). \quad (\text{A.3.14})$$

Insbesondere folgt für $t = 1$

$$|\langle f, u \rangle| \leq \|f\|_{X^* + Y^*} \|u\|_{X \cap Y},$$

also $\|f\|_{(X \cap Y)^*} \leq \|f\|_{X^* + Y^*}$ und somit $f \in (X \cap Y)^*$. Ist nun $f \in (X \cap Y)^*$, so betrachten wir den Raum $X \times Y$, ausgestattet mit der Norm

$$\|(x, y)\|_{X \times Y} := \max\{\|x\|_X, t^{-1} \|y\|_Y\}, \quad x \in X, y \in Y,$$

und den Unterraum $W \subseteq X \times Y$,

$$W := \{(u, u) \in X \times Y \mid u \in X \cap Y\},$$

sowie das auf W definierte Funktional f_W ,

$$\langle f_W, (u, u) \rangle := \langle f, u \rangle, \quad u \in X \cap Y.$$

Wir setzen für $t > 0$ zur Abkürzung

$$M_t := \sup_{0 \neq u \in X \cap Y} \frac{|\langle f, u \rangle|}{J(u, t^{-1}, X, Y)}$$

und erhalten für $u \in X \cap Y$ die Abschätzung

$$|\langle f_W, (u, u) \rangle| = |\langle f, u \rangle| \leq M_t J(u, t^{-1}, X, Y) = M_t \|(u, u)\|_{X \times Y},$$

also $\|f_W\|_{W^*} \leq M_t$. Nach dem Satz von Hahn-Banach gibt es somit ein Funktional $(f_x, f_y) \in X^* \times Y^* = (X \times Y)^*$ mit $\|(f_x, f_y)\|_{(X \times Y)^*} = \|f_x\|_{X^*} + \|f_y\|_{Y^*} \leq M_t$ und

$$\langle f, u \rangle = \langle f_W, (u, u) \rangle = \langle (f_x, f_y), (u, u) \rangle = \langle f_x, u \rangle + \langle f_y, u \rangle$$

für alle $u \in X \cap Y$ und somit

$$K(f, t, X^*, Y^*) \leq \|f_x\|_{X^*} + \|f_y\|_{Y^*} \leq M_t,$$

woraus mit (A.3.14) die Behauptung (A.3.12) und insbesondere für $t = 1$ auch

$$\|f\|_{X^* + Y^*} \leq \|f\|_{(X \cap Y)^*}$$

und somit $f \in X^* + Y^*$ folgt.

Wir müssen noch (A.3.13) sowie den zweiten Teil von (A.3.12) zeigen. Es sei hierzu zuerst $g \in X^* \cap Y^*$. Für alle $u = x + y \in X + Y$ gilt dann

$$\begin{aligned} |\langle g, u \rangle| &\leq |\langle g, x \rangle| + |\langle g, y \rangle| \\ &\leq \|g\|_{X^*} \|x\|_X + \|g\|_{Y^*} \|y\|_Y, \\ &\leq \max\{\|g\|_{X^*}, \|g\|_{Y^*}\} (\|x\|_X + \|y\|_Y), \end{aligned}$$

also

$$|\langle g, u \rangle| \leq J(g, t, X^*, Y^*) K(u, t^{-1}, X, Y). \quad (\text{A.3.15})$$

Es sei nun andererseits $g \in (X + Y)^*$. Wir schreiben hier

$$M_t := \sup_{0 \neq u \in X + Y} \frac{|\langle g, u \rangle|}{K(u, t^{-1}, X, Y)}.$$

Für $x \in X$ und $y \in Y$ folgt nun

$$|\langle g, x \rangle| \leq M_t K(x, t^{-1}, X, Y) \leq M_t \|x\|_X \quad \text{und} \quad |\langle g, y \rangle| \leq t^{-1} M_t \|y\|_Y,$$

woraus insbesondere $g \in X^* \cap Y^*$ folgt. Weiterhin gibt es für jedes $\varepsilon > 0$ Elemente $x_0 \in X$ und $y_0 \in Y$, $\|x_0\|_X = \|y_0\|_Y = 1$, mit

$$\|g\|_{X^*} \leq (1 + \varepsilon) \langle g, x_0 \rangle \quad \text{und} \quad \|g\|_{Y^*} \leq (1 + \varepsilon) \langle g, y_0 \rangle.$$

Dies impliziert

$$\begin{aligned} J(g, t, X^*, Y^*) &= \max\{\|g\|_{X^*}, t\|g\|_{Y^*}\} \\ &\leq (1 + \varepsilon) \max\{\langle g, x_0 \rangle, t\langle g, y_0 \rangle\} \\ &\leq (1 + \varepsilon)M_t \max\{\|x\|_X, \|y\|_Y\} \\ &= (1 + \varepsilon)M_t. \end{aligned}$$

Zusammen mit (A.3.15) zeigt dies (A.3.13) woraus für $t = 1$ insbesondere der zweite Teil von (A.3.12) folgt, was den Beweis abschließt. \square

Lemma A.3.11. *Für $0 < \theta < 1$ und $1 < q < \infty$ betrachten wir den Raum $\Lambda^{\theta, q}$ aller meßbaren Funktionen f mit*

$$\|f\|_{\Lambda^{\theta, q}} := \left(\int_0^\infty (t^{-\theta}|f(t)|)^q \frac{dt}{t} \right)^{1/q} < \infty.$$

Dies definiert einen Banachraum. Weiterhin ist für $1/p + 1/q = 1$ der Raum $\Lambda^{1-\theta, p}$ dual zu $\Lambda^{\theta, q}$ via der dualen Paarung $\langle f, g \rangle := \int_0^\infty f(t)g(t)dt/t^2$.

Beweis. (Siehe alternativ auch [65].) Wir zeigen nur den zweiten Teil. Wie bekannt ist

$$T : L^q(dt/t^2) \rightarrow (L^p(dt/t^2))^*, \quad \langle Tf, g \rangle = \int_0^\infty f(t)g(t)dt/t^2$$

ein isometrischer Isomorphismus. Es ist weiterhin leicht einzusehen, daß

$$T_{\theta, q} : \Lambda^{\theta, q} \rightarrow L^q(dt/t^2), \quad (T_{\theta, q}f)(t) := t^{-\theta+1/q}f(t), \quad t > 0, f \in \Lambda^{\theta, q},$$

ebenfalls isometrisch und isomorph ist. Dasselbe gilt dann nach allgemeinen Prinzipien auch für $T_{1-\theta, p}^* : (L^p(dt/t^2))^* \rightarrow (\Lambda^{1-\theta, p})^*$. Somit ist

$$S := T_{1-\theta, p}^* T T_{\theta, q} : \Lambda^{\theta, q} \rightarrow (\Lambda^{1-\theta, p})^*$$

ein isometrischer Isomorphismus. Schließlich zeigt eine direkte Rechnung für $f \in \Lambda^{\theta, q}$, $g \in \Lambda^{1-\theta, p}$:

$$\langle Sf, g \rangle_{(\Lambda^{1-\theta, p})^*} = \int f(t)g(t)dt/t^2.$$

\square

Mit Hilfe dieser vorbereitenden Lemmata können wir nun den Dualitätssatz beweisen.

Beweis. (Dualitätssatz) Die zweite Gleichheit in (A.3.10) folgt aus der ersten mit Satz A.3.5. Aufgrund des Äquivalenzsatzes A.3.4 reicht es demnach aus

$$[X^*, Y^*]_{\theta, p, J} \hookrightarrow ([X, Y]_{\theta, q})^* \quad (\text{A.3.16})$$

und

$$([X, Y]_{\theta, q, J})^* \hookrightarrow [X^*, Y^*]_{\theta, p} \quad (\text{A.3.17})$$

zu zeigen.

Es sei zunächst $g \in [X^*, Y^*]_{\theta, p, J}$. Wir betrachten eine beliebige Darstellung $\phi : (0, \infty) \rightarrow (X^* \cap Y^*) = (X + Y)^*$, also

$$g = \int_0^\infty \phi(t) \frac{dt}{t},$$

wobei das Integral in $X^* + Y^* = (X \cap Y)^*$ konvergiert. Für $u \in [X, Y]_{\theta, q}$ gilt dann mit Hilfe von (A.3.13)

$$\begin{aligned} |\langle g, u \rangle| &\leq \int_0^\infty |\langle \phi(t), u \rangle| \frac{dt}{t} \\ &\leq \int_0^\infty J(\phi(t), t, X^*, Y^*) K(u, t^{-1}, X, Y) \frac{dt}{t} \\ &\leq \left(\int_0^\infty (t^{-\theta} J(\phi(t), t, X^*, Y^*))^p \frac{dt}{t} \right)^{1/p} \left(\int_0^\infty (t^\theta K(u, t^{-1}, X, Y))^q \frac{dt}{t} \right)^{1/q} \\ &= \left(\int_0^\infty (t^{-\theta} J(\phi(t), t, X^*, Y^*))^p \frac{dt}{t} \right)^{1/p} \|u\|_{\theta, q, X, Y}, \end{aligned}$$

woraus durch Übergang zum Infimum über alle möglichen Darstellungen ϕ nun

$$|\langle g, u \rangle| \leq \|g\|_{\theta, p, X^*, Y^*} \|u\|_{\theta, q, X, Y}$$

folgt, also $\|g\|_{([X, Y]_{\theta, q})^*} \leq \|g\|_{\theta, p, X^*, Y^*}$ und $g \in ([X, Y]_{\theta, q})^*$.

Um (A.3.17) zu zeigen, sei nun $f \in ([X, Y]_{\theta, q, J})^*$. Nach (A.3.12) gibt es eine stückweise konstante (also insbesondere meßbare) Funktion $\psi : (0, \infty) \rightarrow X \cap Y$, so daß $\langle f, \psi(t) \rangle \geq 0$ und

$$K(f, t^{-1}, X^*, Y^*) \leq (1 + \varepsilon) \frac{\langle f, \psi(t) \rangle}{J(\psi(t), t, X, Y)}, \quad t > 0.$$

Für eine beliebige meßbare Funktion $\zeta : (0, \infty) \rightarrow (0, \infty)$ mit

$$\|\zeta\|_{\Lambda^{\theta, q}}^q = \int_0^\infty (t^{-\theta} \zeta(t))^q \frac{dt}{t} < \infty,$$

also $\zeta \in \Lambda^{\theta,q}$, setzen wir

$$\phi_\zeta(t) := \frac{\zeta(t)\psi(t)}{J(\psi(t), t, X, Y)} \in X \cap Y, \quad t > 0.$$

Wegen

$$\begin{aligned} \int_0^\infty (t^{-\theta} J(\phi_\zeta(t), t, X, Y))^q \frac{dt}{t} &= \int_0^\infty (t^{-\theta} J(\phi_\zeta(t), t, X, Y))^q \frac{dt}{t} \\ &= \int_0^\infty (t^{-\theta} \zeta(t))^q \frac{dt}{t} = \|\zeta\|_{\Lambda^{\theta,q}}^q \end{aligned}$$

ist

$$u_\zeta := \int_0^\infty \phi_\zeta(t) \frac{dt}{t} \in [X, Y]_{\theta,q,J}$$

und sogar $\|u_\zeta\|_{\theta,q} \leq \|\zeta\|_{\Lambda^{\theta,q}}$. Weiterhin gilt

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \zeta(t) K(f, t, Y^*, X^*) \frac{dt}{t^2} &= \int_0^\infty \zeta(t) K(f, t^{-1}, X^*, Y^*) \frac{dt}{t} \\ &\leq (1 + \varepsilon) \int_0^\infty \zeta(t) \frac{\langle f, \psi(t) \rangle}{J(\psi(t), t, X, Y)} \frac{dt}{t} \\ &= (1 + \varepsilon) \langle f, u_\zeta \rangle \leq (1 + \varepsilon) \|f\|_{([X,Y]_{\theta,q})^*} \|u_\zeta\|_{[X,Y]_{\theta,q}} \\ &\leq (1 + \varepsilon) \|f\|_{([X,Y]_{\theta,q})^*} \|\zeta\|_{\Lambda^{\theta,q}} \end{aligned}$$

und somit ist schließlich nach dem vorangegangenen Lemma A.3.11 die Funktion $K(f, \cdot, Y^*, X^*) \in \Lambda^{1-\theta,p}$ und sogar

$$\|f\|_{([X,Y]_{\theta,q})^*} \geq \|K(f, \cdot, Y^*, X^*)\|_{\Lambda^{1-\theta,p}} = \|f\|_{[Y^*, X^*]_{1-\theta,p}} = \|f\|_{[X^*, Y^*]_{\theta,p}}.$$

□

Der Fall $Y \hookrightarrow X$

Nachdem wir in den vorangegangenen Abschnitten die allgemeine Theorie dargestellt haben, wollen wir abschließend noch kurz auf den immens wichtigen Spezialfall eingehen, daß Y stetig in X eingebettet ist. Insbesondere bei der Betrachtung von Skalen von Sobolev-Räumen ist dies regelmäßig der Fall, so auch in den in dieser Arbeit behandelten anisotropen Sobolev-Räumen (Abschnitt 2.2). Nehmen wir also an, daß

$$Y \subseteq X \quad \text{und} \quad \|y\|_X \leq M \|y\|_Y, \quad y \in Y,$$

gelten. Um im folgenden die Notation zu vereinfachen sei $M = 1$, welches die allgemeine Gültigkeit der Aussagen nicht einschränkt.

Es ist leicht einzusehen, daß sich das K-Funktional nun schreiben lässt als

$$K(u, t) = \inf_{y \in Y} (\|u - y\|_X + t\|y\|_Y), \quad u \in X, t > 0,$$

beziehungweise wieder äquivalent hierzu für $p \geq 1$ als

$$K(u, t) = \inf_{y \in Y} (\|u - y\|_X^p + t^p\|y\|_Y^p)^{1/p}, \quad u \in X, t > 0,$$

mit den üblichen Änderungen für $p = \infty$. Weiterhin folgt direkt aus der Definition für $t \geq 1$ und alle $u \in X$:

$$K(u, t) = K(u, 1) = \|u\|_{X+Y} = \|u\|_X. \quad (\text{A.3.18})$$

Dies erlaubt es, eine einfachere Definition der Interpolationsnorm vorzunehmen.

Lemma A.3.12. *Es seien $0 < \theta < 1$ und $1 \leq q < \infty$. Dann gilt*

$$\|u\|_{\theta, q} \sim \left(\int_0^a (t^{-\theta} K(u, t))^q \frac{dt}{t} \right)^{1/q}, \quad u \in [X, Y]_{\theta, q}$$

für beliebige $a > 0$.

Beweis. Es sei $a > 0$ beliebig. Für $t \geq a$ und $u \in [X, Y]_{\theta, q}$ gilt dann

$$K(u, a) \leq K(u, t) \leq \|u\|_X \leq \|u - y\|_X + \|y\|_Y, \quad y \in Y,$$

und somit

$$K(u, a) \leq K(u, t) \leq K(u, 1) \leq \max\{1, 1/a\} K(u, a).$$

Es gilt natürlich

$$\int_0^a (t^{-\theta} K(u, t))^q \frac{dt}{t} \leq \int_0^\infty (t^{-\theta} K(u, t))^q \frac{dt}{t}.$$

Auf der anderen Seite ist

$$\int_0^a (t^{-\theta} K(u, t))^q \frac{dt}{t} \geq K(u, a)^q \int_0^a (t^{-\theta} \min\{1, t/a\})^q \frac{dt}{t} \sim K(u, a)^q$$

und damit

$$\begin{aligned} \int_a^\infty (t^{-\theta} K(u, t))^q \frac{dt}{t} &\leq \max\{1, 1/a\}^q K(u, a)^q \int_0^\infty t^{-\theta q - 1} dt \\ &\lesssim K(u, a)^q \\ &\lesssim \int_0^a (t^{-\theta} K(u, t))^q \frac{dt}{t}, \end{aligned}$$

woraus die Behauptung folgt. \square

Bemerkung A.3.13. *Ohne Beweis bemerken wir, daß weitere äquivalente Definitionen der Interpolationsnorm existieren. Wir wollen insbesondere erwähnen, daß für $u \in [X, Y]_{\theta, q}$ die diskreten Darstellungen*

$$\|u\|_{\theta, q} \sim \left(\sum_{n=N}^{\infty} (n^{b\theta} K(u, n^{-b}))^q \frac{1}{n} \right)^{1/q} \sim \left(\sum_{n=N}^{\infty} (2^{nb\theta} K(u, 2^{-nb}))^q \right)^{1/q}$$

gelten, wobei $N \in \mathbb{N}$ und $b > 0$ beliebig sind.

Schließlich können wir hier die Einbettungsergebnisse aus Satz A.3.5 verbessern. Aus diesem schließen wir sofort auf

$$Y \hookrightarrow [X, Y]_{\theta, q} \hookrightarrow X.$$

Es gilt aber allgemeiner sogar

Satz A.3.14. *Es seien $0 < \theta, \eta < 1$ und $1 \leq q, p \leq \infty$. Dann gilt*

$$[X, Y]_{\theta, q} \hookrightarrow [X, Y]_{\eta, p},$$

falls $\eta \leq \theta$ oder $\eta = \theta$ und $q \leq p$.

Beweis. Die Behauptung ist im Fall $\eta = \theta$ und $q \leq p$ bereits in Satz A.3.5 bewiesen. Es reicht deshalb zu zeigen, daß $[X, Y]_{\theta, \infty} \hookrightarrow [X, Y]_{\eta, 1}$ für $\eta < \theta$. Es sei $u \in [X, Y]_{\theta, \infty}$. Dann gilt nach Lemma A.3.12

$$\begin{aligned} \|u\|_{\eta, 1} &\sim \int_0^1 t^{-\eta} K(u, t) \frac{dt}{t} \\ &\leq \sup_{0 < t < 1} (t^{-\theta} K(u, t)) \int_0^1 t^{\theta-\eta-1} dt \sim \|u\|_{\theta, \infty}. \end{aligned}$$

□

Literaturverzeichnis

- [1] ADAMS, R. UND FOURNIER, J. *Sobolev Spaces*. Academic Press, New York, 2003.
- [2] AGMON, S. *Lectures on elliptic boundary value problems*. Van Nostrand Mathematical Studies, Princeton, NJ, 1965.
- [3] AGMON, S. *Lectures on exponential decay of solutions of second-order elliptic equations: bounds on eigenfunctions of N -body Schrödinger operators*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1982.
- [4] ALLEGRETTO, W. Nonoscillation theory of elliptic equations of order $2n$. *Pacific J. Math.* 64, 1 (1976), 1–16.
- [5] BEAUZAMY, B. *Espaces d'interpolation réels: Topologie et géométrie*. Lecture Notes in Mathematics 666, Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 1978.
- [6] BENNETT, C. UND SHARPLEY, R. *Interpolation of Operators*. Academic Press, Boston, 1988.
- [7] BENSOUSSAN, A. UND FREHSE, J. *Regularity results for nonlinear elliptic systems and applications*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 2002.
- [8] BERENS, H. *Interpolationsmethoden zur Behandlung von Approximationsprozessen auf Banachräumen*. Lecture Notes in Mathematics 64, Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 1968.
- [9] BERGH, J. UND LÖFSTRÖM, J. *Interpolation Spaces*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 1976.
- [10] BESOV, O. Investigation of a family of function spaces in connection with theorems of imbedding and extension. *Am. Math. Soc., Transl., II. Ser.* 40 (1961), 85–126.
- [11] BRÉZIS, H. *Opérateurs maximaux monotones et semi-groupes de contractions dans les espaces de Hilbert*. North-Holland, Amsterdam / London, 1973.

-
- [12] BRONSTEIN, I.N., SEMENDJAJEW, K.A., MUSIOL, G. UND MÜHLIG, H. *Taschenbuch der Mathematik*. Verlag Harri Deutsch, Frankfurt, 2008.
- [13] BUNGARTZ, H.-J. UND GRIEBEL, M. Sparse grids. *Acta Numerica* 13 (2004), 147–269.
- [14] BUTZER, P. UND BERENS, H. *Semi-Groups of Operators and Approximation*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 1967.
- [15] BUTZER, P. UND SCHERER, K. *Approximationsprozesse und Interpolationsmethoden*. Bibliographisches Institut, Mannheim / Zürich, 1968.
- [16] CALDERÓN, A. Intermediate spaces and interpolation. *Stud. Math., Ser. spec. 1* (1963), 31–34.
- [17] CALDERÓN, A. Intermediate spaces and interpolation, the complex method. *Stud. Math.* 24 (1964), 113–190.
- [18] CANCÈS, E., LE BRIS, C. UND MADAY, Y. *Mathematical methods in quantum chemistry. An introduction. (Méthodes mathématiques en chimie quantique. Une introduction.)*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 2006.
- [19] COMBES, J.M. UND THOMAS, L. Asymptotic behaviour of eigenfunctions for multiparticle Schrödinger operators. *Commun. Math. Phys.* 34 (1973), 251–270.
- [20] CONSTANTINE, G.M. UND SAVITS, T.H. A Multivariate Faà di Bruno Formula with Applications. *Trans. Amer. Math. Soc.* 348, 2 (1996), 503–520.
- [21] DAUTRAY, R. UND LIONS, J.-L. *Mathematical analysis and numerical methods for science and technology. Volume 2: Functional and variational methods*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 2000.
- [22] DAVIES, E. UND HINZ, A. Explicit constants for Rellich inequalities in $L_p(\Omega)$. *Math. Z.* 227, 3 (1998), 511–523.
- [23] DEIFT, P., HUNZIKER, W., SIMON, B. UND VOCK, E. Pointwise bounds on eigenfunctions and wave packets in N-body quantum systems. IV. *Commun. Math. Phys.* 64 (1978), 1–34.
- [24] DEVORE, R. UND LORENTZ, G. *Constructive approximation*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 1993.

-
- [25] EMMRICH, E. *Gewöhnliche und Operator-Differentialgleichungen*. Vieweg, Wiesbaden, 2004.
- [26] EVANS, L. *Partial differential equations*. American Mathematical Society, Providence, RI, 2010.
- [27] FLAD, H.-J., HACKBUSCH, W., KOLB, D. UND SCHNEIDER, R. Wavelet approximation of correlated wave functions. I. Basics. *J. Chem. Phys.* 116 (2002), 9641–9657.
- [28] FLAD, H.-J., HACKBUSCH, W. UND SCHNEIDER, R. Best N -term approximation in electronic structure calculations. II: Jastrow factors. *ESAIM, Math. Model. Numer. Anal.* 41, 2 (2007), 261–279.
- [29] FOURNAIS, S., HOFFMANN-OSTENHOF, M., HOFFMANN-OSTENHOF, T. UND ØSTERGAARD SØRENSEN, T. The electron density is smooth away from Nuclei. *Commun. Math. Phys.* 228, 3 (2002), 401–415.
- [30] FOURNAIS, S., HOFFMANN-OSTENHOF, M., HOFFMANN-OSTENHOF, T. UND ØSTERGAARD SØRENSEN, T. Sharp regularity results for Coulombic many-electron wave functions. *Commun. Math. Phys.* 255, 1 (2005), 183–227.
- [31] FOURNAIS, S., HOFFMANN-OSTENHOF, M., HOFFMANN-OSTENHOF, T. UND ØSTERGAARD SØRENSEN, T. Analytic structure of many-body Coulombic wave functions. *Commun. Math. Phys.* 289, 1 (2009), 291–310.
- [32] FRAENKEL, L. Formulae for High Derivatives of composite Functions. *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.* 83, 2 (1978), 159–165.
- [33] GAGLIARDO, E. Interpolation d’espaces de Banach et applications. *C. R. Acad. Sci., Paris* 248 (1959), 1912–1914, 3388–3390, 3517–3518.
- [34] GAJEWSKI, H., GRÖGER, K. UND ZACHARIAS, K. *Nichtlineare Operatorgleichungen und Operatordifferentialgleichungen*. Mathematische Lehrbücher und Monographien. Akademie-Verlag, Berlin, 1974.
- [35] GARCKE, J. UND GRIEBEL, M. On the computation of the eigenproblems of hydrogen and helium in strong magnetic and electric fields with the sparse grid combination technique. *J. Comput. Phys.* 165, 2 (2000), 694–716.
- [36] GILBARG, D. UND TRUDINGER, N.S. *Elliptic partial differential equations of second order*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 2001.

- [37] GRIEBEL, M. UND HAMAEEKERS, J. Sparse grids for the Schrödinger equation. *ESAIM, Math. Model. Numer. Anal.* 41, 2 (2007), 215–247.
- [38] GUSTAFSON, S.J. UND SIGAL, I.M. *Mathematical concepts of quantum mechanics*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 2003.
- [39] HACKBUSCH, W. *Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen*. B. G. Teubner, Stuttgart, 1986.
- [40] HAMAEEKERS, J. *Tensor Product Multiscale Many-Particle Spaces with Finite-Order Weights for the Electronic Schrödinger Equation*. Dissertation, Universität Bonn, 2009.
- [41] HARDY, M. Combinatorics of Partial Derivatives. *Electr. J. Comb.* 13 (2006), 1–13.
- [42] HARDY, G., LITTLEWOOD, J. UND PÓLYA, G. *Inequalities*. Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
- [43] HAROSKE, D. UND TRIEBEL, H. *Distributions, Sobolev Spaces and Elliptic Equations*. European Mathematical Society, Zürich, 2008.
- [44] HELGAKER, T., JØRGENSEN, P. UND OLSEN, J. *Molecular Electronic-Structure Theory*. John Wiley & Sons, Chichester, 2000.
- [45] HERNÁNDEZ ENCINAS, L. UND MUÑOZ MASQUÉ, J. A Short Proof of the Generalized Faà di Bruno’s Formula. *Appl. Math. Lett.* 16 (2003), 975–979.
- [46] HILLE, E. UND PHILLIPS, R. *Functional analysis and semi-groups*. American Mathematical Society, Providence, RI, 1974.
- [47] HOFFMANN-OSTENHOF, M., HOFFMANN-OSTENHOF, T., LAPTEV, A. UND TIDBLUM, J. Many-particle Hardy inequalities. *J. Lond. Math. Soc., II. Ser.* 77, 1 (2008), 99–115.
- [48] HOFFMANN-OSTENHOF, M., HOFFMANN-OSTENHOF, T. UND ØSTERGAARD SØRENSEN, T. Electron wavefunctions and densities for atoms. *Ann. Henri Poincaré* 2, 1 (2001), 77–100.
- [49] HOFFMANN-OSTENHOF, M., HOFFMANN-OSTENHOF, T. UND STREMNITZER, H. Local properties of Coulombic wave functions. *Commun. Math. Phys.* 163, 1 (1994), 185–215.

-
- [50] HOFFMANN-OSTENHOF, M. UND HOFFMANN-OSTENHOF, T. Local properties of solutions of Schrödinger equations. *Commun. Partial Differ. Equations* 17, 3–4 (1992), 491–522.
- [51] HOPF, E. Über den funktionalen, insbesondere den analytischen Charakter der Lösungen elliptischer Differentialgleichungen zweiter Ordnung. *Math. Z.* 34 (1931), 194–233.
- [52] HÖRMANDER, L. *Linear partial differential operators*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 1976.
- [53] HÖRMANDER, L. *The analysis of linear partial differential operators. I: Distribution theory and Fourier analysis*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 2003.
- [54] HUNZIKER, W. UND SIGAL, I.M. The quantum N -body problem. *J. Math. Phys.* 41, 6 (2000), 3448–3510.
- [55] KAIS, S. ET AL. Density functionals and dimensional renormalization for an exactly solvable model. *J. Chem. Phys.* 99, 1 (1993), 417–425.
- [56] KAIS, S., HERSCHBACH, D.R. UND LEVINE, R.D. Dimensional scaling as a symmetry operation. *J. Chem. Phys.* 91, 12 (1989), 7791–7796.
- [57] KATO, T. Fundamental properties of hamiltonian operators of Schrödinger type. *Trans. Am. Math. Soc.* 70 (1951), 195–211.
- [58] KATO, T. On the existence of solutions of the helium wave equation. *Trans. Am. Math. Soc.* 70 (1951), 212–218.
- [59] KATO, T. On the eigenfunctions of many-particle systems in quantum mechanics. *Commun. Pure Appl. Math.* 10 (1957), 151–177.
- [60] KATO, T. *Perturbation Theory for Linear Operators*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 1995.
- [61] KREJN, S. On the concept of a normal scale of spaces. *Sov. Math., Dokl.* 1 (1960), 586–589.
- [62] KUFNER, A. *Weighted Sobolev Spaces*. John Wiley & Sons, Chichester, 1985.
- [63] KUFNER, A. UND OPIC, B. How to define reasonably weighted Sobolev spaces. *Commentat. Math. Univ. Carol.* 25 (1984), 537–554.

-
- [64] KUFNER, A. UND OPIC, B. *Hardy-type inequalities*, vol. 219 of *Pitman Research Notes in Mathematics*. John Wiley & Sons, New York, 1990.
- [65] KUFNER, A. UND PERSSON, L. *Weighted inequalities of Hardy type*. World Scientific, Singapore, 2003.
- [66] LE BRIS, C. Computational chemistry from the perspective of numerical analysis. *Acta Numerica* 14 (2005), 363–444.
- [67] LE BRIS, C. (ED.). *Handbook of Numerical Analysis X. Special volume: Computational chemistry*. North-Holland, Amsterdam, 2003.
- [68] LEWIS, R. T. Singular elliptic operators of second order with purely discrete spectra. *Trans. Amer. Math. Soc.* 271, 2 (1982), 653–666.
- [69] LIEB, E. H. The stability of matter: From atoms to stars. *Bull. Am. Math. Soc., New Ser.* 22, 1 (1990), 1–49.
- [70] LINDENSTRAUSS, J. UND TZAFRIRI, L. *Classical Banach Spaces II*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 1979.
- [71] LIONS, J.-L. Théorèmes de trace et d’interpolation I–V. I: *Ann. Sc. Norm. Super. Pisa, Sci. Fis. Mat.*, 13, 389–403, 1960; II: *Ann. Sc. Norm. Super. Pisa, Sci. Fis. Mat.*, 14, 317–331, 1961; III: *J. Math. Pures Appl.*, 42, 195–203, 1963; IV: *Math. Ann.*, 151, 42–56, 1963; V: *Anais Acad. Brasil. Ci.*, 35, 1–10, 1963,.
- [72] LIONS, J.-L. Une construction d’espaces d’interpolation. *C. R. Acad. Sci., Paris* 251 (1960), 1853–1855.
- [73] LIONS, J.-L. UND MAGENES, E. *Non-homogeneous boundary value problems and applications. Vol. I*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 1972.
- [74] LIONS, J.-L. UND PEETRE, J. Sur une classe d’espaces d’interpolation. *Inst. Hautes Études Sci. Publ. Math.* 19 (1964).
- [75] LUNARDI, A. *Interpolation Theory*. Scuola Normale Superiore, Pisa, 1999.
- [76] MACKEY, G. *The mathematical foundations of quantum mechanics. Repr. of the 1963 orig.* Dover Publ., Mineola, 2004.
- [77] MACLEAN, W. *Strongly elliptic Systems and Boundary Integral Equations*. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.

-
- [78] MAZ'YA, V. *Sobolev spaces*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 1985.
- [79] MESSIAH, A. *Quantum mechanics. Vol. I, II*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1962.
- [80] MORREY, C. *Multiple integrals in the calculus of variations*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 1966.
- [81] NIKOL'SKIJ, S. On imbedding, continuation and approximation theorems for differentiable functions of several variables. *Russ. Math. Surv.* 16, 5 (1961), 55–104.
- [82] O'CONNOR, A. J. Exponential decay of bound state wave functions. *Comm. Math. Phys.* 32 (1973), 319–340.
- [83] O'NEILL, D.P. UND GILL, P.M.W. Wave functions and two-electron probability distributions of the Hooke's-law atom and helium. *Phys. Rev. A* 68 (2003), 022505.
- [84] OPIC, B. UND RÁKOSNÍK, J. Estimates for mixed derivatives of functions from anisotropic Sobolev-Slobodeckij spaces with weights. *Q. J. Math., Oxf. II. Ser.* 42, 167 (1991), 347–363.
- [85] PEETRE, J. Nouvelles propriétés d'espaces d'interpolation. *C. R. Acad. Sci., Paris* 256 (1963), 1424–1426.
- [86] PEETRE, J. A theory of interpolation of normed spaces. *Notas Mat.* 39 (1968).
- [87] RENARDY, M. UND ROGERS, R. *An introduction to partial differential equations*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 2004.
- [88] RUDIN, W. *Functional analysis*. McGraw-Hill, New York, 1991.
- [89] SCHERER, K. Über die dualen von Banachräumen, die durch lineare Approximationsprozesse erzeugt werden, und Anwednugen für periodische Distributionen. *Acta Math. Acad. Sc. Hung.* 23 (1972), 343–365.
- [90] SHIMAKURA, N. *Partial differential operators of elliptic type*. Translations of Mathematical Monographs. American Mathematical Society, Providence, RI, 1992.
- [91] SHOWALTER, R. *Monotone operators in Banach space and nonlinear partial differential equations*. American Mathematical Society, Providence, RI, 1997.

-
- [92] TARTAR, L. *An Introduction to Sobolev Spaces and Interpolation Spaces*, vol. 3 of *Lecture Notes Of The Unione Matematica Italiana*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 2007.
- [93] TAYLOR, M. *Partial Differential Equations III, Nonlinear Equations*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 1996.
- [94] TESCHL, G. *Mathematical methods in quantum mechanics. With applications to Schrödinger operators*. Graduate Studies in Mathematics 99. American Mathematical Society (AMS), Providence, RI, 2009.
- [95] THALLER, B. *Visual quantum mechanics*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 2000.
- [96] TRIEBEL, H. *Interpolation Theory, Function Spaces, Differential Operators*. North-Holland, Amsterdam / London, 1978.
- [97] TRIEBEL, H. *Höhere Analysis*. Verlag Harri Deutsch, Frankfurt, 1980.
- [98] VON NEUMANN, J. *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 1996.
- [99] WEIDMANN, J. *Lineare Operatoren in Hilberträumen. Teil I: Grundlagen*. Teubner, Stuttgart / Leipzig / Wiesbaden, 2000.
- [100] WEIDMANN, J. *Lineare Operatoren in Hilberträumen, Teil II: Anwendungen*. Teubner, Stuttgart / Leipzig / Wiesbaden, 2003.
- [101] WLOKA, J. *Partielle Differentialgleichungen. Sobolevräume und Randwertaufgaben*. B. G. Teubner, Stuttgart, 1982.
- [102] YAFAEV, D. Sharp constants in the Hardy-Rellich inequalities. *J. Func. Anal.* 168 (1999), 121–144.
- [103] YOSIDA, K. *Functional analysis*. Springer, Berlin / Heidelberg / New York, 1994.
- [104] YSERENTANT, H. On the electronic Schrödinger Equation. *Lecture Notes, Universität Tübingen* (2003).
- [105] YSERENTANT, H. On the regularity of the electronic Schrödinger equation in Hilbert spaces of mixed derivatives. *Numer. Math.* 98, 4 (2004), 731–759.
- [106] YSERENTANT, H. Sparse grid spaces for the numerical solution of the electronic Schrödinger equation. *Numer. Math.* 101, 2 (2005), 381–389.

-
- [107] YSERENTANT, H. The hyperbolic cross space approximation of electronic wavefunctions. *Numer. Math.* 105, 4 (2007), 659–690.
- [108] YSERENTANT, H. *Regularity and approximability of electronic wave functions*. Lecture Notes in Mathematics 2000, Springer, Berlin / Heidelberg / New York , 2010.
- [109] YSERENTANT, H. The Mixed Regularity of Electronic Wave Functions Multiplied by Explicit Correlation Factors. *ESAIM: Mathematical Modeling and Numerical Analysis* 45, 5 (2011), 803–824.
- [110] ZEISER, A. *Direkte Diskretisierung der Schrödingergleichung auf dünnen Gittern*. Dissertation, Technische Universität Berlin, 2010.
- [111] ZENGER, C. *Sparse grids*. In W. Hackbusch, editor, *Parallel algorithms for partial differential equations, Proc. 6th GAMM- Semin., Kiel, 1990*, Vieweg, 1991.
- [112] ZHISLIN, G. M. Untersuchung des Spektrums des Schrödingerschen Operators für Systeme von vielen Teilchen. *Tr. Moskov. Mat. Obshch.* 9 (1960), 81–120.