

Modelle relativistischer und nicht-relativistischer Coulomb-Systeme

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

Matthias Huber

7. Mai 2008

Erstgutachter: Prof. Dr. Heinz Siedentop
Zweitgutachter: Prof. Dr. Marcel Griesemer
Tag der mündlichen Prüfung: 25. August 2008

ZUSAMMENFASSUNG: Die Arbeit behandelt verschiedene Modelle der Quantenelektrodynamik aus Sicht der Mathematik.

Zunächst wird die Fortsetzung der Douglas-Kroll-Heß-Transformation für Systeme mit mehr als einem Teilchen diskutiert. Anschließend folgt eine ausführliche Untersuchung verschiedener Eigenschaften komplex dilatierter Dirac-Operatoren. Insbesondere werden positive und negative Spektralprojektionen sowie entsprechende Transformationsfunktionen eingeführt. Ferner wird der nicht-relativistische Limes solcher Operatoren untersucht. Diese Ergebnisse dienen als technische Vorbereitung zur Behandlung eines relativistischen Modells der Quantenelektrodynamik, sind jedoch auch von unabhängigem Interesse.

In einem weiteren Kapitel wird das Dirac-Fock-Funktional im Falle schwacher Elektron-Elektron-Wechselwirkung behandelt. Insbesondere wird die Existenz von Lösungen der Dirac-Fock-Gleichungen mit bestimmten zusätzlichen Eigenschaften gezeigt. Es wird bewiesen, dass diese Lösungen gewisse Minimierungseigenschaften bezüglich des Dirac-Fock-Funktional aufweisen.

Schließlich wird die Wechselwirkung von Materie mit dem quantisierten elektromagnetischen Feld untersucht. Im Pauli-Fierz-Modell sowie in einem relativistischen Modell werden dabei obere und untere Schranken an die Lebensdauer angeregter Zustände bewiesen.

This thesis discusses different models of quantum electrodynamics from a mathematical point of view.

First, the continuation of the Douglas-Kroll-Heß transformation for systems with more than one particle will be discussed. Then follows a thorough investigation of different properties of complex dilated Dirac operators. In particular, positive and negative spectral projections and the corresponding transformation functions will be introduced. Moreover, the non-relativistic limit of such operators will be examined. These results serve as a preparation for the discussion of a relativistic model of quantum electrodynamics, but are also of independent interest.

In a further chapter, the Dirac-Fock functional in the case of weak electron-electron interaction will be discussed. In particular, the existence of solutions of the Dirac-Fock equations with certain additional properties will be shown. It will be proven that these solution have certain minimizing properties with regard to the Dirac-Fock functional.

Eventually, the interaction of matter with the second quantized radiation field will be investigated. For the Pauli-Fierz model and a relativistic model, an upper and lower bound of the life time of excited states will be shown.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	ix
Kapitel I. Einleitung	1
Teil 1. Dirac-Operatoren	7
Kapitel II. Selbstadjungierte Dirac-Operatoren	9
II.1. Grundlagen	9
II.2. Block-Diagonalisierung	11
II.2.1. Die Douglas-Kroll-Transformation	11
II.2.2. Verallgemeinerung auf den N-Teilchen-Fall	13
Kapitel III. Komplex dilatierete Dirac-Operatoren	21
III.1. Definitionen	21
III.2. Grundlagen	22
III.2.1. Foldy-Wouthuysen-Transformation	22
III.2.2. Dilatationsanalytizität und Spektrum	26
III.2.3. Spektralprojektionen	32
III.2.4. Transformationsfunktionen	37
III.2.5. Eine Resolventenabschätzung für den Dirac-Operator	44
III.3. Nicht-Relativistischer Grenzfall	47
III.3.1. Allgemeine Theorie	47
III.3.2. Anwendung auf Erwartungswerte von Dirac-Matrizes	55
Teil 2. Das Dirac-Fock-Funktional	59
Kapitel IV. Dirac-Fock-Funktional und Minimierer	61
IV.1. Einleitung	61
IV.2. Modell und Definitionen	62
IV.3. Das Spektrum von Dirac-Fock-Operatoren	65
IV.4. Sphärische Symmetrie	72
IV.5. Lösungen der Dirac-Fock-Gleichungen als Minimierer	74

Teil 3. Atome in Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld	79
Kapitel V. Das Pauli-Fierz-Modell	81
V.1. Modell und Definitionen	82
V.2. Abschätzungen an den numerischen Wertebereich	88
V.3. Lebensdauer angeregter Zustände	93
V.4. Anwendung auf das Wasserstoffatom	97
V.4.1. Die Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms	97
V.4.2. Auswahlregeln für Dipolübergänge	98
V.4.3. Der Imaginärteil von Z	98
V.4.4. Numerisches Beispiel	100
Kapitel VI. Ein relativistisches Modell	101
VI.1. Modell und Definitionen	101
VI.2. Selbstadjungiertheit und Dilatationsanalytizität	108
VI.3. Technische Lemmata	111
VI.4. Existenz und Approximation des Feshbach-Operators	119
VI.5. Abschätzungen an den numerischen Wertebereich	128
VI.6. Lebensdauer angeregter Zustände	130
Teil 4. Anhang	139
Anhang A. Operatorungleichungen und Minimax-Prinzip	141
A.1. Einige Operator-Ungleichungen	141
A.2. Das Minimax-Prinzip von Griesemer und Siedentop	142
Anhang B. Dilatierte Schrödinger-Operatoren und das Pauli-Fierz-Modell	143
B.1. Abschätzungen für dilatierte Schrödinger-Operatoren	143
B.2. Abschätzungen für das Pauli-Fierz-Modell	144
Literaturverzeichnis	147

Abbildungsverzeichnis

III.1	Das Spektrum des Operators $D_{c,0}(\theta)$ für $c = 1$ und $\theta = i\pi/4$.	27
III.2	Die Mengen $B_{c;\theta;\pm}$ für $c = 1$ und $\theta = i\pi/4$.	29
IV.1	Der maximale Wert von α , für den die Kontraktionseigenschaft von T garantiert werden kann, in Abhängigkeit von der Kernladung $Z = 137g$ und für $N = 2$ mit und ohne die zusätzliche Annahme der sphärischen Symmetrie.	70
IV.2	Die Konstante $\min\{a_{g,n}, b_g/(4N), \alpha_0\}$ in Abhängigkeit von der Kernladung $Z = 137g$ für $N = 2$.	72
IV.3	Der maximale Wert von α , für den wir garantieren können, dass eine Projektion $\delta \in \text{DF}$ auf die kleinsten Eigenwerte von $D^{(\delta)}$ die Energie minimiert, in Abhängigkeit von der Kernladung $Z = 137g$ und für $N = 2$.	78
V.1	Die numerischen Wertebereiche der Operatoren $E_n - g^2Z(0)$ und $\text{NumRan}(E_n - g^2Z(0) \otimes \mathbf{1}_f + e^{-\theta}\mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f) _{\text{Ran } P(0)}$.	90
V.2	Globale Lokalisierung des numerischen Wertebereichs von $E_n + g^2Q_0^{(\theta)}(z)$ und des Feshbach-Operators $\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z) + z$.	91
V.3	Die Integrationskontour für das Pauli-Fierz-Modell.	94
VI.1	Die Integrationskontour im relativistischen Modell für die Hauptquantenzahl $n = 3$.	138

KAPITEL I

Einleitung

Die Idee von Photonen geht bis auf Planck [121] und Einstein [46] zurück. Der Grundstein für eine quantenmechanische Beschreibung des Lichtes (Quantenelektrodynamik) wurde bereits von den Vätern der Quantenmechanik Born, Dirac, Heisenberg, Jordan und Pauli gelegt. Wir erwähnen hier nur die Arbeiten von Born et al. [28], von Dirac [38] und von Heisenberg und Pauli [81]. Für eine detaillierte Darstellung verweisen wir auf den Übersichtsartikel von Jordan [95].

Später wurde klar, dass nicht nur Photonen, sondern auch Elektronen und ihre Antiteilchen, die Positronen, als Anregungen eines Quantenfeldes betrachtet werden müssen. Diese Tatsache ergibt sich unmittelbar aus der Notwendigkeit, die Dynamik von Elektronen im Feld schwerer Atome relativistisch beschreiben zu müssen. Durch die Einführung des Dirac-Operators [41], dessen positiver Spektralraum der Zustandsraum der Elektronen ist, kommt in natürlicher Weise auch das Positron ins Spiel [39, 40]. Kombiniert mit der Wechselwirkung dieser geladenen Teilchen ist nunmehr die Elektronenzahl im Allgemeinen keine Konstante mehr.

Die Quantenelektrodynamik (QED) kann als die physikalische Theorie gesehen werden, die diese beiden Ansätze vereint. Bei ihrer Entwicklung haben viele Forscher Beiträge geleistet. Sie gilt durch die Arbeiten von Tomonaga, Schwinger und Feynman im Wesentlichen als physikalisch abgeschlossen. Wir zitieren hier exemplarisch die Arbeiten [132, 133, 134, 135] von Schwinger, die Arbeiten [142, 143] von Tomonaga und die Arbeiten [53, 54, 55] von Feynman. Eine Auswahl der wichtigsten Originalarbeiten zur Quantenelektrodynamik findet man in [136]. Das Buch [131] bietet einen schönen Überblick über die historische Entwicklung der QED.

Der formale Hamilton-Operator der Quantenelektrodynamik ist in SI-Einheiten gegeben durch (siehe [35, Seite 431] und auch [27, Gleichung (15.28)])

$$(I.1) \quad H = \int dx \Psi^\dagger(x) \left[\beta m c^2 + \frac{\hbar c}{i} \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \right] \Psi(x) \\ + \int dx \int dx' \frac{\Psi^\dagger(x) \Psi(x) \Psi^\dagger(x') \Psi(x')}{8\pi\epsilon_0 |x - x'|} \\ + \int dk \sum_{\lambda, \lambda'} \hbar c |k| \left[a_\lambda^\dagger(k) a_\lambda(k) + \frac{1}{2} \right] - ec \int dx \Psi^\dagger(x) \boldsymbol{\alpha} \cdot A(x) \Psi(x).$$

Hierbei ist $\Psi(x)$ der Feldoperator des Elektronen-Positronen-Feldes, β und $\boldsymbol{\alpha}$ sind die Dirac-Matrizes (siehe Kapitel II.1), \hbar ist die reduzierte Planck-Konstante, c die Lichtgeschwindigkeit, m die Elektronenmasse, ϵ_0 die Dielektrizitätskonstante und e die Elementarladung. $A(x)$ ist das Strahlungsfeld in zweiter Quantisierung (siehe auch Kapitel V.1).

Der erste Summand in (I.1) ist dabei die kinetische Energie des Elektronen-Positronen-Feldes, der zweite die Wechselwirkungsenergie des Elektronen-Positronen-Feldes, der dritte die Feldenergie des Photonenfeldes, und der vierte Summand beschreibt die Wechselwirkung zwischen Materiefeld und Photonenfeld.

Eine mathematisch konsistente Behandlung der QED und des Hamilton-Operators (I.1) ist nach wie vor ein ungelöstes Problem. Nicht einmal die elementarsten Fragen dieser Theorie sind geklärt. Selbst die Frage nach dem Zustandsraum muss noch als offen gelten.

Im Wesentlichen können zwei Ansätze unterschieden werden: Zum einen wird die Elektronenzahl fix gehalten und das Photonenfeld quantisiert. Typischerweise wird die Dynamik der Elektronen durch die Schrödinger-Gleichung oder die Pauli-Gleichung gegeben, d.h. sie ist nicht-relativistisch. Wir bezeichnen diese Richtung kurz als *nicht-relativistische QED*. Zum anderen wird Wert darauf gelegt, die Dynamik der Teilchen relativistisch zu behandeln. Die Wechselwirkung wird in der Regel durch Coulombkräfte gegeben. Das Photonenfeld wird für die Beschreibung von Bindungseffekten dabei gerne unterdrückt. Wir sprechen in diesem Falle vom *relativistischen Elektronen-Positronen-Feld*.

Wir werden im Folgenden etwas genauer auf einige Modelle eingehen, zu denen die vorliegende Arbeit einen Beitrag leistet, ohne dabei Anspruch auf Vollständigkeit erheben zu wollen. Eine umfassende Darstellung des Standes der Forschung würde ohnedies den Rahmen dieser Einleitung sprengen.

Wir geben zunächst einen kurzen Überblick über den Stand der Forschung auf diesen Gebieten und ordnen dann die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit ein.

Stand der Forschung

Das Elektronen-Positronen-Feld. Die relativistische Behandlung physikalischer Systeme ist besonders für Atome mit schweren Kernen relevant, da sich die Elektronen – insbesondere auf den inneren Schalen – mit einer so hohen Geschwindigkeit bewegen, dass relativistische Effekte nicht vernachlässigt werden können. Je nach Situation können dabei verschiedene Modelle angebracht sein, die wir im Folgenden beschreiben.

Sektoren fixer Teilchenzahl mit voller Korrelation ohne Photonenfeld. Wenn die im System auftretenden Energien a priori als so niedrig angenommen werden können, dass es nicht zur Erzeugung von Elektron-Positron-Paaren kommen kann, dann reicht es aus, im Operator (I.1) die Beiträge des Photonenfeldes zu vernachlässigen und den Operator bzw. seine quadratische Form auf Sektoren fester Elektronenzahl einzuschränken. Die entstehenden Operatoren werden als No-Pair-Hamilton-Operatoren mit Coulomb-Wechselwirkung bezeichnet. Eine wichtige Frage dabei ist die Wahl des Elektronenraumes, für den mehrere Wahlen in Frage kommen. Typischerweise wählt man den Elektronenraum bezüglich des Einteilchen-Dirac-Operators mit äußerem Einteilchen-Potential (Furry-Bild) oder bezüglich des freien Einteilchen-Operators (freies Bild). Der Operator zum freien Bild wird auch als Brown-Ravenhall-Operator bezeichnet [30]. Es sind auch andere Wahlen möglich, die noch ein mittleres Potential der Elektronen berücksichtigen (Zwischenbild).

Das Furry-Bild wird in der Praxis häufig durch Modelle behandelt, die auf einer Entwicklung nach der Feinstrukturkonstanten beruhen (siehe [42] oder [94]). Siedentop und Stockmeyer [138] haben für den Einteilchen-Dirac-Operator im Furry-Bild gezeigt, dass die entsprechende Entwicklung tatsächlich in einem gewissen Sinne konvergiert. Die entsprechende Entwicklung liefert in erster Ordnung gerade den Brown-Ravenhall-Operator, in zweiter Ordnung den Jansen-Heß-Operator. Der Jansen-Heß-Operator wurde hauptsächlich von Jakubaßa-Amundsen (siehe unter anderem [92] und [90]) untersucht. Jakubaßa-Amundsen [93] und Morozov und Vugalter [118] haben den HVZ-Satz für den Brown-Ravenhall-Operator bewiesen.

Hartree-Fock-Näherung ohne Photonen. In diesem Modell werden im Operator (I.1) wiederum die Beiträge des Photonen-Feldes vernachlässigt und die entstehende quadratische Form auf quasi-freie Zustände (Hartree-Fock-Zustände) eingeschränkt. Die Minimierung der Energie über solche Zustände lässt sich auf das Dirac-Fock-Funktional (siehe [8] und Kapitel IV.2) zurückführen.

Bach et al. [8, 7] bewiesen die Stabilität des relativistischen Elektronen-Positronen-Feldes in Hartree-Fock-Näherung. Darauf aufbauend zeigten Barbaroux et al. [19] die Existenz von Atomen. Die zugehörigen Schranken wurden von Brummelhuis et al. [31] und Röhl [128] verbessert.

Eine in diesem Zusammenhang entscheidende Frage ist, welche Wahl des Elektronenraumes die richtige ist, insbesondere im Hinblick auf die Stabilität der Materie. Wegweisend in diesem Zusammenhang ist eine Vermutung von Middleman [115], die besagt, dass der physikalische Zustandsraum des Elektrons derjenige ist, der die größte Grundzustandsenergie liefert. Die Gleichung für den Maximierer hat Middleman bereits angegeben. Es handelt sich um die Dirac-Fock-Gleichung. Allerdings ist die Herleitung nur formal. Die Gültigkeit dieser und einer verwandten Vermutung wurde von Barbaroux, Esteban und Séré [18] und von Barbaroux, Helffer und Siedentop [20] untersucht.

No-Pair-Hamilton-Operator mit Photonen. Dieses Modell erhält man, indem man im Operator (I.1) die Beiträge des klassischen oder quantisierten Photonenfeldes berücksichtigt, aber das Elektronen-Positronen-Feld auf einen Sektor fester Elektronenzahl einschränkt. Die Wahl des Elektronenraumes ist dabei von entscheidender Bedeutung für die Stabilität [107, 108, 106]. Matte und Stockmeyer [111] haben für dieses Modell einen HVZ-Satz bewiesen.

Nicht-relativistische QED. In diesem Modell wird für den elektronischen Anteil des Operators und für die Wechselwirkung mit dem Photonenfeld eine nicht-relativistische Approximation verwendet; das daraus resultierende Modell ist das Pauli-Fierz-Modell (siehe Kapitel V). Häufig wird auch das einfachere Nelson-Modell behandelt. Die mathematische Untersuchung dieses Ansatzes geht auf Fröhlich [62, 61] zurück. Einen Überblick über das Gebiet findet man in [66].

Die Untersuchung eines vollen Modells der nicht-relativistischen QED, d.h. unter Verwendung des Pauli-Fierz-Operators, wurde erst vor wenigen Jahren von Bach, Fröhlich und Sigal [9, 10, 12] begonnen. In [13] zeigen sie die Existenz eines Grundzustandes für Teilchen in einem äußeren Bindungspotential sowie eine obere Schranke an die Lebensdauer angeregter Zustände.

Die Existenz von Grundzuständen im Pauli-Fierz-Modell unter wesentlich allgemeineren Voraussetzungen, insbesondere ohne Einschränkungen an den Ultraviolett-Cutoff und die Kopplungskonstante, wurde von Griesemer, Lieb und Loss [68] bewiesen. Die asymptotische Vollständigkeit für Rayleigh- und Compton-Streuung wurde von Fröhlich, Griesemer und Schlein [58, 59, 60] bewiesen.

In [76] haben Hainzl, Vougalter und Vugalter gezeigt, dass ein spinloses Teilchen, das an ein Photonenfeld koppelt, Bindungszustände haben kann, selbst wenn der zugehörige Einteilchen-Schrödinger-Operator keine Eigenwerte hat, weil das Potential nicht „tief“ genug ist. Diese und ähnliche Untersuchungen wurde von Chen, Vougalter und Vugalter [32] und von Barbaroux, Linde und Vugalter [21] fortgesetzt. Barbaroux, Chen und Vugalter haben Bindungsbedingungen für Systeme mit mehreren Elektronen gezeigt [17] sowie die Grundzustandsenergie des translationsinvarianten Pauli-Fierz-Modells untersucht [16].

Hasler und Herbst [77] haben die Selbstadjungiertheit und den Definitionsbereich von Modellen vom Pauli-Fierz-Typ bewiesen sowie die Nicht-Existenz von Grundzuständen für eine Klasse von translationsinvarianten Modellen gezeigt [78]. Griesemer und Hasler [67] haben eine analytische Störungstheorie für nicht-ausgeartete Grundzustände entwickelt.

Übersicht über die Hauptergebnisse der Arbeit

Wir geben hier lediglich eine kurze Übersicht über die Ergebnisse der Arbeit. Ausführlichere Einleitungen zu den betrachteten Modellen sind den entsprechenden Kapiteln vorangestellt.

In Teil 1 geben wir grundlegende Resultate über Dirac-Operatoren. In Kapitel II betrachten wir zunächst selbstadjungierte Dirac-Operatoren und fassen einige ihrer wohlbekanntesten Eigenschaften zusammen. Dann folgen wir [88] und verallgemeinern die Arbeit von Siedentop und Stockmeyer [138] (siehe oben) auf N-Teilchen-Dirac-Operatoren. Wir zeigen insbesondere, dass auch die N-Teilchen-Version der Douglas-Kroll-Transformation zu einer im Sinne der Normresolventenkonvergenz konvergenten Reihenentwicklung in der Kopplungskonstanten γ führt. Dies ist für praktische Rechnungen in der Quantenchemie von Interesse, da das Douglas-Kroll-Schema zur Behandlung von Systemen mit vielen Elektronen eingesetzt wird. Der technisch nicht besonders schwierige Beweis beruht auf der Idee, die Analytizität in der Kopplungskonstanten γ durch die Definition geeigneter Gewichte auf den Einteilchen-Fall zurückzuführen. Diese Technik wird später bei der Behandlung eines relativistischen Elektrons in Wechselwirkung mit dem quantisierten Photonenfeld in Kapitel VI wieder verwendet.

Danach diskutieren wir in Kapitel III Dirac-Operatoren, die bei der Behandlung von Resonanzen durch komplexe Dilatation auftreten. Diese Operatoren sind weder selbstadjungiert noch normal. Die Ergebnisse aus diesem Kapitel werden wir ebenfalls zur Behandlung des relativistischen Modells der QED benötigen. Die Ergebnisse sind jedoch auch von unabhängigem Interesse: Wir führen zunächst eine Spektralanalyse des dilatierten Dirac-Operators mit dem nicht relativ-kompakten Coulomb-Potential durch. Dies scheint in der Literatur (siehe z.B. [137] oder [144]) nicht behandelt worden zu sein. Anschließend definieren wir positive und negative Spektralprojektionen

für dilatierte Dirac-Operatoren. Auch diese Frage scheint bisher nicht behandelt worden zu sein. Schließlich diskutieren wir den nicht-relativistischen Grenzfall dilatierter Dirac-Operatoren. Die Beweise hier verlaufen im Wesentlichen wie im selbstadjungierten Fall [141].

In Kapitel IV folgen wir [87] und untersuchen das Dirac-Fock-Funktional im Falle abgeschlossener Schalen. Wir zeigen mit Hilfe des Banachschen Fixpunktsatzes die Existenz von Lösungen der Dirac-Fock-Gleichungen mit der zusätzlichen Eigenschaft, dass die Lösungen Eigenfunktionen zu den kleinsten Eigenwerten des zugehörigen Dirac-Fock-Operators sind. Außerdem zeigen wir, dass diese Lösungen die Energie des Dirac-Fock-Funktionalen minimieren, wenn man die Quantisierung bzgl. dieser Lösung wählt. Dies zeigt insbesondere eine Ungleichung der Middlemanschen Vermutung. Die umgekehrte Ungleichung gilt – ohne Einschränkung auf abgeschlossene Schalen – für hinreichend kleine α (Barbaroux et al. [18, Formel (13)]).

Schließlich untersuchen wir in Kapitel V die Wechselwirkung von Materie mit dem Photonenfeld im nicht-relativistischen Pauli-Fierz-Modell. [79] folgend zeigen wir eine obere und untere Schranke an die Lebensdauer angeregter Zustände und setzen somit die Arbeit von Bach, Fröhlich und Sigal [13] fort.

Ferner betrachten wir in Kapitel VI ein relativistisches Elektron im Furry-Bild und zeigen ebenfalls eine obere und untere Schranke an die Lebensdauer angeregter Zustände. Wie die naive Betrachtung der nach Fermi benannten „Goldenen Regel“ [124, Kapitel XII.6] nahelegt, ist die Lebensdauer in niedrigster Ordnung in der Feinstrukturkonstanten dieselbe wie im Pauli-Fierz-Modell. Die Frage nach der Existenz eines Grundzustandes werden wir offen lassen.

Zu der in der englischsprachigen Literatur „Fermi’s Golden Rule“ genannten Formel sei angemerkt, dass die zu Grunde liegende Theorie bereits Dirac [38] und Wentzel [146] bekannt war. Die Bezeichnung „Fermi’s Golden Rule“ scheint darauf zurückzuführen sein, dass Fermi die Formel [51, Gleichung (VIII.2), S. 142] in einer Vorlesung an der Universität Chicago als „Golden Rule No. 2“ bezeichnet hat. Fermi selbst zitiert als Referenz das Buch von Schiff [130]. Wir werden die Formel kurz als „Goldene Regel“ bezeichnen.

Ich bedanke mich bei Herrn Prof. Dr. Heinz Siedentop für die Betreuung meines Dissertationsvorhabens und für die stete Ermunterung. Bei Herrn Prof. Dr. Heinz Siedentop, Herrn Prof. Dr. Horst Osswald, Herrn Priv.-Doz. Dr. Semjon Wugalter und Herrn Prof. Dr. Ira Herbst bedanke ich mich für die Unterstützung bei der Vorbereitung meines Aufenthaltes an der University of Virginia in Charlottesville sowie bei Herrn Prof. Dr. Ira Herbst für die Gastfreundschaft des dortigen Departments für Mathematik. Für die erfolgreiche Zusammenarbeit bedanke ich mich (in alphabetischer Reihenfolge) bei Herrn Dr. David Hasler, Herrn Prof. Dr. Ira Herbst, Herrn Prof. Dr. Heinz Siedentop und Herrn Dr. Edgardo Stockmeyer. Bei Herrn Prof. Dr. Volker Bach, Herrn Dr. Jean-Marie Barbaroux, Herrn Dr. Roch Cassanas, Herrn Prof. Dr. Hubert Kalf, Herrn Dr. Marco Maceda, Herrn Dr. Oliver Matte, Herrn Sergey Morozov, Herrn Dr. Hagen Neidhardt, Herrn Prof. Dr. Martin Schottenloher und Frau Prof. Dr. Christiane Tretter sowie bei den bereits genannten Personen bedanke ich mich für hilfreiche Diskussionen und Auskünfte.

Teil 1

Dirac-Operatoren

KAPITEL II

Selbstadjungierte Dirac-Operatoren

Wir werden in Kapitel II selbstadjungierte Operatoren betrachten und uns dabei auf diejenigen Definitionen und Eigenschaften beschränken, die wir tatsächlich benötigen. Eine ausführlichere Diskussion findet man z.B. in [141].

Als Anwendung werden wir die Douglas-Kroll-Heß-Transformation (siehe Siedentop und Stockmeyer [138]) auf Atome mit mehr als einem Elektron verallgemeinern.

II.1. Grundlagen

Die Dirac-Matrizes sind [141, Kapitel 1.1]

$$\alpha_i := \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta := \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_{2 \times 2} \end{pmatrix},$$

wobei

$$\sigma_1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

die Pauli-Matrizes sind. Sie erfüllen die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} \alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i &= 2\delta_{ik} \mathbf{1}, & i, k &= 1, 2, 3 \\ \alpha_i \beta + \beta \alpha_i &= 0, & i &= 1, 2, 3 \\ \beta^2 &= 1. \end{aligned}$$

Der freie Dirac-Operator (für die Lichtgeschwindigkeit $c > 0$)

$$(II.1) \quad D_{c,0} := -ic\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + c^2\beta$$

ist ein Operator auf dem Hilbert-Raum $\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$. Er ist auf dem Definitionsbereich $\text{Dom}(D_{c,0}) := H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ selbstadjungiert [141, Kapitel 1.4].

Der Coulomb-Dirac-Operator

$$(II.2) \quad D_{c,\gamma} := -ic\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + c^2\beta - \frac{\gamma}{|\cdot|}$$

ist ebenfalls ein Operator auf dem Hilbert-Raum $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$, der für $\gamma \in \mathbb{R}$ mit $|\gamma| < c\sqrt{3}/2$ auf dem Definitionsbereich $\text{Dom}(D_{c,\gamma}) := \text{Dom}(D_{c,0}) = H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ selbstadjungiert ist [141, Kapitel 4.3.3]. γ wird als Kopplungskonstante bezeichnet. Zur Abkürzung setzen wir

$$V := \frac{1}{|\cdot|}.$$

Wir bezeichnen die positiven bzw. negativen Spektralprojektionen des Operators $D_{c,\gamma}$ mit

$$(II.3) \quad \Lambda_{c,\gamma}^{(+)} := \chi_{[0,\infty)}(D_{c,\gamma}), \quad \Lambda_{c,\gamma}^{(-)} := \chi_{(-\infty,0)}(D_{c,\gamma}),$$

wobei für eine messbare Menge $A \subset \mathbb{R}^n$ die Funktion χ_A deren charakteristische Funktion ist. Im Falle des freien Operators $D_{c,\gamma}$ sind die Spektralprojektionen durch Fouriertransformation unitär äquivalent zu Multiplikationsoperatoren. Sie sind explizit gegeben durch

$$(II.4) \quad \Lambda_{c,0}^{(\pm)} := \frac{1}{2} \left(\mathbf{1} \pm \frac{D_{c,0}}{\sqrt{-c^2\Delta + c^4}} \right).$$

Die Eigenwerte des Operators (II.2) sind (siehe [141, Formel (7.140)] und [24, Formel (14.29)])

$$(II.5) \quad \mathfrak{E}_{n,\kappa}(c, \gamma) := c^2 \left(1 + \frac{\gamma^2/c^2}{\left(n - |\kappa| + \sqrt{\kappa^2 - \gamma^2/c^2} \right)^2} \right)^{-1/2}.$$

Hierbei ist n die Hauptquantenzahl und $\kappa = \pm(j+1/2)$ der Eigenwert des Spin-Bahn-Operators, wobei $j \in \mathbb{N}$ mit $j = 1/2, \dots, n-1/2$ die Drehimpulsquantenzahl ist. Eine Entwicklung dieser Formel in Potenzen von $1/c$ liefert

$$(II.6) \quad \mathfrak{E}_{n,\kappa}(c, \gamma) := c^2 - \frac{\gamma^2}{2n} - \frac{\gamma^4}{2c^2n^3} \left(\frac{1}{|\kappa|} - \frac{3}{4n} \right) + \mathcal{O}(1/c^4).$$

Der erste Term entspricht dabei der Ruheenergie des Elektrons, der zweite ist der Eigenwert des Schrödinger-Operators

$$(II.7) \quad H_\gamma := -\frac{1}{2}\Delta - \frac{\gamma}{|\cdot|}$$

zur Hauptquantenzahl n , und der dritte Term ist die erste relativistische Korrektur. Man beachte, dass die relativistische Korrektur negativ ist. Die Aufspaltung der Schrödinger-Eigenwerte durch die relativistische Korrektur wird als Feinstrukturaufspaltung bezeichnet.

Mit $\tilde{E}_{n,l}(c, \gamma)$ bezeichnen wir ebenfalls die Eigenwerte des Operators $D_{c,\gamma}$, wobei n die Hauptquantenzahl bezeichnet und l die Eigenwerte, die zur Hauptquantenzahl n gehören, der Größe nach nummeriert *ohne* Zählung der Vielfachheit. Es gilt $n \in \mathbb{N}$ und $l \in \mathbb{N}$ mit $l \leq n$. Wir setzen

$$(II.8) \quad E_{n,l}(c, \gamma) := \tilde{E}_{n,l}(c, \gamma) - c^2, \quad E_n(\infty, \gamma) := -\frac{\gamma^2}{2n},$$

wobei $E_n(\infty, \gamma)$ der n -te Eigenwert (ohne Zählung von Vielfachheiten) des Schrödinger-Operators (II.7) ist. Statt $E_n(\infty, \gamma)$ schreiben wir auch $E_n(\gamma)$.

Mit $\phi_{n,l}(c, \gamma)$ bezeichnen wir eine normierte Eigenfunktion des Dirac-Operators (II.2) zum Eigenwert $E_{n,l}(c, \gamma)$.

II.2. Block-Diagonalisierung

II.2.1. Die Douglas-Kroll-Transformation. Wir beginnen mit einer Diskussion der Foldy-Wouthuysen-Transformation. Dazu definieren wir für $p \in \mathbb{R}^3$ die Matrix

$$(II.9) \quad \hat{U}_{\text{FW}}(c, p) := \frac{c^2 + E_c(p) + ce^{-\theta} \beta \boldsymbol{\alpha} \cdot p}{N_c(p)} \\ = \frac{1}{N_c(p)} \begin{pmatrix} (c^2 + E_c(p)) \mathbf{1}_{2 \times 2} & c \boldsymbol{\sigma} \cdot p \\ -c \boldsymbol{\sigma} \cdot p & (c^2 + E_c(p)) \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{pmatrix}$$

mit $E_c(p) := \sqrt{c^2 p^2 + c^4}$ und $N_c(p) := \sqrt{2E_c(p)(c^2 + E_c(p))}$. Mit $\hat{U}_{\text{FW}}(c)$ bezeichnen wir den maximalen Matrixmultiplikationsoperator auf $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$, der durch $U_{\text{FW}}(p, c)$ erzeugt wird. Analog definieren wir

$$(II.10) \quad \hat{V}_{\text{FW}}(p, c) := \frac{c^2 + E_c(p) - c \beta \boldsymbol{\alpha} \cdot p}{N_c(p)} \\ = \frac{1}{N_c(p)} \begin{pmatrix} (c^2 + E_c(p)) \mathbf{1}_{2 \times 2} & -c \boldsymbol{\sigma} \cdot p \\ c \boldsymbol{\sigma} \cdot p & (c^2 + E_c(p)) \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{pmatrix}$$

und $V_{\text{FW}}(c)$. Die Fouriertransformierten dieser Operatoren sind

$$U_{\text{FW}}(c) := \mathcal{F}^{-1} \hat{U}_{\text{FW}}(c) \mathcal{F}, \quad V_{\text{FW}}(c) := \mathcal{F}^{-1} \hat{V}_{\text{FW}}(c) \mathcal{F}.$$

Es gilt $V_{\text{FW}}(c) = U_{\text{FW}}(c)^* = U_{\text{FW}}(c)^{-1}$. Die unitäre Transformation $U_{\text{FW}}(c)$ wird Foldy-Wouthuysen-Transformation genannt. Sie (block-)diagonalisiert den freien Dirac-Operator (siehe [141, Kapitel 1.4]), d.h. es gilt

$$(II.11) \quad U_{\text{FW}}(c) D_{c,0} V_{\text{FW}}(c) = \begin{pmatrix} \sqrt{-c^2 \Delta + c^4} & 0 \\ 0 & -\sqrt{-c^2 \Delta + c^4} \end{pmatrix} = \sqrt{-c^2 \Delta + c^4} \beta$$

$$(II.12) \quad U_{\text{FW}}(c) \Lambda_{c,0}^{(\pm)} V_{\text{FW}}(c) = \beta_{\pm}$$

mit $\beta_{\pm} := \frac{1}{2} (\mathbf{1} \pm \beta)$.

Die Arbeit von Foldy und Wouthuysen [56] beschreibt nicht nur die obige Block-Diagonalisierung des freien Dirac-Operators, sondern enthält auch ein störungstheoretisches Verfahren zur Block-Diagonalisierung des Dirac-Operators mit Potentialen.

Leider konvergiert die dort angegebene Entwicklung nicht (siehe Thaller [141, Kapitel 6] und die dort zitierte Literatur). Der Grund hierfür ist, dass die richtige Entwicklung etwa im Hinblick auf Konvergenz der Spektren die Kopplungskonstante des Potentials als Entwicklungsparameter benützen sollte. Eine entsprechende iterative störungstheoretische Methode stammt von Douglas und Kroll [42] und wurde von Jansen und Heß [94] korrigiert. Die Methode ist für numerische Berechnungen sehr attraktiv, da die dabei auftretenden Hamilton-Operatoren auf Pauli-Spinoren operieren. Sie wurde während der letzten zwanzig Jahre für praktische Rechnungen in der relativistischen Quantenchemie erfolgreich eingesetzt (siehe [22, 94, 99, 147, 126, 127] und die dort zitierte Literatur).

Aus der Sicht der Mathematik wurde der Einteilchen-Fall (für die Lichtgeschwindigkeit $c = 1$) von Siedentop und Stockmeyer untersucht [138]. Sie beweisen – unter geeigneten Voraussetzungen an das Potential – die Existenz einer Familie $U_{\text{DK}}(\gamma)$ von unitären Operatoren, die in der Kopplungskonstante γ analytisch sind. Diese

unitäre Transformation entkoppelt elektronische und positronische Zustände exakt. Außerdem haben Siedentop und Stockmeyer gezeigt, dass der in eine Potenzreihe in γ entwickelte block-diagonalisierte Operator zumindest formal in den niedrigsten Ordnungen mit den Operatoren von Douglas, Kroll und Heß übereinstimmt. Außerdem haben sie gezeigt, dass die Spektren der „abgeschnittenen“ Operatoren gegen das Spektrum des ursprünglichen Operators konvergieren.

Wir setzen zur Abkürzung $D_\gamma := D_{1,\gamma}$ und $P_\pm^\gamma := \Lambda_{1,\gamma}^{(\pm)}$. Die Douglas-Kroll-Transformation ist definiert durch

$$(II.13) \quad U_{\text{DK}}(\gamma) := (P_+^0 P_+^\gamma + P_-^0 P_-^\gamma)(1 - (P_+^0 - P_+^\gamma))^2)^{-1/2}.$$

Wir führen einige wichtige Eigenschaften von $U_{\text{DK}}(\gamma)$ ([138, Theorem 1, Theorem 2, Lemma 9]) im folgenden Lemma auf und setzen $\gamma_c := 0.3775$.

LEMMA II.1. (1) $U_{\text{DK}}(\gamma)$ ist analytisch in γ und unitär für $|\gamma| < 0.6841$. Es gilt die Beziehung

$$U_{\text{DK}}(\gamma)P_\pm^\gamma = P_\pm^0 U_{\text{DK}}(\gamma).$$

- (2) Der Operator $|D_0|^{1/2}U_{\text{DK}}(\gamma)|D_0|^{-1/2}$ ist beschränkt und analytisch in γ für $\gamma < \gamma_c$.
- (3) Der Operator $|D_0|^{-1/2}U_{\text{DK}}(\gamma)D_\gamma U_{\text{DK}}(\gamma)^*|D_0|^{-1/2}$ ist beschränkt und analytisch in γ für $\gamma < \gamma_c$.

Wir werden den Beweis hier nicht wiedergeben, bemerken jedoch, dass wir die zu Grunde liegenden Ideen in den Kapiteln III.2.3 und III.2.4 verwenden werden.

Wir halten außerdem fest, dass man das Hauptergebnis der Arbeit von Siedentop und Stockmeyer über die Existenz selbstadjungierter Realisierungen der „abgeschnittenen“ Operatoren und deren Normresolventenkonvergenz aus den Sätzen II.3 und II.5 in Kapitel II.2.2 zurückerhält, wenn man dort den Fall $N = 1$ betrachtet. Wir verzichten daher darauf, das Ergebnis an dieser Stelle gesondert wiederzugeben.

Wir werden außerdem folgende Ungleichung benötigen: Für $0 \leq \gamma < \frac{\sqrt{3}}{2}$ setzen wir $C_\gamma := \frac{1}{3} \left(\sqrt{4(\gamma)^2 + 9} - 4\gamma \right)$ und $d_\gamma := \frac{1}{2}(1 + C_\gamma^2 - \sqrt{(1 - C_\gamma^2)^2 + 4\gamma^2 C_\gamma^2})$. Dann gilt das folgende Lemma (siehe Morozov [117] und auch Brummelhuis et al [31]):

LEMMA II.2. Für $0 \leq \gamma < \frac{\sqrt{3}}{2}$ gilt die Operator-Ungleichung

$$(II.14) \quad |D_\gamma|^2 \geq d_\gamma^2 |D_0|^2.$$

Diese Ungleichung wird uns in Lemma A.7 bei der Behandlung von Dirac-Fock-Operatoren wieder begegnen.

II.2.2. Verallgemeinerung auf den N-Teilchen-Fall. In diesem Abschnitt folgen wir nun [88] und verallgemeinern die Ergebnisse aus [138] auf den N -Teilchen-Coulomb-Dirac-Operator (mit $N > 1$) im Furry-Bild, d.h. wir schränken den Operator auf die positiven Spektralräume der Einteilchen-Dirac-Operatoren ein. Mit Hilfe einfacher Verallgemeinerungen der Methoden in [138] beweisen wir die Normresolventenkonvergenz der Operatoren, die man durch Abschneiden der Potenzreihenentwicklung in γ der transformierten projizierten Operatoren erhält.

Wir beginnen mit der Beschreibung der Problemstellung und der Einführung der erforderlichen Notation. Den N -Teilchen-Hilbert-Raum bezeichnen wir mit

$$\mathcal{H}^{(N)} = \mathcal{H} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H},$$

wobei $\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$ ist. Die Fortsetzung eines abschließbaren Operators A auf \mathcal{H} mit Definitionsbereich \mathcal{D} nach $\mathcal{H}^{(N)}$, der auf die j -te Komponente wirkt, schreiben wir als

$$A_j := \mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \underbrace{A}_{j\text{-te Stelle}} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1},$$

und das n -fache Tensorprodukt als

$$\mathcal{A} := A \otimes \cdots \otimes A.$$

Wenn A auf \mathcal{D} wesentlich selbstadjungiert ist, dann sind beide Operatoren auf $\bigotimes_{j=1}^N \mathcal{D}$ wesentlich selbstadjungiert (siehe [122], Kapitel VIII.10). Aus technischen Gründen werden wir den Operator $\mathcal{D}_0 := \sum_{j=1}^N |D_0|_j$ benötigen.

Der Coulomb-Dirac-Operator ist formal gegeben durch

$$(II.15) \quad H_{\text{CD}}^{(N)} := \sum_{j=1}^N [D_\gamma]_j + \frac{\gamma}{3} \sum_{1 \leq i < j \leq N} W_{ij},$$

wobei 3 die Kernladungszahl des Atoms ist, und γ die Kopplungskonstante des Einteilchen-Potentials. Physikalisch betrachtet gilt $\gamma = 3\alpha$, wobei $\alpha \approx 1/137$ die Feinstrukturkonstante ist.

W_{ij} ist die Wechselwirkung zwischen den Teilchen i und j , die für $f \in H^1(\mathbb{R}^3)^4 \otimes \cdots \otimes H^1(\mathbb{R}^3)^4$ durch

$$(W_{ij}f)(x_1, \dots, x_N) := \frac{f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N)}{|x_i - x_j|}$$

gegeben ist. Wir setzen $W_\gamma := \frac{\gamma}{2} \sum_{1 \leq i < j \leq N} W_{ij}$. Es ist bekannt, dass der Operator in (II.15) ohne die Elektron-Elektron-Wechselwirkung W_γ die gesamte reelle Achse als Spektrum hat.

Anstelle von (II.15) betrachten wir den Coulomb-Dirac-Operator im Furry-Bild, d.h. wir schränken den Operator (II.15) auf die positiven Spektralräume der einzelnen Einteilchen-Operatoren D_γ ein. Der Hilbert-Raum ist

$$\mathcal{H}_+^{(N)}(\gamma) = P_+^\gamma \mathcal{H} \otimes \cdots \otimes P_+^\gamma \mathcal{H}.$$

Die N -Teilchen-Projektion ist gegeben durch

$$\mathcal{P}_+^\gamma := P_+^\gamma \otimes \cdots \otimes P_+^\gamma.$$

Wir interessieren uns für den Operator $\mathcal{P}_+^\gamma H_{\text{CD}}^{(N)} \mathcal{P}_+^\gamma$, insbesondere für seine Realisierung im Raum der N -Teilchen-Pauli-Spinoren.

Dazu betrachten wir die N -Teilchen-Versionen der Douglas-Kroll-Transformation und der Foldy-Wouthuysen-Transformation

$$\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma) := U_{\text{DK}}(\gamma) \otimes \cdots \otimes U_{\text{DK}}(\gamma)$$

und

$$\mathcal{U}_{\text{FW}} := U_{\text{FW}} \otimes \cdots \otimes U_{\text{FW}}.$$

Es gilt $\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)\mathcal{P}_+^\gamma\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)^{-1} = \mathcal{P}_+^0$. Des Weiteren erfüllt die N -Teilchen-Foldy-Wouthuysen-Transformation \mathcal{U}_{FW} die Beziehung $\mathcal{U}_{\text{FW}}\mathcal{P}_+^0 = \beta_+ \otimes \cdots \otimes \beta_+ \mathcal{U}_{\text{FW}}$. Daher ist der formale Hamilton-Operator im Raum der N -Teilchen-Pauli-Spinoren gegeben durch

$$(II.16) \quad H_{\text{diag}}^N = \mathcal{U}_{\text{FW}}\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)\mathcal{P}_+^\gamma H_{\text{CD}}^{(N)}\mathcal{P}_+^\gamma\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)^{-1}\mathcal{U}_{\text{FW}}^{-1}.$$

Das Hauptergebnis dieses Abschnitts, Satz II.5, impliziert, dass die Spektren der Operatoren, die durch Entwicklung von (II.16) in Potenzreihen in γ entstehen, gegen das Spektrum des Furry-Operators konvergieren, der formal durch $\mathcal{P}_+^\gamma H_{\text{CD}}^{(N)}\mathcal{P}_+^\gamma$ gegeben ist.

Bevor wir dieses Ergebnis formulieren können, müssen wir sicherstellen, dass die erwähnten Operatoren überhaupt selbstadjungierte Realisierungen besitzen.

Wir bemerken, dass für $|\gamma| < 1$ die Ungleichung $|D_\gamma| \geq \sqrt{1-\gamma^2} > 0$ gilt (vgl. Gleichung (II.5)). Wir definieren den Operator $\tilde{T}_\gamma : \mathfrak{H}_+^{(N)} \rightarrow \mathfrak{H}_+^{(N)}$ ohne Elektron-Elektron-Wechselwirkung durch

$$\tilde{T}_\gamma = \mathcal{P}_+^\gamma \sum_{i=1}^N [D_\gamma]_i \mathcal{P}_+^\gamma,$$

mit Definitionsbereich $\text{Dom}(\tilde{T}_\gamma) = \mathcal{P}_+^\gamma H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)^{\hat{\otimes} N}$. Für $|\gamma| < \sqrt{3}/2$ ist der Operator \tilde{T}_γ wesentlich selbstadjungiert ([122, Theorem VIII.33]), wobei $\hat{\otimes}$ das algebraische Tensorprodukt ist. Wir bezeichnen den Abschluss von \tilde{T}_γ mit T_γ und seinen Formdefinitionsbereich mit $\mathfrak{Q}(T_\gamma)$.

Wir setzen $q(f, g) := (f, T_\gamma g) + (f, W_\gamma g)$ für $f, g \in \mathfrak{Q}(T_\gamma)$. Dann liefert der folgende Satz eine selbstadjungierte Realisierung des Furry-Operators.

SATZ II.3 ([88], Theorem 1). *Es sei $0 \leq \gamma < \sqrt{3}/2$. Dann gibt es einen selbstadjungierten Operator $H_{\gamma,+} : \mathcal{H}_+^{(N)}(\gamma) \rightarrow \mathcal{H}_+^{(N)}(\gamma)$ mit $\mathfrak{Q}(H_{\gamma,+}) = \mathfrak{Q}(T_\gamma) = \mathcal{P}_+^\gamma H^{1/2}(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{4N})$, wobei $\mathcal{P}_+^\gamma (H^1(\mathbb{R}^3)^4)^{\otimes N}$ determinierender Formbereich für den Operator $H_{\gamma,+}$ ist, so dass für alle $f, g \in \mathfrak{Q}(H_{\gamma,+})$ die Gleichung*

$$q(f, g) = (f, H_{\gamma,+} g)$$

gilt. Diese selbstadjungierte Fortsetzung ist die Friedrichs-Fortsetzung des auf dem Definitionsbereich $\mathcal{P}_+^\gamma \hat{\otimes}_{j=1}^N H^1(\mathbb{R}^3)^4$ symmetrischen Operators $\tilde{T}_\gamma + \mathcal{P}_+^\gamma W_\gamma \mathcal{P}_+^\gamma$.

Zum Beweis von Satz II.3 benötigen wir das folgende Lemma:

LEMMA II.4 ([88], Lemma 3). *Es sei $f \in H^{1/2}(\mathbb{R}^3 N, \mathbb{C}^{4N})$. Dann gilt*

$$(f, W_{ij} f) \leq \frac{\pi}{2} (f, |D_0|_j f) \text{ für } i \neq j.$$

BEWEIS. Sei $f \in \hat{\otimes}_{j=1}^N H^1(\mathbb{R}^3)^4$ beliebig. Dann gilt

$$\begin{aligned}
(f, W_{ij}f) &= \\
&= \int dx_1 \cdots dx_N \overline{f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_N)} \frac{1}{|x_i - x_j|} f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_N) \\
&= \int dx_1 \cdots dx_N \overline{f(x_1, \dots, x_i + x_j, \dots, x_N)} \frac{1}{|x_i|} f(x_1, \dots, x_i + x_j, \dots, x_N) \\
&\leq \frac{\pi}{2} \int dx_1 \cdots dx_N \overline{f(x_1, \dots, x_i + x_j, \dots, x_N)} |D_0|_i f(x_1, \dots, x_i + x_j, \dots, x_N) \\
&\leq \frac{\pi}{2} (f, |D_0|_i f),
\end{aligned}$$

wobei wir die Kato-Ungleichung verwendet haben. Diese Ungleichung lässt sich auf $f \in H^{1/2}(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{4N})$ fortsetzen. \square

BEWEIS VON SATZ II.3 .

Schritt 1: Wohldefiniertheit von q . Wegen Lemma II.2 gibt es eine positive Konstante d_γ , so dass

$$(II.17) \quad (f, |D_0|_i f) \leq \frac{1}{d_\gamma} (f, |D_\gamma|_i f) \leq \frac{1}{d_\gamma} (f, T_\gamma f)$$

gilt. Daraus folgt zusammen mit Lemma II.4 die Wohldefiniertheit von q .

Schritt 2: Definition von $H_{\gamma,+}$. Wir folgen dem Beweis des KLMN-Satzes und verwenden die Notation von Reed-Simon [123, Theorem X.17]. Es sei $f \in \mathfrak{Q}(T_\gamma)$. Wir zeigen zunächst $(f, W_\gamma f) \leq C(f, T_\gamma f)$ für ein $C > 0$. Wegen $f \in \mathcal{H}_+^{(N)}$ gilt

$$\begin{aligned}
(T_\gamma^{-1/2} f, W_\gamma T_\gamma^{-1/2} f) &= \\
(II.18) \quad &= \frac{\gamma}{Z} \sum_{1 \leq i < j \leq N} (T_\gamma^{-1/2} f, |D_0|_i^{1/2} |D_0|_i^{-1/2} W_{ij} |D_0|_i^{-1/2} |D_0|_i^{1/2} T_\gamma^{-1/2} f) \\
&\leq \frac{\gamma\pi}{2Z} \sum_{1 \leq i < j \leq N} (T_\gamma^{-1/2} f, |D_0|_i T_\gamma^{-1/2} f) \leq \frac{\gamma\pi N(N-1)}{4Z d_\gamma} \|f\|^2 =: C \|f\|^2,
\end{aligned}$$

wobei wir Lemma II.4 und Gleichung (II.17) benützt haben. Daher gilt

$$(II.19) \quad (f, T_\gamma f) + (f, W_\gamma f) \leq (1 + C)(f, T_\gamma f) \leq (1 + C)(f, (T_\gamma + W_\gamma)f).$$

Dies zeigt, dass die Normen $\|\cdot\|_{+1, T_\gamma}$ und $\|\cdot\|_{+1, q}$ äquivalent sind. Daher ist q eine halbbeschränkte, abgeschlossene quadratische Form auf $\mathfrak{Q}(T_\gamma)$, die daher einen selbstadjungierten Operator $H_{\gamma,+}$ mit Formdefinitionsbereich $\mathfrak{Q}(H_{\gamma,+}) = \mathfrak{Q}(T_\gamma)$ definiert.

Schritt 3: Bestimmung des Formdefinitionsbereichs. Es gilt die folgende Kette von Ungleichungen, wobei wir Lemma II.2 im zweiten und die Hardy-Ungleichung im dritten Schritt verwendet haben:

$$\begin{aligned}
(II.20) \quad d_\gamma \sqrt{-\Delta_{3N} + 1} &\leq d_\gamma \sum_{i=1}^N |D_0|_i \leq \sum_{i=1}^N |D_\gamma|_i \\
&\leq \sum_{i=1}^N (1 + 2\gamma) |D_0|_i \leq (1 + 2\gamma) N \sqrt{-\Delta_{3N} + 1}
\end{aligned}$$

Die Ungleichungen (II.20) implizieren, dass $H^{1/2}(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{4N})$ bezüglich

$$b(f, f) := \left(\left(\sum_{i=1}^N |D_\gamma|_i \right)^{1/2} f, \left(\sum_{i=1}^N |D_\gamma|_i \right)^{1/2} f \right)$$

für $f \in H^{1/2}(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{4N})$ vollständig ist. Da \mathcal{P}_+^γ mit $\sum_{i=1}^N |D_\gamma|_i$ vertauscht, folgt

$$\mathcal{P}_+^\gamma H^{1/2}(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{4N}) \subset H^{1/2}(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{4N}).$$

Ferner ist $\mathcal{P}_+^\gamma H^{1/2}(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{4N})$ eine abgeschlossene Teilmenge von $H^{1/2}(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{4N})$ bezüglich der von b erzeugten Norm. Folglich ist $\mathcal{P}_+^\gamma H^{1/2}(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{4N})$ vollständig bezüglich der Einschränkung von b . Da \tilde{T}_γ wesentlich selbstadjungiert ist, ist der selbstadjungierte Operator, der zu der Einschränkung von b gehört, gleich T_γ . Daher gilt

$$\mathfrak{Q}(T_\gamma) = \mathcal{P}_+^\gamma H^{1/2}(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{4N}).$$

Da offensichtlich

$$\text{Dom}(H_{\gamma,+}^N) \subset \mathfrak{Q}(H_{\gamma,+}^N) = \mathcal{P}_+^\gamma H^{1/2}(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{4N})$$

gilt, folgt, dass $H_{\gamma,+}^N$ die Friedrichsfortsetzung des symmetrischen Operators $\tilde{T}_\gamma + \mathcal{P}_+^\gamma W_\gamma \mathcal{P}_+^\gamma$ ist. \square

Wir wenden uns nun dem Operator $\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma) := U_{\text{DK}}(\gamma) \otimes \cdots \otimes U_{\text{DK}}(\gamma)$ zu, der eine unitäre Abbildung $\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma) : \mathcal{H}_+^{(N)}(\gamma) \rightarrow \mathcal{H}_+^{(N)}(0)$ ist. Wir definieren den Operator $\tilde{H}_{\gamma,+} : \mathcal{H}_{+,0}^{(N)} \rightarrow \mathcal{H}_{+,0}^{(N)}$ durch

$$\tilde{H}_{\gamma,+} := \mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma) H_{\gamma,+} \mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)^{-1},$$

wobei $\mathcal{H}_{+,0}^{(N)} := \mathcal{H}_+^{(N)}(0)$ ist. Entsprechend definieren wir den Operator $H_{\gamma,+}^{\text{diag}} : L^2(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{2N}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{2N})$ durch

$$H_{\gamma,+}^{\text{diag}} = \mathcal{U}_{\text{FW}} \tilde{H}_{\gamma,+} \mathcal{U}_{\text{FW}}^{-1},$$

wobei wir die Foldy-Wouthuysen-Transformation als Abbildung $\mathcal{U}_{\text{FW}} : \mathcal{H}_{+,0}^{(N)} \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)^{\otimes N} = L^2(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{2N})$ auffassen.

Auf diese Weise kann $H_{\gamma,+}^{\text{diag}}$ als die Block-Diagonalisierung von $\tilde{H}_{\gamma,+}$ betrachtet werden. Wegen Satz II.3 sind $\tilde{H}_{\gamma,+}$ und $H_{\gamma,+}^{\text{diag}}$ selbstadjungierte Operatoren mit Formdefinitionsbereich $\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma) \mathfrak{Q}(T_\gamma)$ bzw. $\mathcal{U}_{\text{FW}} \mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma) \mathfrak{Q}(T_\gamma)$. Genauer gilt

$$\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma) \mathfrak{Q}(T_\gamma) = \mathcal{P}_+^0 H^{1/2}(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{4N}),$$

da $\mathcal{D}_0^{1/2} \mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma) \mathcal{D}_0^{-1/2}$ ein beschränkter Operator ist (siehe den Beweis von Lemma II.10). Da \mathcal{U}_{FW} mit \mathcal{D}_0 vertauscht, erhalten wir

$$\mathcal{U}_{\text{FW}} \mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma) \mathfrak{Q}(T_\gamma) = H^{1/2}(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{2N}).$$

Wir bezeichnen mit $\tilde{h}_{\gamma,+}^k$ die formale Taylorreihe von $H_{\gamma,+}^{\text{diag}}$ bis einschließlich der Potenz γ^k , die ein Operator auf

$$\mathcal{C} := \mathcal{U}_{\text{FW}} \mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma) \mathcal{P}_+(\gamma) H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)^{\otimes N}$$

ist. \mathcal{C} ist determinierender Formbereich für $H_{\gamma,+}^{\text{diag}}$. Wir setzen

$$R_\gamma^k = H_{\gamma,+}^{\text{diag}} - \tilde{h}_{\gamma,+}^k.$$

Das Hauptergebnis dieses Abschnitts ist:

SATZ II.5 ([88], Theorem 2). Für $0 \leq \gamma < \gamma_c$ und hinreichend große k besitzen die Operatoren $\tilde{h}_{\gamma,+}^k$ eine selbstadjungierte Fortsetzung $h_{\gamma,+}^k$, die $\text{Dom}(h_{\gamma,+}^k) \subset \mathfrak{Q}(H_{\gamma,+}^{\text{diag}}) = H^{1/2}(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{2N})$ erfüllt. Ferner gilt $h_{\gamma,+}^k \rightarrow H_{\gamma,+}^{\text{diag}}$ für $k \rightarrow \infty$ im Sinne von Normresolventenkonvergenz.

Wir halten zunächst einige Bemerkungen fest:

BEMERKUNG II.6. Die Normresolventenkonvergenz impliziert die Konvergenz der Spektren und Spektralprojektionen [122, Theorem VIII.2.3].

BEMERKUNG II.7. Die unitäre Transformation $U_{\text{DK}}(\gamma)$ ist nicht eindeutig. Mit der Wahl aus [138] ist bekannt, dass Satz II.5 mindestens für $\gamma_c = 0,3775$ gilt, was einer kritischen Kernladungszahl von $Z = 52$ entspricht.

BEMERKUNG II.8. Die Operatoren $h_{\gamma,+}^k$ wirken auf dem Raum der N -Teilchen-Pauli-Spinoren. Unter Verwendung der expliziten Ausdrücke für $U_{\text{DK}}(\gamma)$ und U_{FW} , lassen sie sich bis zu jeder gewünschten Ordnung k berechnen (siehe [138, Appendix A] für ein Beispiel). Der Operator $h_{\gamma,+}^k$ ist eine selbstadjungierte Realisierung des Douglas-Kroll-Hess-Operators der Ordnung k für N Teilchen.

Bevor wir Satz II.5 beweisen können, müssen wir noch eine Reihe technischer Hilfsaussagen zeigen (siehe [88], Lemma 4 bis Lemma 6):

LEMMA II.9. Für $|\gamma| < \gamma_c$ ist der Operator $\mathcal{D}_0^{-1/2} H_{\gamma,+}^{\text{diag}} \mathcal{D}_0^{-1/2}$ beschränkt und reell analytisch um null. Insbesondere gilt $\|\mathcal{D}_0^{-1/2} R_\gamma^k \mathcal{D}_0^{-1/2}\| \rightarrow 0$.

BEWEIS. Wir zeigen zunächst, dass $|D_0|_i^{1/2} \mathcal{D}_0^{-1/2}$ beschränkt ist. Zum Beweis wählen wir ein beliebiges $f \in \hat{\otimes}_{j=1}^N H^1(\mathbb{R}^3)^4$ und bemerken die Identität

$$\| |D_0|_i^{1/2} f \|^2 = (f, |D_0|_1 f) \leq (f, |D_0|_1 f) + \dots + (f, |D_0|_N f) = \| \mathcal{D}_0^{1/2} f \|^2.$$

Daraus folgt die Behauptung, da $\hat{\otimes}_{j=1}^N H^1(\mathbb{R}^3)^4$ in $\mathcal{H}^{(N)}$ dicht ist.

Wegen Lemma II.1 ist der Operator $|D_0|^{-1/2} U_{\text{DK}}(\gamma) D_\gamma U_{\text{DK}}(\gamma)^* |D_0|^{-1/2}$ beschränkt und analytisch in γ für $|\gamma| < \gamma_c$, und dasselbe gilt für den Operator $[|D_0|^{-1/2} U_{\text{DK}}(\gamma) D_\gamma U_{\text{DK}}(\gamma)^* |D_0|^{-1/2}]_m$ mit $m = 1, \dots, N$. Um die Behauptung zu beweisen, reicht es, die Analytizität jedes einzelnen Summanden von $\tilde{H}_{\gamma,+}$ zu zeigen.

Einteilchen-Terme: Die Analytizität folgt unmittelbar aus

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_0^{-1/2} [U_{\text{DK}}(\gamma) P_+^\gamma D_\gamma P_+^\gamma U_{\text{DK}}(\gamma)^{-1}]_m \mathcal{D}_0^{-1/2} &= \mathcal{P}_+^0 \mathcal{D}_0^{-1/2} [|D_0|^{1/2}]_m \\ &\times [|D_0|^{-1/2} U_{\text{DK}}(\gamma) D_\gamma U_{\text{DK}}(\gamma)^* |D_0|^{-1/2}]_m |D_0|_m^{1/2} \mathcal{D}_0^{-1/2} \mathcal{P}_+^0. \end{aligned}$$

Wechselwirkungsterme: Der Operator

$$|D_0|_m^{-1/2} \mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma) |D_0|_m^{1/2} = U_{\text{DK}}(\gamma) \otimes \dots \otimes |D_0|^{-1/2} U_{\text{DK}}(\gamma) |D_0|^{1/2} \dots \otimes U_{\text{DK}}(\gamma)$$

ist wegen Lemma II.1 analytisch, und $|D_0|_m^{-1/2}W_{m,l}|D_0|_m^{-1/2}$ ist wegen Lemma II.4 beschränkt. Daher folgt aus der Gleichung

$$\begin{aligned} & \mathcal{D}_0^{-1/2}\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)\mathcal{P}_+^\gamma W_{m,l}\mathcal{P}_+^\gamma\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)^{-1}\mathcal{D}_0^{-1/2} \\ &= \mathcal{P}_+^0\mathcal{D}_0^{-1/2}\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)W_{m,l}\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)^{-1}\mathcal{D}_0^{-1/2}\mathcal{P}_+^0 \\ &= \mathcal{P}_+^0\mathcal{D}_0^{-1/2}|D_0|_m^{1/2}|D_0|_m^{-1/2}\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)|D_0|_m^{1/2}|D_0|_m^{-1/2}W_{m,l}|D_0|_m^{-1/2} \\ &\quad \times |D_0|_m^{1/2}\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)^{-1}|D_0|_m^{-1/2}|D_0|_m^{1/2}\mathcal{D}_0^{-1/2}\mathcal{P}_+^0 \end{aligned}$$

die Analytizität des Wechselwirkungsterms.

Da \mathcal{U}_{FW} mit \mathcal{D}_0 vertauscht, ist auch der Operator $\mathcal{D}_0^{-1/2}H_{\gamma,+}^{\text{diag}}\mathcal{D}_0^{-1/2}$ analytisch und hat daher eine konvergente Taylorreihe mit $\|\mathcal{D}_0^{-1/2}R_\gamma^k\mathcal{D}_0^{-1/2}\| \rightarrow 0$ für $k \rightarrow \infty$. \square

LEMMA II.10. *Es sei $|\gamma| < \gamma_c$. Dann ist der Operator $\mathcal{D}_0^{1/2}\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)\mathcal{D}_0^{-1/2}$ beschränkt auf $\mathcal{H}_0^{(N)}$.*

BEWEIS. Es gilt die Ungleichung $\mathcal{D}_0^{1/2} \leq \sum_{i=1}^N |D_0|_i^{1/2}$. Wegen Lemma II.1 ist der Operator $|D_0|^{1/2}\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)|D_0|^{-1/2}$ beschränkt. Daher ist

$$\begin{aligned} & \|\mathcal{D}_0^{1/2}\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)\mathcal{D}_0^{-1/2}\| \\ &= \|\mathcal{D}_0^{1/2}\left(\sum_{i=1}^N |D_0|_i^{1/2}\right)^{-1}\sum_{i=1}^N |D_0|_i^{1/2}\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)\mathcal{D}_0^{-1/2}\| \\ &= \|\mathcal{D}_0^{1/2}\left(\sum_{i=1}^N |D_0|_i^{1/2}\right)^{-1}\sum_{i=1}^N (|D_0|_i^{1/2}\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)|D_0|_i^{-1/2}|D_0|_i^{1/2}\mathcal{D}_0^{-1/2})\| \\ &\leq \sum_{i=1}^N \||D_0|_i^{1/2}\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)|D_0|_i^{-1/2}|D_0|_i^{1/2}\mathcal{D}_0^{-1/2}\| \\ &\leq \sum_{i=1}^N \||D_0|_i^{1/2}\mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)|D_0|_i^{-1/2}\| \||D_0|_i^{1/2}\mathcal{D}_0^{-1/2}\| \end{aligned}$$

endlich. \square

LEMMA II.11. *Es sei $f \in \mathfrak{H}_+^{(N)}(\gamma)$ und $0 \leq \gamma < \sqrt{3}/2$. Dann gilt die Abschätzung $\|\mathcal{D}_0^{1/2}H_{\gamma,+}^{-1/2}f\| \leq 1/\sqrt{d_\gamma}\|f\|$.*

BEWEIS. Sei $f \in \mathcal{P}_+(\gamma)(H^1(\mathbb{R}^3)^4)^{\otimes N}$ beliebig. Mittels Lemma II.2 und $W_\gamma \geq 0$ erhalten wir

$$(f, \mathcal{D}_0 f) \leq \frac{1}{d_\gamma}(f, \sum_j (P_+^\gamma D_\gamma P_+^\gamma)_j f) \leq \frac{1}{d_\gamma}(f, H_{\gamma,+} f).$$

\square

Mit Hilfe dieser Lemmata sind wir schließlich in der Lage, den Beweis von Satz II.5 anzutreten. Wir bemerken, dass wir zum Beweis der Dilatationsanalytizität des Operators für ein relativistisches Elektron in Wechselwirkung mit dem quantisierten Strahlungsfeld in Kapitel VI.2 ähnliche Methoden wie in den obigen Lemmata verwenden werden.

BEWEIS VON SATZ II.5. Wegen [97, Theorem VI.3.11 und Corollary VI.3.12] reicht es zu zeigen, dass es eine Folge a_k gibt mit $a_k \rightarrow 0$ für $k \rightarrow \infty$, so dass für alle $f \in \mathcal{C}$

$$(II.21) \quad (f, R_\gamma^k f) \leq a_k (f, H_{\gamma,+}^{\text{diag}} f)$$

gilt. Das ist äquivalent zu

$$(II.22) \quad (f, H_{\gamma,+}^{-1/2} \mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)^{-1} \mathcal{U}_{\text{FW}}^{-1} R_\gamma^k \mathcal{U}_{\text{FW}} \mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma) H_{\gamma,+}^{-1/2} f) \rightarrow 0$$

für $f \in \mathcal{P}_+(\gamma) H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)^{\otimes N}$. Es gilt

$$(II.23) \quad \begin{aligned} & (f, H_{\gamma,+}^{-1/2} \mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma)^{-1} \mathcal{U}_{\text{FW}}^{-1} R_\gamma^k \mathcal{U}_{\text{FW}} \mathcal{U}_{\text{DK}}(\gamma) H_{\gamma,+}^{-1/2} f) \\ & \leq \| \mathcal{D}_0^{-1/2} R_\gamma^k \mathcal{D}_0^{-1/2} \| \| \mathcal{D}_0^{1/2} \mathcal{U}_\gamma \mathcal{D}_0^{-1/2} \|^2 \| \mathcal{D}_0^{1/2} H_{\gamma,+}^{-1/2} f \|^2, \end{aligned}$$

wobei der letzte Term wegen der Lemmata II.9, II.10 und II.11 gegen Null konvergiert. Im letzten Schritt haben wir benützt, dass U_{FW} mit $|D_0|$ vertauscht und daher \mathcal{U}_{FW} mit \mathcal{D}_0 und jeder Funktion davon vertauscht. \square

KAPITEL III

Komplex dilatierte Dirac-Operatoren

In Kapitel III wenden wir uns komplex dilatierten Operatoren zu. Solche Operatoren erhält man bei der Behandlung von Resonanzen mittels der Methode der komplexen Dilatation (siehe z.B. [2, 14, 137, 144]). Insbesondere werden wir für solche Operatoren eine Spektralanalyse durchführen, positive und negative Spektralprojektionen definieren und den nicht-relativistischen Limes untersuchen. Diese Ergebnisse werden in Kapitel VI verwendet werden, sind jedoch auch von unabhängigem Interesse.

III.1. Definitionen

Wir definieren für $\theta \in \mathbb{C}$, $\gamma \in \mathbb{R}$ und $c \geq 1$ die dilatierten Operatoren

$$(III.1) \quad D_{c,0}(\theta) := -ice^{-\theta} \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + c^2 \beta$$

und

$$(III.2) \quad D_{c,\gamma}(\theta) := -ice^{-\theta} \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + c^2 \beta - \frac{\gamma e^{-\theta}}{|\cdot|}$$

auf dem Definitionsbereich $\text{Dom}(D_{c,0}(\theta)) = \text{Dom}(D_{c,\gamma}(\theta)) = H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$. Es ist klar, dass $D_{c,0}(\theta)$ auf diesem Definitionsbereich abgeschlossen und (wegen der Hardy-Ungleichung) $D_{c,\gamma}(\theta)$ zumindest wohldefiniert ist. Weitere Eigenschaften werden wir in Kapitel III.2.2 beweisen. Zur Abkürzung setzen wir

$$V(\theta) := \frac{e^{-\theta}}{|\cdot|} = e^{-\theta} V.$$

Wir werden nun an grundsätzlich $\gamma \geq 0$ voraussetzen. Des Weiteren definieren wir für $\theta \in \mathbb{R}$ die unitäre Dilatation

$$\mathcal{U}(\theta) : L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$$

durch

$$(\mathcal{U}(\theta)f)(x) := e^{\frac{3}{2}\theta} f(e^\theta x).$$

Sie erfüllt die Beziehung

$$\mathcal{U}(\theta) D_{c,\gamma} \mathcal{U}(\theta)^* = D_{c,\gamma}(\theta).$$

Die Operatoren $D_{c,\gamma}(\theta)$ sind Fortsetzungen des Operators $\mathcal{U}(\theta) D_{c,\gamma} \mathcal{U}(\theta)^*$ für komplexe θ . Man beachte, dass die Abbildung $\mathcal{U}(\theta)$ sich nicht als beschränkter Operator fortsetzen lässt, jedoch angewandt auf Elemente der dichten Teilmenge der analytischen Vektoren für den Erzeuger der Dilatationen. Der Konvergenzradius der Funktion $\theta \mapsto \mathcal{U}(\theta)\psi$ hängt dabei von dem jeweiligen analytischen Vektor ψ ab (siehe [123, Kapitel X.6]).

Wir werden jedoch in Kapitel III.3 zeigen, dass unter bestimmten Voraussetzungen die Einschränkung von $\mathcal{U}(\theta)$ auf gewisse spektrale Teilräume des Dirac-Operators ein beschränkter, beschränkt invertierbarer Operator ist.

Wir definieren außerdem für $p \in \mathbb{R}^3$ die Matrix

$$D_{c,0}(p; \theta) := ce^{-\theta} \boldsymbol{\alpha} \cdot p + c^2 \beta.$$

Für die komplexe Wurzelfunktion verwenden wir die Konvention

$$\sqrt{\cdot} : \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_0^- \rightarrow \mathbb{C} : \sqrt{z} = re^{i\phi/2},$$

wobei $z = re^{i\phi}$ mit $r \geq 0$ und $-\pi < \phi < \pi$ ist. Wir stellen fest, dass für $w \in \mathbb{C}$ mit $|\arg w| \leq \frac{\pi}{4}$ die Abschätzung

$$(III.3) \quad \operatorname{Re} \sqrt{w} \geq \sqrt{\operatorname{Re} w} \geq 0$$

gilt, was sofort aus der Formel $\cos(2\phi) = (\cos \phi)^2 - (\sin \phi)^2 \leq (\cos \phi)^2$ folgt.

Wir definieren für $\epsilon > 0$ den Streifen

$$S_\epsilon := \{z \in \mathbb{C} \mid |\operatorname{Im} z| < \epsilon\}.$$

III.2. Grundlagen

III.2.1. Foldy-Wouthuysen-Transformation. In diesem Abschnitt untersuchen wir zunächst die komplexe Fortsetzung der Foldy-Wouthuysen-Transformation und zeigen in Satz III.1 einige wichtige Eigenschaften. Es sei erwähnt, dass eine komplexe Fortsetzung der Foldy-Wouthuysen-Transformation implizit bereits von Evans, Perry und Siedentop [50] bei der Untersuchung des Spektrums des Brown-Ravenhall-Operators verwendet wird. Auch Balslev und Helffer [15] benützen holomorphe Fortsetzungen der Foldy-Wouthuysen-Transformation.

Zunächst definieren wir für $p \in \mathbb{R}^3$ und $\theta \in S_{\pi/2}$ die Matrix

$$(III.4) \quad \begin{aligned} \hat{U}_{\text{FW}}(c, p; \theta) &:= \frac{c^2 + E_c(p; \theta) + ce^{-\theta} \beta \boldsymbol{\alpha} \cdot p}{N_c(p; \theta)} \\ &= \frac{1}{N_c(p; \theta)} \begin{pmatrix} (c^2 + E_c(p; \theta)) \mathbf{1}_{2 \times 2} & ce^{-\theta} \boldsymbol{\sigma} \cdot p \\ -ce^{-\theta} \boldsymbol{\sigma} \cdot p & (c^2 + E_c(p; \theta)) \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

wobei

$$E_c(p; \theta) := \sqrt{e^{-2\theta} c^2 p^2 + c^4}$$

und

$$N_c(p; \theta) := \sqrt{2E_c(p; \theta)(c^2 + E_c(p; \theta))}$$

gilt. Mit $\hat{U}_{\text{FW}}(c; \theta)$ bezeichnen wir den maximalen Matrixmultiplikationsoperator auf $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$, der durch $U_{\text{FW}}(p, c; \theta)$ erzeugt wird. Analog definieren wir

$$(III.5) \quad \begin{aligned} \hat{V}_{\text{FW}}(p, c; \theta) &:= \frac{c^2 + E_c(p; \theta) - ce^{-\theta} \beta \boldsymbol{\alpha} \cdot p}{N_c(p; \theta)} \\ &= \frac{1}{N_c(p; \theta)} \begin{pmatrix} (c^2 + E_c(p; \theta)) \mathbf{1}_{2 \times 2} & -ce^{-\theta} \boldsymbol{\sigma} \cdot p \\ ce^{-\theta} \boldsymbol{\sigma} \cdot p & (c^2 + E_c(p; \theta)) \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

und $V_{\text{FW}}(c; \theta)$. Die Fouriertransformierten dieser Operatoren sind

$$U_{\text{FW}}(c; \theta) := \mathcal{F}^{-1} \hat{U}_{\text{FW}}(c; \theta) \mathcal{F}, \quad V_{\text{FW}}(c; \theta) := \mathcal{F}^{-1} \hat{V}_{\text{FW}}(c; \theta) \mathcal{F}.$$

Man beachte, dass diese Operatoren für $\theta = 0$ mit der üblichen Foldy-Wouthuysen-Transformation (siehe [141] sowie Kapitel II.2.1) übereinstimmen, jedoch für $\theta \notin \mathbb{R}$ nicht unitär sind. Dennoch definieren die Operatoren eine Ähnlichkeitstransformation, die den freien dilatierten Dirac-Operator diagonalisiert. Dies ist für die folgenden Abschnitte unter anderem deswegen von Bedeutung, da der diagonalisierte dilatierte Dirac-Operator $\sqrt{-c^2 \exp^{-2\theta} \Delta + c^4} \beta$ im Gegensatz zum Operator $D_{c,0}(\theta)$ normal ist.

SATZ III.1. *Es sei $\theta \in S_{\pi/4}$. Dann gilt:*

- a) *Der Operator $U_{\text{FW}}(c; \theta)$ ist ein beschränkter Operator auf $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ mit beschränkter Inverser $V_{\text{FW}}(c; \theta)$. Es gibt eine Konstante C_{FW} (unabhängig von c und θ), so dass*

$$(III.6) \quad \|U_{\text{FW}}(c; \theta)\| \leq \sqrt{1 + C_{\text{FW}} |\sin \text{Im } \theta|}$$

und

$$(III.7) \quad \|V_{\text{FW}}(c; \theta)\| \leq \sqrt{1 + C_{\text{FW}} |\sin \text{Im } \theta|}$$

gilt.

- b) *Die Foldy-Wouthuysen-Transformation diagonalisiert den Dirac-Operator:*

$$(III.8) \quad U_{\text{FW}}(c; \theta) D_{c,0}(\theta) V_{\text{FW}}(c; \theta) = \sqrt{-c^2 e^{-2\theta} \Delta + c^4} \beta.$$

BEWEIS.

- a) Eine einfache Rechnung zeigt

$$(III.9) \quad \hat{U}_{\text{FW}}(p, c; \theta) \hat{V}_{\text{FW}}(p, c; \theta) = \hat{V}_{\text{FW}}(p, c; \theta) \hat{U}_{\text{FW}}(p, c; \theta) = \mathbf{1}.$$

Es gilt

$$\|U_{\text{FW}}(c; \theta)\| \leq \sup_{p \in \mathbb{R}^3} \|\hat{U}_{\text{FW},c}(p; \theta)\|.$$

Folglich genügt es, den Fall $c = 1$ und $\text{Re } \theta = 0$ zu betrachten. Wir beachten die Beziehung $\|\hat{U}_{\text{FW},c}(p; \theta)\|^2 = \|\hat{U}_{\text{FW},c}(p; \theta)^* \hat{U}_{\text{FW},c}(p; \theta)\|$ und finden mit $\vartheta \in (-\pi/4, \pi/4)$

$$(III.10) \quad \begin{aligned} \hat{U}_{\text{FW},c}(p; i\vartheta)^* \hat{U}_{\text{FW},c}(p; i\vartheta) &= \\ &= \frac{1 + E_1(p; -i\vartheta) - \beta \alpha p e^{i\vartheta}}{\sqrt{2E_1(p; -i\vartheta)(1 + E_1(p; -i\vartheta))}} \frac{1 + E_1(p; i\vartheta) + \beta \alpha p e^{-i\vartheta}}{\sqrt{2E_1(p; i\vartheta)(1 + E_1(p; i\vartheta))}} \\ &= \frac{(1 + E_1(p; i\vartheta))(1 + E_1(p; -i\vartheta)) + p^2}{\tilde{N}} \\ &\quad + \frac{\beta \alpha \cdot p(e^{-i\vartheta}(1 + E_1(p; -i\vartheta)) - e^{i\vartheta}(1 + E_1(p; i\vartheta)))}{\tilde{N}} \end{aligned}$$

mit

$$\tilde{N} := \sqrt{4E_1(p; i\vartheta)E_1(p; -i\vartheta)(1 + E_1(p; i\vartheta))(1 + E_1(p; -i\vartheta))}.$$

Man beachte, dass der Ausdruck unter der Wurzel reell ist. Wir stellen fest, dass

$$|1 + E_1(p; \pm i\vartheta)| \geq |E_1(p; \pm i\vartheta)| = \sqrt[4]{1 + 2 \cos(2\vartheta)p^2 + p^4} \geq \sqrt[4]{1 + p^4}$$

gilt, wobei wir $|\vartheta| < \pi/4$ benützt haben. Folglich kann der Nenner in Gleichung

(III.10) gemäß

$$(III.11) \quad |\tilde{N}| \geq 2\sqrt{1 + |p|^4}$$

abgeschätzt werden. Als Nächstes beobachten wir, dass

$$(III.12) \quad |e^{i\vartheta} E_1(p; i\vartheta) - e^{-i\vartheta} E_1(p; -i\vartheta)| = \\ = \frac{2|\sin(2\vartheta)|}{|e^{i\vartheta} E_1(p; i\vartheta) + e^{-i\vartheta} E_1(p; -i\vartheta)|} \leq \frac{|\sin(2\vartheta)|}{\sqrt{p^2 + \cos(2\vartheta)}}$$

gilt, wobei wir die Abschätzung $|w| \geq |\operatorname{Re} w|$ und (III.3) benützt haben. Aus (III.12) folgt

$$(III.13) \quad \|\beta\alpha \cdot p(e^{i\vartheta}(1 + E_1(p; i\vartheta)) - e^{-i\vartheta}(1 + E_1(p; -i\vartheta)))\| \leq 2|p| |\sin(\vartheta)| + |\sin 2\vartheta|.$$

Des Weiteren gilt

$$(III.14) \quad 1 - \frac{(1 + E_1(p; -i\vartheta))(1 + E_1(p; i\vartheta)) + p^2}{\tilde{N}} \\ = \frac{\tilde{N} - ((1 + E_1(p; -i\vartheta))(1 + E_1(p; i\vartheta)) + p^2)}{\tilde{N}} \\ = \frac{\tilde{N}^2 + ((1 + E_1(p; -i\vartheta))(1 + E_1(p; i\vartheta)) + p^2)^2}{\tilde{N} \left(\tilde{N} + ((1 + E_1(p; -i\vartheta))(1 + E_1(p; i\vartheta)) + p^2) \right)}$$

Wegen $(1 + E_1(p; -i\vartheta))(1 + E_1(p; i\vartheta)) + p^2 > 0$ können wir mit Hilfe von (III.11) den Nenner abschätzen durch

$$(III.15) \quad |\tilde{N}(\tilde{N} + ((1 + E_1(p; -i\vartheta))(1 + E_1(p; i\vartheta)) + p^2))| \geq 4(1 + |p|^4).$$

Um den Zähler abzuschätzen, finden wir nach einigen Rechnungen

$$(III.16) \quad 4E_1(p; -i\vartheta)E_1(p; i\vartheta)(1 + E_1(p; -i\vartheta))(1 + E_1(p; i\vartheta)) \\ - ((1 + E_1(p; -i\vartheta))(1 + E_1(p; i\vartheta)) + p^2)^2 \\ = 2p^4 + 2(e^{2i\vartheta} + e^{-2i\vartheta})p^2 + 2p^2(e^{-2i\vartheta} E_1(p; -i\vartheta) + e^{2i\vartheta} E_1(p; i\vartheta)) \\ - 2p^2 - 2p^2(E_1(p; -i\vartheta) + E_1(p; i\vartheta)) - 2p^2 E_1(p; -i\vartheta)E_1(p; i\vartheta).$$

Wir kombinieren geeignete Terme in (III.16). Es gilt

$$(III.17) \quad (e^{2i\vartheta} + e^{-2i\vartheta})p^2 - 2p^2 = 2(\cos(2\vartheta) - 1)p^2,$$

$$(III.18) \quad |2p^2(e^{-2i\vartheta} E_1(p; -i\vartheta) + e^{2i\vartheta} E_1(p; i\vartheta)) - 2p^2(E_1(p; -i\vartheta) + E_1(p; i\vartheta))| \\ \leq 4p^2 |\sqrt{p^2 + e^{2i\vartheta}} - \sqrt{p^2 + e^{-2i\vartheta}}| \\ \leq 4p^2 \frac{2\sin(2\vartheta)}{|\sqrt{p^2 + e^{2i\vartheta}} + \sqrt{p^2 + e^{-2i\vartheta}}|} \leq 4|p| \sin(2\vartheta)$$

und

$$\begin{aligned}
(III.19) \quad & |2p^4 + 2 \cos(2\vartheta)p^2 - 2p^2 E_1(p; -i\vartheta)E_1(p; i\vartheta)| \\
& = |2p^2 \frac{(p^2 + \cos(2\vartheta))^2 - (E_1(p; -i\vartheta)E_1(p; i\vartheta))^2}{p^2 + \cos(2\vartheta) + E_1(p; -i\vartheta)E_1(p; i\vartheta)}| \\
& \leq 2p^2 \frac{|\sin(2\vartheta)|^2}{p^2 + \cos(2\vartheta)} \leq 2|\sin(2\vartheta)|^2.
\end{aligned}$$

Indem wir die Abschätzungen (III.11) und (III.13) bis (III.19) zusammenfassen, erhalten wir schließlich

$$\begin{aligned}
(III.20) \quad & \|\hat{U}_{\text{FW}}(i\vartheta, p)^* \hat{U}_{\text{FW}}(i\vartheta, p) - 1\| \leq \frac{(2|p| |\sin(\vartheta)| + \sin 2\vartheta)}{2\sqrt{1 + |p|^4}} \\
& + \frac{2|\cos(2\vartheta) - 1|p^2 + 4|p| |\sin(2\vartheta)| + 2|\sin(2\vartheta)|^2}{4(1 + |p|^4)} \\
& \leq \left[\frac{|p| + 1}{\sqrt{1 + |p|^4}} + \frac{p^2 + 2|p| + 1}{1 + |p|^4} \right] |\sin(\vartheta)|,
\end{aligned}$$

wobei wir $|\sin(2\vartheta)| \leq 2|\sin \vartheta|$ für $|\vartheta| \leq \pi/4$ verwendet haben. Wenn wir

$$C_{\text{FW}} := \sup_{t \in \mathbb{R}_0^+} \left[\frac{t + 1}{\sqrt{1 + t^4}} + \frac{t^2 + 2t + 1}{1 + t^4} \right]$$

setzen, zeigt (III.20) die Behauptung über $U_{\text{FW}}(c; \theta)$. Die Behauptung über den inversen Operator $V_{\text{FW}}(c; \theta)$ zeigt man analog.

b) Es gilt

$$\hat{U}_{\text{FW}}(c, p; \theta) D_{c,0}(p; \theta) \hat{V}_{\text{FW}}(c, p; \theta) = D_{c,0}(p; \theta) \hat{V}_{\text{FW}}(c, p; \theta)^2$$

sowie

$$\hat{V}_{\text{FW}}(c, p; \theta) = \hat{U}_{\text{FW}}(c, p; \theta) - 2ce^{-\theta} \beta \boldsymbol{\alpha} \cdot p / N_c(p; \theta).$$

Daraus folgt

$$\hat{U}_{\text{FW}}(c, p; \theta) D_{c,0}(p; \theta) \hat{V}_{\text{FW}}(c, p; \theta) = D_{c,0}(p; \theta) - A,$$

wobei

$$A := \frac{1}{N_c(p; \theta)^2} D_{c,0}(p; \theta) [2ce^{-\theta} \beta \boldsymbol{\alpha} \cdot p] [c^2 + E_c(p; \theta) - ce^{-\theta} \beta \boldsymbol{\alpha} \cdot p].$$

Ausmultiplizieren liefert

$$A = -\frac{2c^2 e^{-2\theta} p^2 E_c(p; \theta) \beta}{N_c(p; \theta)^2} + ce^{-\theta} \boldsymbol{\alpha} \cdot p,$$

woraus

$$(III.21) \quad \hat{U}_{\text{FW}}(c, p; \theta) D_{c,0}(p; \theta) \hat{V}_{\text{FW}}(c, p; \theta) = E_c(p; \theta) \beta$$

folgt, was (III.8) zeigt. \square

BEMERKUNG III.2. Satz III.1 zeigt, dass $D_{c,0}(\theta)$ ähnlich zu einem normalen Operator ist. Er ist also ein skalarer spektraler Operator im Sinne von Dunford [44] (siehe auch [43] und [45]). Es stellt sich die Frage, unter welchen Voraussetzungen dilatierte Schrödinger- oder Dirac-Operatoren spektrale Operatoren sind. Kato [96] hat gezeigt, dass Schrödinger-Operatoren mit in einem geeigneten Sinne hinreichend kleinen Potentialen in der Tat spektrale Operatoren sind. Dieses Ergebnis wurde von

Mochizuki [116] partiell verallgemeinert. Andererseits ist der dilatierter Operator des harmonischen Oszillators im Allgemeinen nicht spektral (siehe [37]). Allgemeine Bedingungen an das Potential, unter denen ein dilatierter Operator spektral ist, scheinen nicht bekannt zu sein.

Wir werden in Satz III.8 die Existenz von positiven und negativen Spektralprojektionen für den Coulomb-Dirac-Operator zeigen. Dies könnte ein erster Schritt sein, um die Spektralität einer hinreichen großen Klasse von dilatierten Operatoren nachzuweisen. Hierzu wären jedoch wesentlich feinere Abschätzungen an die Resolvente erforderlich als die im Beweis von Satz III.8 verwendeten.

III.2.2. Dilatationsanalytizität und Spektrum. Wir zeigen, dass die in Gleichungen (III.1) und (III.2) definierten Operatoren holomorphe Familien von abgeschlossenen Operatoren sind. Da wir später nur am nicht-relativistischen Grenzfall der Operatoren interessiert sind, beschränken wir uns auf den Fall, der sich durch die Anwendung der Hardy-Ungleichung behandeln lässt.

Für $\theta \in S_{\pi/2}$ definieren wir die Menge $M_{\gamma/c} := \{\theta \in \mathbb{C} \mid \frac{2\gamma}{c} < \cos(\operatorname{Im} \theta)\}$.

SATZ III.3. *Es sei $\theta \in S_{\pi/2}$. Dann ist der Operator $D_{c,\gamma}(\theta)$ für $\frac{2\gamma}{c} < \cos(\operatorname{Im} \theta)$ auf $\operatorname{Dom}(D_{c,\gamma}(\theta)) = H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ abgeschlossen und es gilt $D_{c,\gamma}(\theta)^* = D_{c,\gamma}(\bar{\theta})$. $D_{c,\gamma}(\theta)$ ist für $\theta \in M_{\gamma/c}$ eine holomorphe Familie vom Typ (A) im Sinne von Kato. $D_{c,0}(\theta)$ ist eine ganze Familie vom Typ (A).*

BEWEIS. Es gilt für $f \in H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$

$$\begin{aligned} \|D_{c,0}(\theta)f\|^2 &= |e^{-\theta}|^2 c^2 ((-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla)f, (-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla)f) + c^4 (f, f) + \\ &\quad + 2c^3 i \operatorname{Im} e^{-\theta} (\beta f, (-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla)f) \geq |\operatorname{Re} e^{-\theta}|^2 c^2 \|\nabla f\|^2. \end{aligned}$$

Aus der Hardy-Ungleichung erhalten wir

$$\|e^{-\theta} \gamma V f\|^2 \leq 4\gamma^2 |e^{-\theta}|^2 \|\nabla f\|^2$$

und folglich

$$(III.22) \quad \|e^{-\theta} \gamma V f\| \leq \frac{2\gamma}{c \cos(\operatorname{Im} \theta)} \|D_{c,0}(\theta)f\|,$$

was die Abgeschlossenheit und die stetige Invertierbarkeit von $D_{c,\gamma}(\theta)$ zeigt. Somit ist der Definitionsbereich $\operatorname{Dom}(D_{c,\gamma}(\theta)) = H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ unabhängig von $\theta \in M_{\gamma/c}$. Es ist klar, dass für $f \in \operatorname{Dom}(D_{c,\gamma}(\theta))$ die Abbildung $M_{\gamma/c} \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$, $\theta \mapsto D_{c,\gamma}(\bar{\theta})f$ holomorph ist, woraus folgt, dass $D_{c,\gamma}(\theta)$ eine holomorphe Familie vom Typ (A) ist [97, Kapitel VII-2.1].

Ferner gilt offensichtlich $D_{c,\gamma}(\bar{\theta})^* \supset D_{c,\gamma}(\theta)$. Es reicht also, die Inklusion

$$\operatorname{Dom}(D_{c,\gamma}(\bar{\theta})^*) \subset \operatorname{Dom}(D_{c,\gamma}(\theta)) = \operatorname{Ran}(D_{c,\gamma}(\theta)^{-1})$$

zu zeigen. Wir adaptieren eine im Fall selbstadjungierter Operatoren wohlbekannte Strategie (vgl. [145, Satz 5.14]). Es gilt $\operatorname{Dom}(D_{c,\gamma}(\theta)^{-1}) = \operatorname{Ran}(D_{c,\gamma}(\bar{\theta})) = L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$. Für $f \in \operatorname{Dom}(D_{c,\gamma}(\bar{\theta})^*)$ gilt also

$$f_0 := D_{c,\gamma}(\theta)^{-1} D_{c,\gamma}(\bar{\theta})^* f \in \operatorname{Dom}(D_{c,\gamma}(\theta)) \subset \operatorname{Dom}(D_{c,\gamma}(\bar{\theta})^*).$$

Es folgt $D_{c,\gamma}(\theta)f_0 = D_{c,\gamma}(\bar{\theta})^*f_0$, und aus der Definition von f_0 folgt $D_{c,\gamma}(\bar{\theta})^*f = D_{c,\gamma}(\theta)f_0$. Daher gilt

$$D_{c,\gamma}(\bar{\theta})^*(f - f_0) = 0,$$

also

$$f - f_0 \in N(D_{c,\gamma}(\bar{\theta})^*) = \text{Ran}(D_{c,\gamma}(\bar{\theta}))^\perp = \{0\},$$

und somit $f = f_0 \in \text{Dom}(D_{c,\gamma}(\theta))$. \square

Das folgende Lemma beinhaltet eine einfache, aber nützliche Aussage:

LEMMA III.4. *Es seien $a, b > 0$. Dann gilt*

$$\sup_{p \in \mathbb{R}^3} \frac{\sqrt{a^2 c^2 p^2 + c^4}}{\sqrt{b^2 c^2 p^2 + c^4}} \leq \max \left\{ 1, \frac{a}{b} \right\}.$$

BEWEIS. Der Fall $a \leq b$ ist offensichtlich. Der Fall $a > b$ folgt wegen

$$\frac{\sqrt{a^2 c^2 p^2 + c^4}}{\sqrt{b^2 c^2 p^2 + c^4}} = \frac{a}{b} \frac{\sqrt{c^2 p^2 + c^4/a^2}}{\sqrt{c^2 p^2 + c^4/b^2}}.$$

\square

Nun benötigen wir das Spektrum des Operators $D_{c,\gamma}(\theta)$. Satz III.1 zeigt (siehe Abbildung III.1)

$$\sigma(D_{c,0}(\theta)) = \Sigma_c^-(\theta) \cup \Sigma_c^+(\theta),$$

wobei

$$\Sigma_c^\pm(\theta) = \pm E_c(\mathbb{R}; \theta).$$

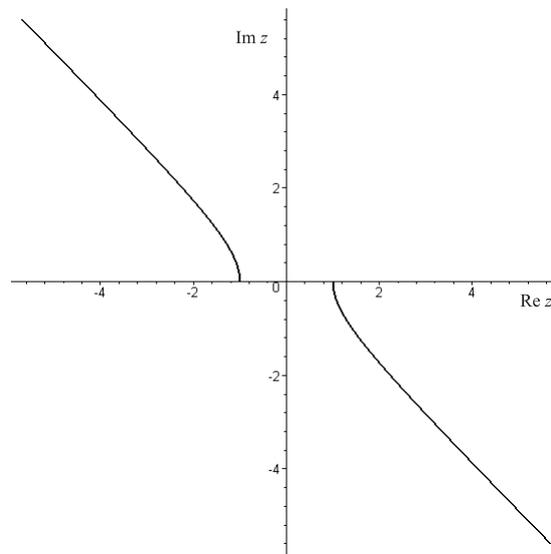


ABBILDUNG III.1. Das Spektrum des Operators $D_{c,0}(\theta)$ für $c = 1$ und $\theta = i\pi/4$.

Im Falle von selbstadjungierten Operatoren könnte man nun aus der Kompaktheit der Differenzen von freier und wechselwirkender Resolvente folgern, dass $D_{c,0}(\theta)$ und $D_{c,\gamma}(\theta)$ mit $\gamma \neq 0$ dasselbe wesentliche Spektrum besitzen. Diese Aussage lässt sich jedoch nicht ohne Weiteres auf nicht-selbstadjungierte Operatoren übertragen. Insbesondere gibt es verschiedene, im Falle von nicht-selbstadjungierten Operatoren im Allgemeinen nicht äquivalente Definitionen des wesentlichen Spektrums, die auch unterschiedliche Invarianz-Eigenschaften besitzen [129, 73, 74].

Im Falle von relativ-kompakten Potentialen bei dilatierten Schrödinger- und Dirac-Operatoren kann man diese Schwierigkeit durch die Anwendung des analytischen Fredholm-Theorems umgehen [144]. Da das Coulomb-Potential jedoch nicht relativ $D_{c,0}(\theta)$ -kompakt ist, adaptieren wir eine Idee von Nenciu [119] an den nicht-selbstadjungierten Fall. Dazu benötigen wir zunächst das folgende Lemma:

LEMMA III.5. *Es sei $\theta \in S_{\pi/4}$ und $z \notin \sigma(D_{c,0}(\theta))$. Dann ist der Operator*

$$V^{1/2}(D_{c,0}(\theta) - z)^{-1}$$

kompakt.

BEWEIS. Es reicht, den Fall $z = 0$ zu betrachten. Wir schreiben

$$\begin{aligned} V^{1/2}D_{c,0}(\theta)^{-1} &= V^{1/2} \left(\sqrt{-c^2 e^{-2\theta} \Delta + c^4 \beta} \right)^{-1} \\ &\quad \times \left(\sqrt{-c^2 e^{-2\theta} \Delta + c^4 \beta} \right) D_{c,0}(\theta)^{-1}. \end{aligned}$$

Wegen $V^{1/2} \in L_w^6(\mathbb{R}^3)$ und $1/\left(\pm\sqrt{c^2 e^{-2\theta}(\cdot)^2 + c^4} - z\right) \in L^6(\mathbb{R}^3)$ ist der Operator $V^{1/2}(\sqrt{-c^2 e^{-2\theta} \Delta + c^4 \beta} - z)^{-1}$ kompakt (siehe [139, Theorem 4.2] oder [125, Appendix 2 zu Kapitel XI.3, Theorem XI.21]). Ferner gilt

$$\begin{aligned} \left\| \left(\sqrt{-c^2 e^{-2\theta} \Delta + c^4 \beta} \right) D_{c,0}(\theta)^{-1} \right\| &\leq \\ &\leq \left\| \sqrt{-c^2 e^{-2\theta} \Delta + c^4} D_{c,0}(\theta)^{-1} \right\| \leq 1 + C_{\text{FW}} |\text{Im } \theta| \end{aligned}$$

wegen Satz III.1. Dies zeigt die Behauptung. \square

Wir definieren für $z \notin \sigma(D_{c,0}(\theta))$ den Operator

$$M_{c;\theta}(z) := V^{1/2}(D_{c,0}(\theta) - z)^{-1}V^{1/2}.$$

Außerdem seien $B_{c;\theta;+}$ und $B_{c;\theta;-}$ diejenigen abgeschlossenen Teilmengen von $\{z \in \mathbb{C} | \text{Re } z > 0\}$ bzw. $\{z \in \mathbb{C} | \text{Re } z < 0\}$, die von den Kurven $[c^2, \infty)$ und $E_c(\mathbb{R}; \theta)$ bzw. $(-\infty, -c^2]$ und $-E_c(\mathbb{R}; \theta)$ eingeschlossen werden (siehe Abbildung III.2). Wir setzen $B_{c;\theta} = B_{c;\theta;+} \cup B_{c;\theta;-}$.

Des Weiteren definieren wir für $\theta \in S_{\pi/4}$ die Konstanten

$$(III.23) \quad C(\text{Im } \theta) := \frac{1 + C_{\text{FW}} |\text{Im } \theta|}{\sqrt{\cos(2\text{Im } \theta)}}$$

$$(III.24) \quad C_1(\text{Im } \theta) := \frac{1 + C_{\text{FW}} |\text{Im } \theta|}{\sqrt{\cos(2\text{Im } \theta)}} + \frac{1 + C_{\text{FW}} |\text{Im } \theta|}{\cos(\text{Im } \theta)}.$$

Man beachte die Ungleichung $1/\cos(\text{Im } \theta) \leq C(\text{Im } \theta)$.

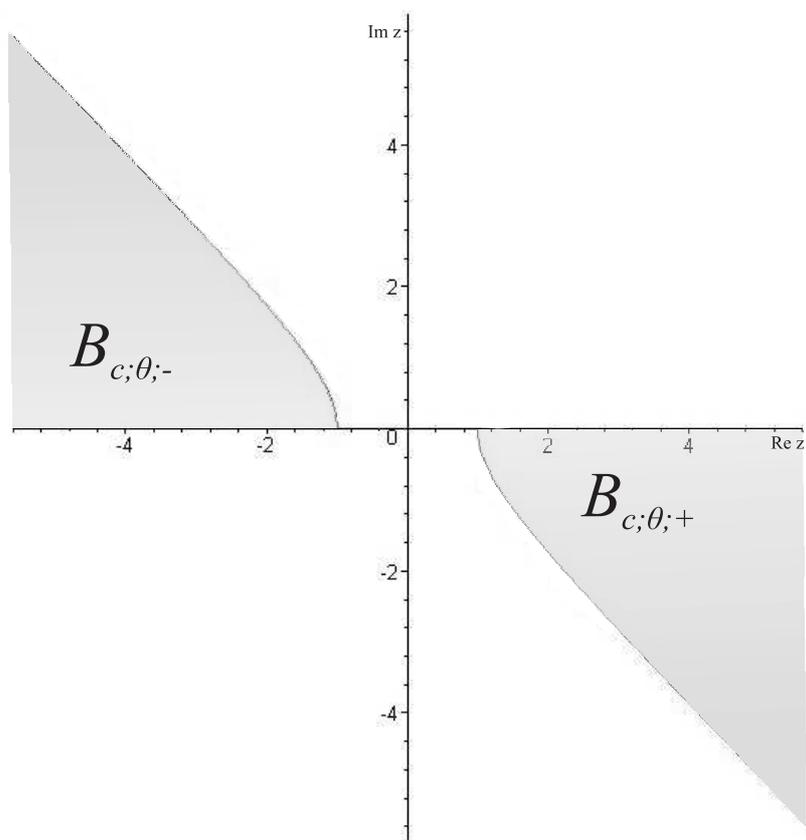


ABBILDUNG III.2. Die Mengen $B_{c;\theta;\pm}$ für $c = 1$ und $\theta = i\pi/4$.

Der folgende Satz liefert eine präzise Beschreibung des Spektrums von $D_{c,\gamma}(\theta)$. Insbesondere stimmen außerhalb der Menge $B_{c,\theta}$ die Spektren von $D_{c,\gamma}(\theta)$ und $D_{c,\gamma}(0)$ überein, so dass eventuelle Einteilchen-Resonanzen nur innerhalb der Menge $B_{c,\theta}$ liegen können.

Mit $\mathcal{B}(L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4))$ bezeichnen wir die Menge beschränkter und überall definierter Operatoren auf $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$. Ferner setzen wir $B_a(x_0) := \{x \in \mathbb{R}^3 \mid |x - x_0| < a\}$ für $a > 0$ und $x_0 \in \mathbb{R}^3$

SATZ III.6. *Es sei $\theta \in S_{\pi/4}$ und $\frac{2\gamma}{c}C(\text{Im } \theta) < 1$. Dann gilt*

$$\sigma(D_{c,\gamma}(\theta)) = \sigma(D_{c,0}(\theta)) \cup A_{c,\gamma;\theta}.$$

$A_{c,\gamma;\theta}$ ist eine diskrete Teilmenge von $\mathbb{C} \setminus \sigma(D_{c,0}(\theta))$, und es gilt $A_{c,\gamma;\theta} \cap (\mathbb{C} \setminus B_{c;\theta}) = \sigma_{\text{disc}}(D_{c,\gamma}(0))$. Die Menge $A_{c,\gamma;\theta}$ hat höchstens die Punkte $\pm c^2$ als Häufungspunkte. Für $z \notin \sigma(D_{c,\gamma}(\theta))$ gilt die Resolventenbeziehung

$$(III.25) \quad (D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1} = (D_{c,0}(\theta) - z)^{-1} + e^{-\theta} \gamma (D_{c,0}(\theta) - z)^{-1} V^{1/2} (1 - e^{-\theta} \gamma M_{c;\theta}(z))^{-1} V^{1/2} (D_{c,0}(\theta) - z)^{-1}.$$

BEWEIS. Wir bezeichnen die rechte Seite von Gleichung (III.25) mit $R_{c,\gamma;\theta}(z)$.

Schritt 1: Beweis von (III.25) für $z = i\eta$, $\eta \in \mathbb{R}$. Wir erhalten unter Verwendung der Kato-Ungleichung und Satz III.1

$$(III.26) \quad \begin{aligned} \|e^{-\theta}\gamma M_{c;\theta}(i\eta)\| &= \|e^{-\theta}\gamma V^{1/2}(D_{c,0}(\theta) - i\eta)^{-1}V^{1/2}\| \\ &\leq \frac{\gamma\pi e^{-\operatorname{Re}\theta}(1 + C_{\text{FW}}|\operatorname{Im}\theta|)}{2} \left\| \frac{|\nabla|}{\sqrt{-e^{-2\theta}c^2\Delta + c^4\beta - i\eta}} \right\| \\ &\leq \frac{\gamma\pi e^{-\operatorname{Re}\theta}(1 + C_{\text{FW}}|\operatorname{Im}\theta|)}{2} \left\| \frac{|\nabla|}{\sqrt{-\cos(2\operatorname{Im}\theta)c^2e^{-2\operatorname{Re}\theta}\Delta + c^4}} \right\| \leq \frac{\gamma}{c} \frac{\pi}{2} C(\operatorname{Im}\theta). \end{aligned}$$

Wir haben hierbei (III.3) und Lemma III.4 benützt. (III.26) zeigt die Gültigkeit von Gleichung (III.25) für $z = i\eta$, $\eta \in \mathbb{R}$.

Schritt 2: Beweis von (III.25), allgemeiner Fall. Es gilt

$$\begin{aligned} 1 - e^{-\theta}\gamma M_{c;\theta}(z) &= 1 - e^{-\theta}\gamma M_{c;\theta}(0) - e^{-\theta}\gamma(M_{c;\theta}(z) - M_{c;\theta}(0)) = \\ &= (1 - e^{-\theta}\gamma M_{c;\theta}(0)) (1 - N(z)), \end{aligned}$$

wobei

$$N(z) := z (1 - e^{-\theta}\gamma M_{c;\theta}(0))^{-1} [V^{1/2}D_{c,0}(\theta)^{-1}(D_{c,0}(\theta) - z)^{-1}V^{1/2}].$$

Wegen Schritt 1 und Lemma III.5 ist $N(z)$ für $z \in \mathbb{C} \setminus \sigma(D_{c,0}(\theta))$ kompakt und eine holomorphe Funktion von z . Die Anwendung des analytischen Fredholm-Satzes [122, Theorem VI.14] liefert, dass $(1 - N(z))^{-1}$ eine meromorphe Funktion auf $\mathbb{C} \setminus \sigma(D_{c,0}(\theta))$ mit Werten in $\mathcal{B}(L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4))$ ist, deren Residuen Operatoren endlichen Ranges sind. Wiederum wegen Schritt 1 gilt dies auch für $(1 - e^{-\theta}\gamma M_{c;\theta}(z))^{-1}$. Insbesondere gibt es eine Menge $A_{c,\gamma;\theta} \subset \mathbb{C} \setminus \sigma(D_{c,0}(\theta))$, die in $\mathbb{C} \setminus \sigma(D_{c,0}(\theta))$ keinen Häufungspunkt hat, so dass $z \mapsto R_{c,\gamma;\theta}(z)$ in $\mathbb{C} \setminus (\sigma(D_{c,0}(\theta)) \cup A_{c,\gamma;\theta})$ holomorph ist.

Schritt 3: Die Abbildung

$$z \mapsto R_{c,\gamma;\theta}(z) (D_{c,\gamma}(\theta) - z) f$$

mit $f \in \operatorname{Dom}(D_{c,\gamma}(\theta))$ ist auf $\mathbb{C} \setminus (\sigma(D_{c,0}(\theta)) \cup A_{c,\gamma;\theta})$ holomorph. Wegen Schritt 1 ist $R_{c,\gamma;\theta}(z)$ für $z = i\eta$, $\eta \in \mathbb{R}$ gleich der Resolvente von $D_{c,\gamma}(\theta)$. Es folgt

$$R_{c,\gamma;\theta}(z) (D_{c,\gamma}(\theta) - z) f = f$$

für alle $z \in \mathbb{C} \setminus (\sigma(D_{c,0}(\theta)) \cup A_{c,\gamma;\theta})$ und $f \in \operatorname{Dom}(D_{c,\gamma}(\theta))$.

Ferner ist leicht zu sehen, dass $\operatorname{Ran} R_{c,\gamma;\theta}(z) \subset H^{1/2}(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ gilt. Somit erhalten wir wie zuvor $(g, (D_{c,\gamma}(\theta) - z) R_{c,\gamma;\theta}(z) f) = (g, f)$ für alle $f \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$, $g \in H^{1/2}(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ und $z \in \mathbb{C} \setminus (\sigma(D_{c,0}(\theta)) \cup A_{c,\gamma;\theta})$. Es folgt $\operatorname{Ran} R_{c,\gamma;\theta}(z) \subset H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ und

$$(D_{c,\gamma}(\theta) - z) R_{c,\gamma;\theta}(z) f = f$$

für alle $f \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ und $z \in \mathbb{C} \setminus (\sigma(D_{c,0}(\theta)) \cup A_{c,\gamma;\theta})$.

Insgesamt erhalten wir, dass

$$R_{c,\gamma;\theta}(z) = (D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1}$$

für alle $z \in \mathbb{C} \setminus (\sigma(D_{c,0}(\theta)) \cup A_{c,\gamma;\theta})$ gilt. Insbesondere folgt $\sigma(D_{c,\gamma}(\theta)) \subset \sigma(D_{c,0}(\theta)) \cup A_{c,\gamma;\theta}$.

Sei nun $z_0 \in A_{c,\gamma;\theta}$. Dann gibt es wegen des analytischen Fredholm-Satzes ein $f \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ mit $(1 - N(z_0))f = 0$, also auch $(1 - e^{-\theta}\gamma M_{c,\theta}(z_0))f = 0$. Wir gehen nun vor wie im Beweis des Birman-Schwinger-Prinzips. Da $(D_{c,0}(\theta) - z)^{-1}V^{1/2}$ beschränkt ist, folgt $f \in \text{Ran}(V^{1/2})$, d.h. $f = V^{1/2}g$ für ein $g \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$. Es folgt $e^{-\theta}\gamma(D_{c,0}(\theta) - z_0)^{-1}Vg = g$, also $e^{-\theta}\gamma Vg = (D_{c,0}(\theta) - z_0)g$ in $H^{-1/2}(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$. Es folgt $g \in \text{Dom}(D_{c,\gamma}(\theta))$ und $(D_{c,\gamma}(\theta) - z_0)g = 0$, d.h. $z_0 \in \sigma(D_{c,\gamma}(\theta))$. Dies zeigt

$$\sigma(D_{c,\gamma}(\theta)) \cap (\mathbb{C} \setminus \sigma(D_{c,0}(\theta))) = A_{c,\gamma;\theta}.$$

Schritt 4: Es bleibt zu zeigen, dass $\sigma(D_{c,\gamma}(\theta)) \cap \sigma(D_{c,0}(\theta)) = \sigma(D_{c,0}(\theta))$ gilt. Dazu wählen wir $E \in \sigma(D_{c,0}(\theta))$ und ein $p \in \mathbb{R}^3$ mit $E = E_c(p; \theta)$ um eine geeignete Weyl-Folge zu konstruieren. Zunächst definieren wir $\psi_{p,c;\theta} \in C(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ durch

$$(III.27) \quad \psi_{p,c;\theta}(x) := \frac{1}{N_c(p; \theta)} \begin{pmatrix} c^2 + E_c(p; \theta)\chi \\ ce^{-\theta}\boldsymbol{\sigma} \cdot p\chi \end{pmatrix} e^{-ipx}$$

mit

$$\chi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Wegen Gleichung (III.5) und Gleichung (III.21) gilt

$$(III.28) \quad (-ic\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta c^2)\psi_{p,c;\theta}(x) = E_c(p; \theta)\psi_{p,c;\theta}(x).$$

Wir wählen nun eine Funktion $0 \neq \phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ mit $\text{supp } \phi \subset B_1(0)$ und setzen für $n \in \mathbb{N}$

$$\phi_n(x) := \phi\left(\frac{1}{n}x - ne_1\right)$$

mit $e_1 = (1, 0, 0)^T$ sowie

$$f_n := \phi_n \psi_{p,c;\theta}.$$

Offensichtlich gilt $f_n \in \text{Dom}(D_{c,\gamma}(\theta))$. Zunächst berechnen wir

$$(III.29) \quad \|f_n\| \geq \frac{1}{\sqrt{1 + C_{\text{FW}}}} \|\phi_n\| = \frac{n^{3/2}}{\sqrt{1 + C_{\text{FW}}}} \|\phi\|$$

wobei wir die Definition (III.27) von $\psi_{p,c;\theta}$, Gleichung (III.5), Gleichung (III.9) und Gleichung (III.6) sowie

$$\int dx \phi_n(x)^2 = \int dx \phi\left(\frac{1}{n}x - ne_1\right)^2 = n^3 \int dx \phi(x)^2$$

verwendet haben. Des Weiteren gilt für $n \geq 2$

$$(III.30) \quad \begin{aligned} \|Vf_n\|^2 &= \int dx \frac{1}{|x|^2} \phi_n(x)^2 \|\psi_{p,c;\theta}(0)\|^2 \\ &\leq (1 + C_{\text{FW}}|\text{Im } \theta|) \frac{4}{n^4} \int dx \phi_n(x)^2 \\ &= \frac{4(1 + C_{\text{FW}}|\text{Im } \theta|)}{n^4} n^3 \|\phi\|^2, \end{aligned}$$

denn $\text{supp } \phi_n \subset B_n(n^2 e_1)$ und $\|\psi_{p,c;\theta}(0)\| \leq \sqrt{1 + C_{\text{FW}}|\text{Im } \theta|}$ wegen Formel (III.7). Außerdem erhalten wir

$$(III.31) \quad \|(c\alpha \cdot \nabla \phi_n) \psi_{p,c;\theta}(\cdot)\| \leq \\ \leq c\sqrt{1 + C_{\text{FW}}|\text{Im } \theta|} \|\nabla \phi_n\| = \frac{c\sqrt{1 + C_{\text{FW}}|\text{Im } \theta|}}{n} n^{3/2} \|\nabla \phi\|$$

Aus den Formeln (III.28) bis (III.31) folgt

$$\frac{\|(D_{c,\gamma}(\theta) - E_c(p; \theta))f_n\|}{\|f_n\|} \leq \\ \leq \frac{\frac{2\sqrt{1+C_{\text{FW}}|\text{Im } \theta|}}{n^2} n^{3/2} \|\phi\| + \frac{c\sqrt{1+C_{\text{FW}}|\text{Im } \theta|}}{n} n^{3/2} \|\nabla \phi\|}{\frac{n^{3/2}}{\sqrt{1+C_{\text{FW}}}} \|\phi\|} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

Daher ist $D_{c,\gamma}(\theta) - E_c(p; \theta)$ nicht stetig invertierbar und somit $E_c(p; \theta) \in \sigma(D_{c,\gamma}(\theta))$.

Schritt 5: Der Beweis von $A_{c,\gamma;\theta} \cap (\mathbb{C} \setminus B_{c;\theta}) = \sigma_{\text{disc}}(D_{c,\gamma}(0))$ ist ein Standard-Argument, das die Dilatationsanalytizität der Operatoren $D_{c,\gamma}(\theta)$ ausnützt (siehe [124, Kapitel XII.6] oder [137]). Selbiges gilt für die Behauptung über die Häufungspunkte. \square

III.2.3. Spektralprojektionen. In diesem Abschnitt erweitern wir den Begriff der positiven und negativen Spektralprojektion auf dilatierte Dirac-Operatoren. Wir definieren für $p \in \mathbb{R}^3$ die Matrizes

$$\Lambda_{c,0}^{(\pm)}(p; \theta) := \frac{1}{2} \left(\mathbf{1} \pm \frac{cp \cdot \alpha + c^2 \beta}{E_c(p; \theta)} \right).$$

Eine einfache Rechnung zeigt, dass

$$\Lambda_{c,0}^{(\pm)}(p; \theta)^2 = \Lambda_{c,0}^{(\pm)}(p; \theta)$$

und

$$\Lambda_{c,0}^{(\pm)}(p; \theta) D_{c,0}(p; \theta) = \pm E_c(p; \theta) \Lambda_{c,0}^{(\pm)}(p; \theta)$$

gilt. Ferner verifiziert man die Beziehung

$$\Lambda_{c,0}^{(\pm)}(p; \theta) = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2\pi} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^R \frac{1}{D_{c,0}(p; \theta) - i\eta}.$$

Diese Beobachtungen legen nahe, positive und negative Spektralprojektionen für die dilatierten Operatoren durch

$$(III.32) \quad \Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta) := \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2\pi} \text{s-lim}_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^R \frac{1}{D_{c,\gamma}(\theta) - i\eta}$$

zu definieren. Ferner ist bekannt [97, Kapitel VI-5.2, Lemma 5.6], dass Formel (III.32) für reelle θ die Projektionen auf den positiven bzw. negativen Spektralraum liefert. Man beachte, dass entsprechende Projektionen für nicht notwendig selbstadjungierte Operatoren im Prinzip in der Literatur bekannt sind (siehe [63, Kapitel VX]). Dort wird jedoch eine etwas andere Definition für die positiven bzw. negativen Spektralprojektionen benutzt.

Wir zeigen zunächst in Satz III.8, dass diese Operatoren auch für $\theta \notin \mathbb{R}$ wohldefinierte und beschränkte Projektionen sind. Zuvor benötigen wir jedoch noch ein technisches Lemma:

LEMMA III.7. *Es sei $\theta \in S_{\pi/4}$. Dann gilt für alle $\eta \in \mathbb{R}$*

$$(III.33) \quad \left\| \frac{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)| - i\eta}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \right\| \leq C_1(\operatorname{Im} \theta),$$

wobei $C_1(\operatorname{Im} \theta)$ in (III.24) definiert wurde.

BEWEIS. Wir beweisen die Abschätzung

$$(III.34) \quad \begin{aligned} \left\| \frac{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)| - i\eta}{\sqrt{-e^{-2\theta}c^2\Delta + c^4\beta} - i\eta} \right\| &\leq \left\| \frac{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)|}{\sqrt{-e^{-2\theta}c^2\Delta + c^4\beta} - i\eta} \right\| \\ &+ \left\| \frac{\eta}{\sqrt{-e^{-2\theta}c^2\Delta + c^4\beta} - i\eta} \right\| \leq \frac{1}{\sqrt{\cos(2\operatorname{Im} \theta)}} + \frac{1}{\cos \operatorname{Im} \theta}. \end{aligned}$$

Den ersten Summanden schätzen wir mit Ungleichung (III.3) und Lemma III.4 ab. Für den zweiten Summanden beschränken wir uns auf $\operatorname{Im} \theta < 0$, da der Beweis im Fall $\operatorname{Im} \theta > 0$ analog verläuft und (III.33) für $\operatorname{Im} \theta = 0$ offensichtlich wahr ist. Ferner können wir uns auf den $\operatorname{Re} \theta = 0$ beschränken. Wir betrachten $|\sqrt{e^{-2\theta}c^2p^2 + c^4} - i\eta|$. Im Fall $\eta > 0$ gilt wegen $\operatorname{Im} \sqrt{e^{-2\theta}c^2p^2 + c^4} < 0$

$$|-\sqrt{e^{-2\theta}c^2p^2 + c^4} + i\eta| \geq |\eta|.$$

Im Fall $\eta < 0$ gilt wegen $\operatorname{Im} \sqrt{c^2p^2 + e^{+2\theta}c^4} > 0$

$$|\sqrt{c^2p^2 + e^{+2\theta}c^4} - ie^{+\theta}\eta| \geq -\cos(\operatorname{Im} \theta)\eta = \cos(\operatorname{Im} \theta)|\eta|,$$

was (III.34) beweist. Mit Satz III.1 folgt die Behauptung. \square

SATZ III.8. *Es sei $\theta \in S_{\pi/4}$ und $\frac{2\gamma}{c}C(\operatorname{Im} \theta) < 1$. Dann gelten die Aussagen $\Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta) \in \mathcal{B}(L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4))$, $\Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta) = \Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)^2$ und $\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) + \Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(\theta) = \mathbf{1}$. Die Operatoren $\Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)$ sind beschränkte holomorphe Familien in θ für $\theta \in M_{\gamma/c}$.*

BEWEIS. Der Beweis ist inspiriert durch ähnliche Abschätzungen in [138].

Schritt 1: Aus der Resolventenbeziehung (III.25) und der Abschätzung (III.26) folgt die Konvergenz der Reihe

$$(III.35) \quad \begin{aligned} \frac{1}{D_{c,\gamma}(\theta) - i\eta} - \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} &= \\ &= \gamma e^{-\theta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} V^{1/2} \left[\gamma e^{-\theta} V^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} V^{1/2} \right]^{n-1} V^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \end{aligned}$$

in Norm.

Schritt 2: Wir zeigen, dass durch den Ausdruck

$$(III.36) \quad \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^R \left(f, \left[\frac{1}{D_{c,\gamma}(\theta) - i\eta} - \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \right] g \right), \quad f, g \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$$

ein beschränkter Operator auf $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ definiert wird. Dazu schätzen wir

$$\begin{aligned} & \left| \left(f, \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} V^{1/2} \left[\gamma e^{-\theta} V^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} V^{1/2} \right]^{n-1} V^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} g \right) \right| \\ & \leq \frac{\pi}{2} \left\| \frac{|\nabla|^{1/2}}{D_{c,0}(\bar{\theta}) + i\eta} f \right\| \left\| \frac{|\nabla|^{1/2}}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} g \right\| \left(\frac{\gamma}{c} \frac{\pi}{2} C(\operatorname{Im} \theta) \right)^{n-1} \\ & \leq \frac{\pi}{2ce^{-\operatorname{Re} \theta}} \left\| \frac{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)|^{1/2}}{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)| + i\eta} f \right\| \left\| \frac{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)|^{1/2}}{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)| - i\eta} g \right\| C_1(\operatorname{Im} \theta)^2 \left(\frac{\gamma}{c} \frac{\pi}{2} C(\operatorname{Im} \theta) \right)^{n-1} \end{aligned}$$

ab, wobei wir in der ersten Abschätzung (III.26) und in der zweiten Abschätzung zweimal Lemma III.7 benützt haben. $C(\operatorname{Im} \theta)$ und $C_1(\operatorname{Im} \theta)$ wurden in (III.23) und (III.24) definiert. Wie in [138, Beweis von Lemma 1] erhalten wir

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left\| \frac{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)|^{1/2}}{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)| + i\eta} f \right\| \left\| \frac{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)|^{1/2}}{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)| - i\eta} g \right\| \leq \pi \|f\| \|g\|$$

und somit

$$\begin{aligned} \text{(III.37)} \quad & \int_{-\infty}^{\infty} \left| \left(f, \left[\frac{1}{D_{c,\gamma}(\theta) - i\eta} - \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \right] g \right) \right| \leq \\ & \leq \pi \frac{\gamma}{c} \frac{\pi}{2} \|f\| \|g\| C_1(\operatorname{Im} \theta)^2 \frac{1}{1 - \left(\frac{\gamma}{c} \frac{\pi}{2} C(\operatorname{Im} \theta) \right)} \end{aligned}$$

Schritt 3: Die Ausdrücke

$$\left(f, \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} V^{1/2} \left[\gamma e^{-\theta} V^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} V^{1/2} \right]^{n-1} V^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} g \right)$$

sind holomorphe Funktionen von $\theta \in S_{\pi/4}$. Die obigen Abschätzungen zeigen die Existenz einer von θ unabhängigen, summier- und integrierbaren Majorante für $\theta \in M_{\gamma/c}$. Der in Gleichung (III.36) definierte Operator hängt somit holomorph von θ ab [97, Kapitel VII-1.1]. Die für $\theta \in \mathbb{R}$ offensichtlich wahre Gleichung $\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) = \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta)^2$ behält somit auch für $\theta \in M_{\gamma/c}$ Gültigkeit, in anderen Worten ist $\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta)$ ein Projektionsoperator.

Schritt 4: Wir zeigen, dass der Grenzwert tatsächlich als starker Grenzwert existiert. Dazu schätzen wir für $g \in H^{1/2}(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ wie folgt ab:

$$\begin{aligned} & \left| \left(f, \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \left[\gamma e^{-\theta} V \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \right]^{n-1} V \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} g \right) \right| \\ & \leq \frac{2}{ce^{-\operatorname{Re} \theta}} \left\| \frac{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)|^{1/2}}{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)| + i\eta} \right\| \|f\| \left\| \frac{1}{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)| - i\eta} \right\| \left\| |D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)|^{1/2} g \right\| \\ & \quad \times C_1(\operatorname{Im} \theta)^2 \left(\frac{2\gamma}{c} C(\operatorname{Im} \theta) \right)^{n-1} \end{aligned}$$

Hierbei haben wir den Ausdruck in der eckigen Klammer ähnlich wie in (III.26) abgeschätzt, jedoch unter Verwendung der Hardy-Ungleichung. Außerdem haben wir

zweimal die Abschätzung (III.33) verwendet. Wegen $\sigma(D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)) = (-\infty, c^2] \cup [c^2, \infty)$ gilt (vgl. den Beweis von Lemma IV.2 für eine ähnliche Abschätzung)

$$\left\| \frac{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)|^{1/2}}{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)| + i\eta} \right\| = \sup_{|\lambda| \geq c^2} \frac{\sqrt{|\lambda|}}{\sqrt{\lambda^2 + \eta^2}} \leq \min\left\{\frac{1}{c}, \frac{1}{\sqrt{|\eta|}}\right\}.$$

Diese Abschätzung zeigt, dass die Konvergenz in Formel (III.36) gleichmäßig in $f \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ ist, woraus die starke Konvergenz folgt [97, Theorem III.1.32 und Lemma III.3.5], weil $H^{1/2}(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ dicht in $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ liegt. \square

Offensichtlich gilt $\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) + \Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(\theta) = \mathbf{1}$. Wir setzen

$$\mathcal{H}_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta) := \Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$$

und finden $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) = \mathcal{H}_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) \dot{+} \mathcal{H}_{c,\gamma}^{(-)}(\theta)$, wobei $\dot{+}$ die direkte Summe bezeichnet. Wir bezeichnen $\Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)$ als positive bzw. negative Spektralprojektion und $\mathcal{H}_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)$ als positiven bzw. negativen Spektralraum. Diese Bezeichnung ist wegen Satz III.10 gerechtfertigt.

Das folgende Korollar verallgemeinert [138, Lemma 1] auf dilatierte Spektralprojektionen.

KOROLLAR III.9. *Es sei $\theta \in S_{\pi/4}$. Dann gibt es eine Konstante $C_{\text{NR}} > 0$, so dass für $\frac{2\gamma}{c}C(\operatorname{Im} \theta) < 1$*

$$\|\Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta) - \Lambda_{c,0}^{(\pm)}(\theta)\| \leq C_{\text{NR}} \frac{\gamma}{c}$$

gilt.

BEWEIS. Dies folgt unmittelbar aus Gleichung (III.37) im Beweis von Satz III.8. \square

Der nächste Satz zeigt, dass die Räume $\mathcal{H}_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)$ invariant unter $D_{c,\gamma}(\theta)$ sind, und er beschreibt das Spektrum der Einschränkung des Operators auf diese Räume. Entsprechende Aussagen für den Fall, dass ein Teil des Spektrums in einer Jordan-Kurve enthalten ist, finden sich in [97, Theorem III-6.17]. Der folgende Satz behandelt eine allgemeinere Situation, die wesentlichen Elemente des Beweises von [97, Theorem III-6.17] lassen sich jedoch adaptieren.

Für einen abgeschlossenen Operator A bezeichnen wir mit $\rho(A)$ dessen Resolventenmenge.

SATZ III.10. *Es sei $\theta \in S_{\pi/4}$ und $\frac{2\gamma}{c}C(\operatorname{Im} \theta) < 1$. Dann gilt*

$$(III.38) \quad \Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta) \frac{1}{D_{c,\gamma}(\theta) - z} = \frac{1}{D_{c,\gamma}(\theta) - z} \Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)$$

für alle $z \in \rho(D_{c,\gamma}(\theta))$. Die Teilräume $\operatorname{Ran} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta)$ und $\operatorname{Ran} \Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(\theta)$ sind invariante Teilräume für $D_{c,\gamma}(\theta)$. Es gilt

$$(III.39) \quad \sigma(D_{c,\gamma}(\theta)|_{\operatorname{Ran} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta)}) = \sigma(D_{c,\gamma}(\theta)) \cap \{z \in \mathbb{C} | \operatorname{Re} z > 0\}$$

und

$$(III.40) \quad \sigma(D_{c,\gamma}(\theta)|_{\operatorname{Ran} \Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(\theta)}) = \sigma(D_{c,\gamma}(\theta)) \cap \{z \in \mathbb{C} | \operatorname{Re} z < 0\}.$$

BEWEIS. Sicherlich gilt für alle $z \notin \sigma(D_{c,\gamma}(\theta))$, alle $\eta \in \mathbb{R}$ und alle $f \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ die Gleichung

$$(D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1}(D_{c,\gamma}(\theta) - i\eta)^{-1}f = (D_{c,\gamma}(\theta) - i\eta)^{-1}(D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1}f.$$

Daraus folgt sofort

$$\begin{aligned} (D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^R d\eta (D_{c,\gamma}(\theta) - i\eta)^{-1} f &= \\ &= \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^R d\eta (D_{c,\gamma}(\theta) - i\eta)^{-1} (D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1} f \end{aligned}$$

und somit (III.38). Dies impliziert [97, Kapitel III-5.6 und Theorem III.6.5]

$$(D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1} \text{Ran } \Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta) \subset \text{Ran } \Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)$$

und

$$\Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta) \text{Dom}(D_{c,\gamma}(\theta)) \subset \text{Dom}(D_{c,\gamma}(\theta)), \quad D_{c,\gamma}(\theta) \mathcal{H}_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta) \subset \mathcal{H}_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta).$$

Wir definieren die Operatoren

$$D_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta) := D_{c,\gamma}(\theta)|_{\mathcal{H}_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)}$$

und (zunächst für $z \notin \sigma(D_{c,\gamma}(\theta))$) die Resolventen

$$R_{c,\gamma;\theta}^{(\pm)}(z) := (D_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta) - z)^{-1} = (D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1}|_{\mathcal{H}_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)}.$$

Insbesondere gilt $\sigma(D_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)) \subset \sigma(D_{c,\gamma}(\theta))$.

Andererseits gilt für $f \in \mathcal{H}_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)$ und $z \notin \sigma(D_{c,\gamma}(\theta))$

$$R_{c,\gamma;\theta}^{(\pm)}(z)f = (D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1}f = (D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1}\Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)f.$$

Wir berechnen daher mit Hilfe der ersten Resolventengleichung für $z \in \mathbb{C}$ mit $\text{Re } z < 0$

$$\begin{aligned} \text{(III.41)} \quad (D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1}\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta)f &= \\ &= \frac{1}{2}(D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1}f + \frac{1}{2\pi} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^R d\eta (D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1}(D_{c,\gamma}(\theta) - i\eta)^{-1}f \\ &= \frac{1}{2}(D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1}f + \frac{1}{2\pi} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^R \frac{1}{z - i\eta} [(D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1} - (D_{c,\gamma}(\theta) - i\eta)^{-1}]f \\ &\quad - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \frac{1}{z - i\eta} (D_{c,\gamma}(\theta) - i\eta)^{-1}f, \end{aligned}$$

denn für $z \in \mathbb{C}$ mit $\text{Re } z < 0$ erhält man mit Hilfe des Residuensatzes

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^R d\eta \frac{1}{z - i\eta} = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^R d\eta \frac{z}{z^2 + \eta^2} = -\pi.$$

Analog erhält man für $z \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re} z > 0$

$$(III.42) \quad (D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1} \Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(\theta) f = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \frac{1}{z - i\eta} (D_{c,\gamma}(\theta) - i\eta)^{-1} f.$$

Die rechten Seiten der Gleichungen (III.41) und (III.42) sind holomorph für $z \notin i\mathbb{R}$. Folglich besitzt $R_{c,\gamma;\theta}^{(+)}(z)$ eine holomorphe Fortsetzung nach $\{z \in \mathbb{C} | \operatorname{Re} z < 0\}$ und $R_{c,\gamma;\theta}^{(-)}(z)$ nach $\{z \in \mathbb{C} | \operatorname{Re} z > 0\}$. Aus der Holomorphie der Resolvente und dem Identitätssatz folgt $\{z \in \mathbb{C} | \operatorname{Re} z < 0\} \subset \rho(D_{c,\gamma}^{(+)}(\theta))$ und $\{z \in \mathbb{C} | \operatorname{Re} z > 0\} \subset \rho(D_{c,\gamma}^{(-)}(\theta))$. Dies zeigt $\sigma(D_{c,\gamma}^{(-)}(\theta)) \subset \{z \in \mathbb{C} | \operatorname{Re} z < 0\}$ und $\sigma(D_{c,\gamma}^{(+)}(\theta)) \subset \{z \in \mathbb{C} | \operatorname{Re} z > 0\}$. Andererseits kann für $z \in \sigma(D_{c,\gamma}(\theta))$ nicht $z \in \rho(D_{c,\gamma}^{(-)}(\theta))$ und gleichzeitig $z \in \rho(D_{c,\gamma}^{(+)}(\theta))$ gelten, da sonst wegen $(D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1} = (D_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) - z)^{-1} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) + (D_{c,\gamma}^{(-)}(\theta) - z)^{-1} \Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(\theta)$ der Widerspruch $z \in \rho(D_{c,\gamma}(\theta))$ folgen würde. Dies zeigt (III.39) und (III.40). \square

Als Nächstes benötigen wir noch Spektralprojektionen für die Eigenwerte: Für alle $n \geq 1$ definieren wir Spektralprojektionen

$$(III.43) \quad P_n(c, \gamma; \theta) := -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_n(c, \gamma)} \frac{1}{D_{c,\gamma}(\theta) - z} dz,$$

wobei $\Gamma_n(c, \gamma)$ im mathematisch positiven Sinn durchlaufen wird und so gewählt ist, dass für alle $1 \leq l \leq n$ die Eigenwerte $\tilde{E}_{n,l}(c, \gamma)$ innerhalb der Integrationskontour liegen, jedoch keine weiteren Punkte des Spektrums von $D_{c,\gamma}(\theta)$.

Für später benötigen wir außerdem noch Spektralprojektionen für die einzelnen Feinstrukturkomponenten. Wir setzen für $n \geq 1$ und $1 \leq l \leq n$

$$(III.44) \quad P_{n,l}(c, \gamma; \theta) := -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_{n,l}(c, \gamma)} \frac{1}{D_{c,\gamma}(\theta) - z} dz,$$

wobei $\Gamma_{n,l}(c, \gamma)$ im mathematisch positiven Sinn durchlaufen wird und so gewählt ist, dass nur der Eigenwert $\tilde{E}_{n,l}(c, \gamma)$ innerhalb der Integrationskontour liegt. Zugehörige normierte Eigenfunktionen bezeichnen wir mit $\phi_{n,l}(c, \gamma; \theta)$.

III.2.4. Transformationsfunktionen. Für verschiedene Abschätzungen benötigen wir außerdem Transformationsfunktionen zwischen den Spektralräumen der dilatierten und der nicht dilatierten Operatoren. Ein anderes Beispiel für eine solche Transformationsfunktion ist die von Siedentop und Stockmeyer [138] untersuchte Douglas-Kroll-Transformation, die eine (unitäre) Transformationsfunktion zwischen den positiven Spektralräumen des nicht-dilatierten freien Dirac-Operators und des nicht-dilatierten Coulomb-Dirac-Operators ist (siehe Kapitel II.2). Da die hier zu Grunde liegenden Projektionen nicht orthogonal (selbstadjungiert) sind, werden unsere Transformationsfunktionen jedoch lediglich zu Ähnlichkeitstransformationen führen.

Um die Existenz der Transformationsfunktion sicherzustellen, benötigen wir Normabschätzungen an die Differenz der Spektralprojektionen.

LEMMA III.11. *Es sei $\theta \in S_{\pi/4}$.*

- a) *Dann gibt es eine Konstante $C_{\text{DL}} > 0$ (unabhängig von c, γ und θ), so dass für $\frac{2\gamma}{c}C(\text{Im } \theta) < 1$ die Abschätzung*

$$(III.45) \quad \|\Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(0) - \Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)\| \leq C_{\text{DL}}|\theta|$$

gilt. Der Operator $|D_{c,0}(0)|^{1/2}[\Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(0) - \Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)]|D_{c,0}(0)|^{-1/2}$ hängt holomorph von $\theta \in M_{\gamma/c}$ ab.

- b) *Es sei ferner $0 < q < 1$. Dann gibt es eine Konstante $C_{\text{DLS}} > 0$ (unabhängig von c, γ und θ), so dass für $\frac{2\gamma}{c}C(\text{Im } \theta) < q$ die Abschätzung*

$$(III.46) \quad \||D_{c,0}(0)|^{1/2}[\Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(0) - \Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)]|D_{c,0}(0)|^{-1/2}\| \leq C_{\text{DLS}}|\theta|$$

gilt.

BEWEIS. Wir adaptieren eine Methode, die von Siedentop und Stockmeyer [138] sowie von Griesemer, Lewis und Siedentop [69] für andere Wahlen der Projektionen verwendet wurde. Wir beginnen mit der Berechnung der Resolventendifferenz

$$(III.47) \quad \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} - \frac{1}{D_{c,0}(0) - i\eta} = \\ = ic[e^{-\theta} - 1] \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \frac{1}{D_{c,0}(0) - i\eta}$$

und stellen fest, dass $|e^{-\theta} - 1| \leq B|\theta|$ gilt mit $B = e^{\pi/4}$ für alle $|\theta| \leq \pi/4$.

Schritt 1: Beweis für die freien Projektionen. Aus Gleichung (III.47) folgt mit Lemma III.7

$$\begin{aligned} & \left| \left(f, \left[\frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} - \frac{1}{D_{c,0}(0) - i\eta} \right] g \right) \right| \\ & \leq B|\theta| \left\| \frac{|D_{c,0}(\text{Re } \theta)|^{1/2}}{|D_{c,0}(\text{Re } \theta)| + i\eta} f \right\| \left\| \frac{|D_{c,0}(0)|^{1/2}}{D_{c,0}(0) - i\eta} g \right\| \\ & \quad \times \left\| |D_{c,0}(\text{Re } \theta)|^{-1/2} c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla |D_{c,0}(0)|^{-1/2} \right\| \left\| \frac{|D_{c,0}(\text{Re } \theta)| - i\eta}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \right\| \\ & \leq \frac{B|\theta|}{e^{-\text{Re } \theta/2}} C_1(\text{Im } \theta) \left\| \frac{|D_{c,0}(\text{Re } \theta)|^{1/2}}{|D_{c,0}(\text{Re } \theta)| + i\eta} f \right\| \left\| \frac{|D_{c,0}(0)|^{1/2}}{D_{c,0}(0) - i\eta} g \right\|, \end{aligned}$$

wobei wir die Abschätzung $\|c|\nabla||D_{c,0}(\text{Re } \theta)|^{-1}\| \leq 1/e^{-\text{Re } \theta}$ verwendet haben.

Dies zeigt (vgl. [138, Beweis von Lemma 1] und Beweis von Korollar III.9)

$$\|\Lambda_{c,0}^{(\pm)}(0) - \Lambda_{c,0}^{(\pm)}(\theta)\| \leq \tilde{C}_{\text{DL}}|\theta|$$

mit einem $\tilde{C}_{\text{DL}} > 0$ und ebenso

$$\||D_{c,0}(0)|^{1/2}[\Lambda_{c,0}^{(\pm)}(0) - \Lambda_{c,0}^{(\pm)}(\theta)]|D_{c,0}(0)|^{-1/2}\| \leq \tilde{C}_{\text{DL}}|\theta|,$$

weil $|D_{c,0}(0)|^{1/2}$ mit allen Operatoren in (III.47) vertauscht.

Schritt 2: Beweis von (III.45). Als Nächstes schreiben wir

$$(III.48) \quad \begin{aligned} & \left\| \left[V^{1/2} \frac{e^{-\theta}}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} V^{1/2} \right] - \left[V^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(0) - i\eta} V^{1/2} \right] \right\| \\ & \leq \left\| \left[V^{1/2} \frac{e^{-\theta}}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} V^{1/2} \right] - \left[V^{1/2} \frac{e^{-\theta}}{D_{c,0}(0) - i\eta} V^{1/2} \right] \right\| \\ & \quad + |e^{-\theta} - 1| \left\| \left[V^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(0) - i\eta} V^{1/2} \right] \right\| \leq \frac{B|\theta|\pi}{2c} (C(\operatorname{Im} \theta) + 1). \end{aligned}$$

Dabei haben wir den zweiten Summanden durch $B|\theta|\pi/(2c)$ nach oben abgeschätzt, und den ersten Summanden ähnlich wie in (III.26) gemäß

$$\begin{aligned} & \left\| e^{-\theta}(e^{-\theta} - 1) \left[V^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} c\alpha \cdot \nabla \frac{1}{D_{c,0}(0) - i\eta} V^{1/2} \right] \right\| \leq \\ & \leq \frac{B|\theta|\pi}{2c} \left\| \frac{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)|}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \right\| \left\| \frac{|D_{c,0}(0)|}{D_{c,0}(0) - i\eta} \right\| \leq \frac{B|\theta|\pi}{2c} C(\operatorname{Im} \theta). \end{aligned}$$

Auf ähnliche Weise erhalten wir

$$(III.49) \quad \begin{aligned} & \left\| \left[e^{-\theta/2} V^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} - V^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(0) - i\eta} \right] g \right\| \\ & \leq |e^{-\theta/2} - e^{\theta/2}| \left\| e^{-\theta} V^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} c\alpha \cdot \nabla \frac{1}{D_{c,0}(0) - i\eta} g \right\| \\ & \quad + |e^{-\theta/2} - 1| \left\| V^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(0) - i\eta} g \right\| \\ & \leq B|\theta| \sqrt{\frac{\pi}{2c}} (C(\operatorname{Im} \theta) + 1/2) \left\| \frac{|D_{c,0}(0)|^{1/2}}{D_{c,0}(0) - i\eta} g \right\|. \end{aligned}$$

Ferner gilt wegen Lemma III.7

$$(III.50) \quad \left\| V^{1/2} \frac{e^{-\theta/2}}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} g \right\| \leq C_1(\operatorname{Im} \theta) \sqrt{\frac{\pi}{2c}} \left\| \frac{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)|^{1/2}}{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)| - i\eta} g \right\|$$

und (siehe (III.26))

$$(III.51) \quad \left\| V^{1/2} \frac{e^{-\theta}}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} V^{1/2} \right\| \leq \frac{\pi C(\operatorname{Im} \theta)}{2c}.$$

Die Formeln (III.48) bis (III.51) zeigen

$$\begin{aligned} & \left| \gamma^n \left(f, \frac{e^{-\theta/2}}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} V^{1/2} \left[V^{1/2} \frac{e^{-\theta}}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} V^{1/2} \right]^{n-1} V^{1/2} \frac{e^{-\theta/2}}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} g \right) - \right. \\ & \quad \left. - \gamma^n \left(f, \frac{1}{D_{c,0}(0) - i\eta} V^{1/2} \left[V^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(0) - i\eta} V^{1/2} \right]^{n-1} V^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(0) - i\eta} g \right) \right| \\ & \leq B|\theta| \left(\frac{\pi\gamma C(\operatorname{Im} \theta)}{2c} \right)^{n-1} \left(\frac{\pi\gamma C_1(\operatorname{Im} \theta)}{2c} \right) (C(\operatorname{Im} \theta) + 1) \\ & \quad \times \left\| \frac{|D_{c,0}(0)|^{1/2}}{|D_{c,0}(0)| - i\eta} f \right\| \left[n \left\| \frac{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)|^{1/2}}{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)| + i\eta} g \right\| + \left\| \frac{|D_{c,0}(0)|^{1/2}}{D_{c,0}(0) + i\eta} g \right\| \right], \end{aligned}$$

woraus (III.45) folgt.

Schritt 3: Beweis von (III.46). Wir verwenden hier die Entwicklung

$$(III.52) \quad \frac{1}{D_{c,\gamma}(\theta) - i\eta} - \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \\ = \sum_{n=1}^{\infty} \gamma^n \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \left[V \frac{e^{-\theta}}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \right]^{n-1} V \frac{e^{-\theta}}{D_{c,0}(\theta) - i\eta}.$$

Wir beginnen mit den erforderlichen Abschätzungen für die Resolventendifferenzen. Es gilt mit der Hardy-Ungleichung und wie in (III.26)

$$(III.53) \quad \left\| \left[e^{-\theta} V \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} - V \frac{1}{D_{c,0}(0) - i\eta} \right] |D_{c,0}(0)|^{-1/2} g \right\| \\ \leq \frac{2B|\theta|}{c} (C(\operatorname{Im} \theta) + 1) \left\| \frac{|D_{c,0}(0)|^{1/2}}{D_{c,0}(0) - i\eta} g \right\|.$$

Ebenso erhalten wir

$$(III.54) \quad \left\| V \left[\frac{e^{-\theta}}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} - \frac{1}{D_{c,0}(0) - i\eta} \right] \right\| \leq \frac{2B|\theta|}{c} (C(\operatorname{Im} \theta) + 1)$$

sowie

$$(III.55) \quad \left\| \left[\frac{1}{D_{c,0}(\bar{\theta}) + i\eta} - \frac{1}{D_{c,0}(0) + i\eta} \right] |D_{c,0}(0)|^{1/2} f \right\| \\ \leq \left\| [e^{\bar{\theta}} - 1] \frac{e^{-\bar{\theta}}}{D_{c,0}(\bar{\theta}) + i\eta} c\alpha \cdot \nabla \frac{|D_{c,0}(0)|^{1/2}}{D_{c,0}(0) + i\eta} f \right\| \\ \leq 2B|\theta|C(\operatorname{Im} \theta) \left\| \frac{|D_{c,0}(0)|^{1/2}}{D_{c,0}(0) + i\eta} f \right\|.$$

Für die Terme mit den Resolventen schätzen wir mit Hilfe von Lemma III.7 und Lemma III.4

$$(III.56) \quad \left\| e^{-\theta} V \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} |D_{c,0}(0)|^{-1/2} g \right\| \leq \frac{2}{c} \left\| \frac{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)|}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} |D_{c,0}(0)|^{-1/2} g \right\| \\ \leq \frac{2C_1(\operatorname{Im} \theta)e^{\pi/8}}{c} \left\| \frac{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)|^{1/2}}{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)| - i\eta} g \right\|,$$

und (vgl. Abschätzung (III.26))

$$(III.57) \quad \left\| e^{-\theta} V \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \right\| \leq \frac{2}{c} \left\| |D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)| \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \right\| \leq \frac{2C(\operatorname{Im} \theta)}{c}$$

ab. Die Formeln (III.53) bis (III.57) zeigen

$$\gamma^n \left| \left(f, |D_{c,0}(0)|^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \left[V \frac{e^{-\theta}}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \right]^{n-1} V \frac{e^{-\theta}}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} |D_{c,0}(0)|^{-1/2} g \right) \right. \\ \left. - \left(f, |D_{c,0}(0)|^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(0) - i\eta} \left[V \frac{1}{D_{c,0}(0) - i\eta} \right]^{n-1} V \frac{1}{D_{c,0}(0) - i\eta} |D_{c,0}(0)|^{-1/2} g \right) \right| \\ \leq e^{\pi/4} B|\theta| \left(\frac{2\gamma C(\operatorname{Im} \theta)}{c} \right)^{n-1} \left(\frac{2\gamma C_1(\operatorname{Im} \theta)}{c} \right) (C(\operatorname{Im} \theta) + 1) \left\| \frac{|D_{c,0}(0)|^{1/2}}{D_{c,0}(0) + i\eta} f \right\| \\ \times \left[n \left\| \frac{|D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta)|^{1/2}}{D_{c,0}(\operatorname{Re} \theta) - i\eta} g \right\| + \left\| \frac{|D_{c,0}(0)|^{1/2}}{D_{c,0}(0) - i\eta} g \right\| \right],$$

was wiederum (III.46) beweist.

Schritt 4: Holomorphie. Dies folgt wie im Beweis von Satz III.8 daraus, dass die Ausdrücke

$$\left(f, |D_{c,0}(0)|^{1/2} \frac{1}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \left[V \frac{e^{-\theta}}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} \right]^{n-1} V \frac{e^{-\theta}}{D_{c,0}(\theta) - i\eta} |D_{c,0}(0)|^{-1/2} g \right)$$

holomorphe Funktionen von θ sind und die obigen Abschätzungen die Existenz einer von θ unabhängigen summier- und integrierbaren Majorante zeigen. \square

Bevor wir in Satz III.13 die Existenz einer Transformationsfunktion zwischen den dilatierten und den nicht-dilatierten Spektralräumen zeigen können, benötigen wir noch zwei Operator-Ungleichungen, die in [69] bewiesen wurden. Der Vollständigkeit wegen geben wir dennoch den kurzen Beweis. Zumindest für eine der beiden Ungleichungen existiert eine verbesserte Version (siehe [117] bzw. Lemma II.2). Da jedoch an verschiedenen anderen Stellen ebenfalls die Einschränkung $\frac{\gamma}{c} \leq \frac{1}{2}$ auftritt und wir letztlich ohnehin nur an der Anwendung auf den Fall großer Lichtgeschwindigkeiten c interessiert sind, begnügen wir uns mit der ursprünglichen Version:

LEMMA III.12. *Es sei $\vartheta \in \mathbb{R}$ und $\frac{\gamma}{c} < \frac{1}{2}$. Dann gelten die Operator-Ungleichungen*

$$\left(1 - \frac{2\gamma}{c}\right) \|D_{c,0}(\vartheta)\| \leq \|D_{c,\gamma}(\vartheta)\| \leq \left(1 + \frac{2\gamma}{c}\right) \|D_{c,0}(\vartheta)\|.$$

Insbesondere gelten die Abschätzungen

$$\| \|D_{c,\gamma}(\vartheta)\|^{1/2} \|D_{c,0}(\vartheta)\|^{-1/2} \| = \| \|D_{c,0}(\vartheta)\|^{-1/2} \|D_{c,\gamma}(\vartheta)\|^{1/2} \| \leq \sqrt{1 + \frac{2\gamma}{c}}$$

und

$$\| \|D_{c,0}(\vartheta)\|^{1/2} \|D_{c,\gamma}(\vartheta)\|^{-1/2} \| = \| \|D_{c,\gamma}(\vartheta)\|^{-1/2} \|D_{c,0}(\vartheta)\|^{1/2} \| \leq \sqrt{1 - \frac{2\gamma}{c}}.$$

BEWEIS. Es reicht den Fall $\vartheta = 0$ zu betrachten. Zur Vereinfachung der Notation unterdrücken wir die Abhängigkeit von ϑ . Es sei $f \in H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$. Dann gilt

$$\|D_{c,\gamma}f\| \leq \|D_{c,0}f\| + \gamma \|Vf\| \leq \|D_{c,0}f\| + 2\gamma \|\nabla f\| \leq \left(1 + \frac{2\gamma}{c}\right) \|D_{c,0}f\|$$

und

$$\|D_{c,\gamma}f\| \geq \|D_{c,0}f\| - \gamma \|Vf\| \geq \|D_{c,0}f\| - 2\gamma \|\nabla f\| \geq \left(1 - \frac{2\gamma}{c}\right) \|D_{c,0}f\|,$$

wobei wir die Hardy-Ungleichung verwendet haben. \square

Nun können wir schließlich die Transformationsfunktion zwischen den positiven Spektralräumen des dilatierten und des nicht-dilatierten Coulomb-Dirac-Operators definieren und untersuchen. Diese Transformationsfunktion wird an verschiedenen Stellen nützlich sein. Ihr Hauptzweck besteht jedoch darin, anstelle des dilatierten und auf seinen positiven Spektralraum eingeschränkten Coulomb-Dirac-Operators $D_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)$ den Operator $\mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta) D_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta) \mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta)^{-1}$ betrachten zu können, der auf einem festen Raum (nämlich $\text{Ran } \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)$) operiert. Insbesondere werden wir von diesem Operator in Satz VI.5 zeigen, dass er eine holomorphe Familie von Operatoren definiert.

SATZ III.13. Es sei $\theta \in S_{\pi/4}$, $\frac{2\gamma}{c}C(\text{Im } \theta) < 1$ und $C_{\text{DL}}|\theta| < q$ für ein $0 < q < 1$. Dann gilt:

- a) Dann gibt es eine beschränkte Abbildung $\mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta) : L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ mit

$$(III.58) \quad \mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta) \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) \mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta)^{-1} = \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)$$

mit beschränkter Inverser $\mathcal{V}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta) := \mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta)^{-1}$. Es gibt eine Konstante $C_{\text{UDL}} > 0$, unabhängig von c, γ und θ , so dass

$$(III.59) \quad \|\mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta) - \mathbf{1}\| \leq C_{\text{UDL}}|\theta|$$

gilt.

- b) Wenn zusätzlich $C_{\text{DLS}}|\theta| < q$ gilt, dann gibt es eine Konstante C_{UDLS} , unabhängig von c, γ und θ , so dass

$$(III.60) \quad \||D_{c,0}(0)|^{1/2} \mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta) |D_{c,0}(0)|^{-1/2} - \mathbf{1}\| \leq C_{\text{UDLS}}|\theta|$$

gilt. Dieselben Abschätzungen gelten für $\mathcal{V}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta)$.

- c) Der Operator $\mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta)$ sowie für $C_{\text{DLS}}|\theta| < q$ der Operator

$$|D_{c,0}(0)|^{1/2} \mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta) |D_{c,0}(0)|^{-1/2}$$

und der Operator

$$|D_{c,0}(0)|^{-1/2} \mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta) |D_{c,0}(0)|^{1/2}$$

hängen holomorph von θ ab. Dieselben Aussagen gelten für $\mathcal{V}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta)$.

BEWEIS. Wir folgen [138, Theorem 1] sowie [97, Kapitel I-4.6.] und definieren die gesuchte Abbildung durch

$$\mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta) := [\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0) \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) + \Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(0) \Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(\theta)] [\mathbf{1} - (\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0))^2]^{-1/2}.$$

Man verifiziert leicht, dass $(\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0))^2$ mit $\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta)$ und $\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)$ vertauscht, und dass $\mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta)$ invertierbar ist mit Inverser

$$\mathcal{V}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta) := [\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0) + \Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(\theta) \Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(0)] [\mathbf{1} - (\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0))^2]^{-1/2},$$

sowie die Gültigkeit der Gleichung (III.58). Da jedoch nicht beide Projektionen orthogonal sind, sind die Abbildungen im Gegensatz zu [138] nicht unitär.

$\mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta)$ hängt wegen Lemma III.11 holomorph von θ ab, denn $(1 - A)^{-1/2}$ besitzt für beschränkte A mit $\|A\| < 1$ eine norm-konvergente Reihenentwicklung.

Beweis von (III.59): Wir folgen nun [138, Beweis von Lemma 5]. Es gilt

$$\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0) \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) + \Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(0) \Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(\theta) = \mathbf{1} - [\Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(0) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)] [\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)]$$

und somit

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta) &:= \\ &= \{ \mathbf{1} - [\Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(0) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)] [\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)] \} [\mathbf{1} - (\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0))^2]^{-1/2}. \end{aligned}$$

Unter Verwendung der Darstellung [65, Formel 3.197.4]

$$(1 - a^2)^{-1/2} = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1 - y^2}} \frac{1}{1 - ya} dy$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta) &= \left\{ \mathbf{1} - [\Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(0) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)] [\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)] \right\} \\ &\quad \times \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1 - y^2}} \frac{1}{1 - y(\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0))} dy. \end{aligned}$$

Wegen Lemma III.11 gilt

$$\| [\Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(0) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)] [\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)] \| \leq 2C_{\text{DL}}|\theta|$$

und

$$\begin{aligned} \left\| \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1 - y^2}} \frac{1}{1 - y(\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0))} dy - \mathbf{1} \right\| &= \\ &= \left\| \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1 - y^2}} \frac{y(\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0))}{1 - y(\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0))} dy \right\| \leq \tilde{C}C_{\text{DL}}|\theta| \end{aligned}$$

mit einem $\tilde{C} > 0$, wobei wir

$$\left\| \frac{1}{1 - y(\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0))} \right\| \leq \frac{1}{1 - |y| \|\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)\|}$$

verwendet haben.

Beweis von (III.60): Die Strategie ist ähnlich zu der im Beweis von (III.59). Wir schreiben

$$\begin{aligned} &|D_{c,0}(0)|^{1/2} \mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta) |D_{c,0}(0)|^{-1/2} = \\ &= \left\{ \mathbf{1} - |D_{c,0}(0)|^{1/2} |D_{c,\gamma}(0)|^{-1/2} [\Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(0) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)] |D_{c,\gamma}(0)|^{1/2} |D_{c,0}(0)|^{-1/2} \right. \\ &\quad \left. \times |D_{c,0}(0)|^{1/2} [\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)] |D_{c,0}(0)|^{-1/2} \right\} \\ &\quad \times \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1 - y^2}} \frac{1}{1 - y |D_{c,0}(0)|^{1/2} (\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(\theta) - \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)) |D_{c,0}(0)|^{-1/2}} dy, \end{aligned}$$

wobei wir benützt haben, dass $|D_{c,\gamma}(0)|^{-1/2}$ mit $\Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(0)$ vertauscht. Mit Lemma III.12 und Lemma III.11 erhalten wir wie vorher die Behauptung. \square

Eine erste Anwendung der Transformationsfunktion $\mathcal{U}_{\text{DL}}(c, \gamma; \theta)$ ist das folgende Lemma, das die Differenz zwischen dem dilatierten und dem nicht-dilatierten Coulomb-Dirac-Operator abschätzt.

LEMMA III.14. *Unter den Voraussetzungen von Satz III.13 b) gibt es eine Konstante $C_{UD} > 0$, unabhängig von γ , c und θ , so dass*

$$(III.61) \quad \left\| |D_{c,0}(0)|^{-1/2} \right. \\ \left. \times [\mathcal{U}_{DL}(c, \gamma; \theta) D_{c,\gamma}(\theta) \mathcal{U}_{DL}(c, \gamma; \theta)^{-1} - D_{c,\gamma}(0)] |D_{c,0}(0)|^{-1/2} \right\| \leq C_{UD} |\theta|$$

gilt.

BEWEIS. Es gilt

$$\begin{aligned} & |D_{c,0}(0)|^{-1/2} [\mathcal{U}_{DL}(c, \gamma; \theta) D_{c,\gamma}(\theta) \mathcal{U}_{DL}(c, \gamma; \theta)^{-1} - D_{c,\gamma}(0)] |D_{c,0}(0)|^{-1/2} \\ &= |D_{c,0}(0)|^{-1/2} [\mathcal{U}_{DL}(c, \gamma; \theta) - \mathbf{1}] |D_{c,0}(0)|^{1/2} |D_{c,0}(0)|^{-1/2} D_{c,\gamma}(\theta) |D_{c,0}(0)|^{-1/2} \\ &\quad \times |D_{c,0}(0)|^{1/2} \mathcal{U}_{DL}(c, \gamma; \theta)^{-1} |D_{c,0}(0)|^{-1/2} + \\ &\quad + |D_{c,0}(0)|^{-1/2} [D_{c,\gamma}(\theta) - D_{c,\gamma}(0)] |D_{c,0}(0)|^{-1/2} \\ &\quad \times |D_{c,0}(0)|^{1/2} \mathcal{U}_{DL}(c, \gamma; \theta)^{-1} |D_{c,0}(0)|^{-1/2} + \\ &\quad + |D_{c,0}(0)|^{-1/2} D_{c,\gamma}(0) |D_{c,0}(0)|^{-1/2} |D_{c,0}(0)|^{1/2} [\mathcal{U}_{DL}(c, \gamma; \theta)^{-1} - \mathbf{1}] |D_{c,0}(0)|^{-1/2}, \end{aligned}$$

woraus wegen

$$(III.62) \quad \left\| |D_{c,0}(0)|^{-1/2} [D_{c,\gamma}(\theta) - D_{c,\gamma}(0)] |D_{c,0}(0)|^{-1/2} \right\| \\ = \left\| |D_{c,0}(0)|^{-1/2} (e^{-\theta} - 1) [-ic\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - \gamma V] |D_{c,0}(0)|^{-1/2} \right\| \leq B |\theta| \left(1 + \frac{\pi\gamma}{2c}\right)$$

und Satz III.13 die Behauptung folgt. Im Beweis von (III.62) haben wir die Ungleichung $|e^{-\theta} - 1| \leq B|\theta|$ mit $B = e^{\pi/4}$ sowie die Kato-Ungleichung verwendet. \square

III.2.5. Eine Resolventenabschätzung für den Dirac-Operator.

Wir wählen im Folgenden ein $\eta > 0$ so, dass für ein $\tilde{n} > 1$ und alle $c \geq 1$ gilt $\tilde{E}_{\tilde{n}, \tilde{n}}(c, \gamma) < c^2 - \eta$ und $\tilde{E}_{\tilde{n}+1, 1}(c, \gamma) > c^2 - \eta$.

Mit den Bezeichnungen aus Kapitel III.2.3 definieren wir

$$P_{\text{disc}, \tilde{n}}(c, \gamma; \theta) := \sum_{1 \leq n \leq \tilde{n}} P_n(c, \gamma; \theta)$$

und

$$\bar{P}_{\text{disc}, \tilde{n}}(c, \gamma; \theta) := \mathbf{1} - (\Lambda_{c,\gamma}^{(-)}(\theta) + P_{\text{disc}, \tilde{n}}(c, \gamma; \theta)).$$

Man beachte, dass $\bar{P}_{\text{disc}, \tilde{n}}(c, \gamma; \theta)$ auf einen Teilraum des positiven Spektralraums projiziert.

Der folgende Satz verallgemeinert [13, Lemma 3.8] partiell für Dirac-Operatoren (siehe auch Satz B.3). Im nicht-relativistischen Grenzfall werden wir den Satz noch etwas erweitern (siehe Lemma III.19 und Korollar III.21). Der Satz sowie Korollar III.21 erlauben eine gewisse Kontrolle über die Norm der Resolvente des nicht-selbstadjungierten Operators $D_{c,\gamma}(\theta)|_{\text{Ran } \bar{P}_{\text{disc}, \tilde{n}}(c,\gamma;\theta)}$. Man beachte, dass für nicht-normale Operatoren im Allgemeinen die Norm der Resolvente nicht durch den inversen Abstand vom Spektrum nach oben abgeschätzt werden kann. Insbesondere geht im Allgemeinen die Norm der Resolvente gegen nicht null, wenn der Abstand des Spektralparameters zum Spektrum gegen unendlich geht; man denke etwa an das Beispiel eines unbeschränkten Operators mit leerem Spektrum.

SATZ III.15. *Es gelten die Voraussetzungen von Satz III.13 b) und es seien für ein $0 < q < 1$ die Ungleichungen $C_{UD}|\theta|(1 + 2\gamma/c) < q$ sowie $2\gamma(1 + C_{FW}|\operatorname{Im} \theta|) < q$. Dann gilt: Der Operator $D_{c,\gamma}(\theta)|_{\operatorname{Ran} \bar{P}_{\operatorname{disc},\bar{n}}(c,\gamma;\theta)} - z$ hat für alle $z \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re} z \leq c^2 - 1$ eine beschränkte Inverse. Es gibt eine Konstante $C_R > 0$, unabhängig von c, γ und θ , so dass für alle $z \in C$ mit $\operatorname{Re} z \leq c^2 - 1$ die Abschätzung*

$$\left\| \left[D_{c,\gamma}(\theta)|_{\operatorname{Ran} \bar{P}_{\operatorname{disc},\bar{n}}(c,\gamma;\theta)} - z \right]^{-1} \bar{P}_{\operatorname{disc},\bar{n}}(c,\gamma;\theta) \right\| \leq \frac{C_R \|\bar{P}_{\operatorname{disc},\bar{n}}(c,\gamma;\theta)\|}{c^2 - \eta - \operatorname{Re} z}$$

gilt.

BEWEIS. Wir führen eine Fallunterscheidung durch.

Fall 1: $\operatorname{Re} z \leq 0$. Da wegen Satz III.13 die Inklusion

$$\operatorname{Ran} (\mathcal{U}_{\operatorname{DL}}(c,\gamma;\theta) \bar{P}_{\operatorname{disc},\bar{n}}(c,\gamma;\theta) \mathcal{U}_{\operatorname{DL}}(c,\gamma;\theta)^{-1}) \subset \operatorname{Ran} (\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0))$$

gilt, reicht es, wiederum wegen Satz III.13, die Abschätzung

$$\begin{aligned} & \left\| \left[(\mathcal{U}_{\operatorname{DL}}(c,\gamma;\theta) D_{c,\gamma}(\theta) \mathcal{U}_{\operatorname{DL}}(c,\gamma;\theta)^{-1})|_{\operatorname{Ran} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)} - z \right]^{-1} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0) \right\| \\ & \leq \frac{C}{c^2 - \eta - \operatorname{Re} z} \end{aligned}$$

zu zeigen.

Wir führen hierzu wie in [13, Beweis von Lemma 3.8] eine Resolventenentwicklung durch:

$$\begin{aligned} \text{(III.63)} \quad & [(\mathcal{U}_{\operatorname{DL}}(c,\gamma;\theta) D_{c,\gamma}(\theta) \mathcal{U}_{\operatorname{DL}}(c,\gamma;\theta)^{-1})|_{\operatorname{Ran} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)} - z]^{-1} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0) \\ & = \sum_{n=0}^{\infty} [D_{c,\gamma}(0)|_{\operatorname{Ran} \bar{\Lambda}_{c,\gamma}^{(+)}(0)} - z]^{-1} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0) \\ & \quad \times \left[\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0) [\mathcal{U}_{\operatorname{DL}}(c,\gamma;\theta) D_{c,\gamma}(\theta) \mathcal{U}_{\operatorname{DL}}(c,\gamma;\theta)^{-1} - D_{c,\gamma}(0)] \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0) \right. \\ & \quad \left. \times [D_{c,\gamma}(0)|_{\operatorname{Ran} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)} - z]^{-1} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0) \right]^n \\ & = \sum_{n=0}^{\infty} [D_{c,\gamma}(0)|_{\operatorname{Ran} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)} - z]^{-1} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0) |D_{c,\gamma}(0)|^{1/2} \\ & \quad \times \left[\Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0) |D_{c,\gamma}(0)|^{-1/2} |D_{c,0}(0)|^{1/2} |D_{c,0}(0)|^{-1/2} \right. \\ & \quad \times [\mathcal{U}_{\operatorname{DL}}(c,\gamma;\theta) D_{c,\gamma}(\theta) \mathcal{U}_{\operatorname{DL}}(c,\gamma;\theta)^{-1} - D_{c,\gamma}(0)] \\ & \quad \times |D_{c,0}(0)|^{-1/2} |D_{c,0}(0)|^{1/2} |D_{c,\gamma}(0)|^{-1/2} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0) \\ & \quad \times |D_{c,\gamma}(0)|^{1/2} [D_{c,\gamma}(0)|_{\operatorname{Ran} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)} - z]^{-1} \\ & \quad \left. \times \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0) |D_{c,\gamma}(0)|^{1/2} \right]^n |D_{c,\gamma}(0)|^{-1/2} \end{aligned}$$

Um die Konvergenz der Reihe und die behauptete Abschätzung zu zeigen, müssen wir die einzelnen Terme abschätzen.

Zunächst stellen wir fest, dass wegen $\operatorname{Re} z \leq 0$ die Abschätzung

$$\text{(III.64)} \quad \frac{|D_{c,\gamma}(0)|}{D_{c,\gamma}(0)|_{\operatorname{Ran} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)} - z} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0) = \sup_{\lambda \geq c^2} \frac{\lambda}{|\lambda - z|} \leq 1$$

gilt. Außerdem erhalten wir wegen des Spektralsatzes:

$$(III.65) \quad \begin{aligned} & \| |D_{c,\gamma}(0)|^{1/2} [D_{c,\gamma}(0)|_{\text{Ran } \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)} - z]^{-1} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0) \|^2 \\ & \leq \| |D_{c,\gamma}(0)|_{\text{Ran } \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)} - z]^{-1} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0) \| \\ & \quad \times \| |D_{c,\gamma}(0)| [D_{c,\gamma}(0)|_{\text{Ran } \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0)} - z]^{-1} \Lambda_{c,\gamma}^{(+)}(0) \| \leq \frac{C}{c^2 - \eta - \text{Re } z} \end{aligned}$$

Lemma III.14, Lemma III.12 und (III.64) zeigen die Konvergenz der Reihe in (III.63). Zusammen mit Formel (III.65) folgt die Behauptung für $\text{Re } z \leq 0$ dann aus (III.63).

Fall 2: $0 \leq \text{Re } z \leq c^2 - 1$. Wir benützen die Resolventenentwicklung

$$(III.66) \quad [D_{c,\gamma}(\theta) - z]^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} [D_{c,0}(\theta) - z]^{-1} [\gamma e^{-\theta} V [D_{c,0}(\theta) - z]^{-1}]^n.$$

Die Hardy-Ungleichung und Satz III.1 liefern

$$\| \gamma e^{-\theta} V [D_{c,0}(\theta) - z]^{-1} \| \leq 2\gamma e^{-\text{Re } \theta} (1 + C_{\text{FW}} |\text{Im } \theta|) \left\| \frac{|\nabla|}{\sqrt{-e^{-2\theta} c^2 \Delta + c^4 \beta - z}} \right\|.$$

Um diese Norm zu kontrollieren, schätzen wir für $0 \leq \text{Re } z \leq (c^2 - 1)$ wie folgt ab:

$$\begin{aligned} & \sup_{p \in \mathbb{R}^3} \frac{e^{-\text{Re } \theta} |p|}{|\sqrt{e^{-2\theta} c^2 p^2 + c^4} \pm z|} = \sup_{p \in \mathbb{R}^3} \frac{|p|}{|\sqrt{e^{-2\text{Im } \theta} c^2 p^2 + c^4} \pm z|} \\ & \leq \sup_{p \in \mathbb{R}^3} \frac{|p|}{|\sqrt{\cos(2\text{Im } \theta) c^2 p^2 + c^4} \pm \text{Re } z|} = \frac{1}{\sqrt{\cos(2\text{Im } \theta)}} \sup_{p \in \mathbb{R}^3} \frac{|p|}{|\sqrt{c^2 p^2 + c^4} \pm \text{Re } z|} \end{aligned}$$

Wegen $\frac{|p|}{\sqrt{c^2 p^2 + c^4 + \text{Re } z}} \leq 1/c$ reicht es, den Fall mit Minus-Zeichen zu betrachten. Dazu suchen wir für $0 \leq l \leq (c^2 - 1)$ das Supremum der Funktion

$$f_{c,l} : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}, \quad f_{c,l}(r) := \frac{r}{\sqrt{c^2 r^2 + c^4 - l}}.$$

Durch Differenzieren finden wir, dass diese Funktion ihr Maximum bei der Stelle $r_0 := \frac{\sqrt{c^4 - l^2} c}{l}$ annimmt. Wir definieren die Funktion ($0 \leq l \leq (c^2 - 1)$)

$$g_c(l) := f_{c,l}(r_0) = \frac{c}{\sqrt{c^4 - l^2}}.$$

Diese Funktion ist offensichtlich monoton steigend in l und nimmt ihr Maximum folglich an der Stelle $l_0 := c^2 - 1$ an. Es gilt

$$g_c(l_0) = \frac{c}{\sqrt{c^4 - (c^2 - 1)^2}} = \frac{c}{\sqrt{2c^2 - 1}} \leq 1.$$

Somit folgt aus Gleichung (III.66) und Satz III.1 die Abschätzung

$$\| [D_{c,\gamma}(\theta) - z]^{-1} \| \leq \tilde{C} \left\| \frac{1}{\sqrt{e^{-2\theta} c^2 p^2 + c^4 \beta - z}} \right\|$$

mit einem $\tilde{C} > 0$. Da der Operator $\sqrt{e^{-2\theta} c^2 p^2 + c^4 \beta}$ normal ist, erhält man die Abschätzung

$$\| [D_{c,\gamma}(\theta) - z]^{-1} \| \leq \frac{C_R}{c^2 - \eta - \text{Re } z},$$

welche gültig bleibt, wenn wir die Resolvente auf $\text{Ran } \bar{P}_{\text{disc}, \tilde{n}}(c, \gamma; \theta)$ einschränken. \square

III.3. Nicht-Relativistischer Grenzfall

In diesem Abschnitt diskutieren wir den nicht-relativistischen Grenzfall komplex dilatierter Dirac-Operatoren. Entsprechende Abschätzungen werden wir insbesondere benötigen, um in Kapitel VI bestimmte Erwartungswerte der Wechselwirkung mit dem quantisierten Strahlungsfeld abschätzen zu können. Außerdem können wir im nicht-relativistischen Grenzfall auch den in Satz III.15 noch fehlenden Bereich in der Nähe des diskreten Spektrums abdecken und die Norm der in diesem Satz auftretenden Projektion kontrollieren.

III.3.1. Allgemeine Theorie. Wir übertragen einige operatortheoretische Aussagen aus [141] auf den nicht-selbstadjungierten Fall. Zur Abkürzung setzen wir $\beta_{\pm} := \frac{1}{2}(\mathbf{1} \pm \beta)$ sowie $M := \{z \in \mathbb{C} \mid -1 \leq \operatorname{Re} z < 0, |\operatorname{Im} z| \leq 1\}$ und fixieren ein $\gamma > 0$ so, dass $D_{c,\gamma}(\theta) - c^2$ keine Eigenwerte E mit $\operatorname{Re} E \leq -1$ hat. Dies ist für $0 \leq \gamma < 1$ in jedem Fall erfüllt (vgl. Formel (II.5)). Wir definieren als Operatoren auf $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$:

$$\begin{aligned} D_{\infty,0}(\theta) &:= -\frac{e^{-2\theta}}{2} \Delta \\ D_{\infty,\gamma}(\theta) &:= -\frac{e^{-2\theta}}{2} \Delta - \gamma V(\theta) \beta_+ \\ K_{c,0}(\theta) &:= (D_{\infty,0}(\theta) - z - \frac{z^2}{2c^2})^{-1} \\ K_{c,\gamma}(\theta) &:= (D_{\infty,\gamma}(\theta) - z - \frac{z^2}{2c^2})^{-1} \end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} R_{\infty,0;\theta}(z) &:= (D_{\infty,0}(\theta) - z)^{-1}, & R_{c,0;\theta}(z) &:= (D_{c,0}(\theta) - z)^{-1} \\ R_{\infty,\gamma;\theta}(z) &:= (D_{\infty,\gamma}(\theta) - z)^{-1}, & R_{c,\gamma;\theta}(z) &:= (D_{c,\gamma}(\theta) - z)^{-1}. \end{aligned}$$

Wir verallgemeinern zunächst [141, Theorem 6.1 und Theorem 6.4] auf dilatierete Operatoren. Wie in [141] ist Satz III.16 der Ausgangspunkt für die Behandlung des nicht-relativistischen Limes.

SATZ III.16. a) *Es sei $\theta \in S_{\pi/4}$ und $c \geq 1$. Dann gilt für $z \notin \sigma(D_{c,0}(\theta)) \cup \sigma(D_{\infty,0}(\theta))$ die Resolventenbeziehung*

$$\begin{aligned} \text{(III.67)} \quad (D_{c,0}(\theta) \mp c^2 - z)^{-1} &= \left(\beta_{\pm} \pm \frac{1}{2c^2} (-ic\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \pm z) \right) \\ &\quad \times \left(\mathbf{1} \mp \frac{1}{2c^2} z^2 (\pm D_{\infty,0}(\theta) - z)^{-1} \right)^{-1} (\pm D_{\infty,0}(\theta) - z)^{-1}, \end{aligned}$$

b) *Es sei $\theta \in S_{\pi/4}$ und $\frac{2\gamma}{c} C(\operatorname{Im} \theta) < 1$. Dann gilt für $z \in M \setminus \mathbb{R}$*

$$\begin{aligned} \text{(III.68)} \quad (D_{c,\gamma}(\theta) - c^2 - z)^{-1} &= \left(\beta_+ + \frac{1}{2c^2} (-ice^{-\theta} \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + z) \right) \\ &\quad \times K_{c,\gamma}(\theta) \left(\mathbf{1} - \frac{\gamma}{2c^2} V(\theta) (-ice^{-\theta} \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + z) K_{c,\gamma}(\theta) \right)^{-1} \end{aligned}$$

sowie

$$(III.69) \quad K_{c,\gamma}(\theta) = \left(\mathbf{1} - \frac{z^2}{2c^2} (D_{\infty,\gamma}(\theta) - z)^{-1} \right)^{-1} (D_{\infty,\gamma}(\theta) - z)^{-1}.$$

BEWEIS.

a) Wir folgen dem Beweis von [141, Theorem 6.1], wobei wir beachten, dass $z \in \mathbb{C}$ mit $z(1 + \frac{z}{2c^2}) \notin e^{-2i\text{Im}\theta}[0, \infty)$ äquivalent ist zu $z + c^2 \notin \sigma(D_{c,0}(\theta))$. Zum Beweis von Gleichung (III.67) definieren wir die Operatoren

$$A_{\pm}(\theta) := D_{c,0}(\theta) \pm c^2 \pm z = -ic\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \pm 2c^2\beta_{\pm} \pm z$$

und stellen fest dass

$$A_+(\theta)A_-(\theta) = A_-(\theta)A_+(\theta) = -c^2e^{-2i\theta}\Delta - 2c^2z - z^2$$

gilt. Daraus folgt

$$(III.70) \quad A_{\pm}(\theta)^{-1} = \frac{A_{\mp}(\theta)}{2c^2} \left(D_{\infty,0}(\theta) - z - \frac{z^2}{2c^2} \right)^{-1},$$

was wiederum die Behauptung impliziert. Man beachte, dass alle Operatoren äquivalent zu Multiplikationsoperatoren sind.

b) Wir folgen dem Beweis von [141, Theorem 6.2]. Wegen Satz III.6 gilt $z + c^2 \notin \sigma(D_{c,\gamma}(\theta))$. Es folgt

$$D_{c,\gamma}(\theta) - (c^2 + z) = A_-(\theta) - \gamma e^{-\theta}V = (\mathbf{1} + \gamma e^{-\theta}VA_-(\theta)^{-1})A_-(\theta).$$

Weil $D_{c,\gamma}(\theta) - (c^2 + z)$ und $A_-(\theta)$ stetig invertierbar sind, ist der beschränkte Operator $\mathbf{1} + \gamma e^{-\theta}VA_-(\theta)^{-1}$ bijektiv, also insbesondere stetig invertierbar. Wegen Gleichung (III.70) folgt

$$(III.71) \quad \begin{aligned} (D_{c,\gamma}(\theta) - c^2 - z)^{-1} &= (A_-(\theta) - \gamma V(\theta))^{-1} \\ &= A_-(\theta)^{-1} (1 - \gamma V(\theta)A_-(\theta)^{-1})^{-1} \\ &= \left(\beta_+ + \frac{1}{2c^2} (-ice^{-\theta}\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + z) \right) (D_{\infty,0}(\theta) - z - \frac{z^2}{2c^2})^{-1} \\ &\quad \times \left(1 - \gamma V(\theta)\beta_+K_{c,0}(\theta) - \frac{\gamma}{2c^2}V(\theta)(-ice^{-\theta}\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + z)K_{c,0}(\theta) \right)^{-1}. \end{aligned}$$

Mit $z \in M \setminus \mathbb{R}$ gilt auch $z + z^2/(2c) \in M \setminus \mathbb{R}$, also insbesondere auch $z(1 + \frac{z}{2c^2}) \notin \sigma(D_{\infty,\gamma}(\theta))$, was (III.69) zeigt. Außerdem gilt $K_{c,\gamma}(\theta) = K_{c,0}(\theta) - \gamma V(\theta)\beta_+ = (\mathbf{1} - \gamma V(\theta)\beta_+K_{c,0}(\theta)^{-1})K_{c,0}(\theta)$, wobei man beachte, dass aus $z + c^2 \notin \sigma(D_{c,\gamma}(\theta))$ folgt $z + c^2 \notin \sigma(D_{c,0}(\theta))$ und daraus wiederum $z(1 + \frac{z}{2c^2}) \notin \sigma(D_{\infty,0}(\theta))$, d.h. $K_{c,0}(\theta)$ ist stetig invertierbar. Folglich hat der beschränkte Operator $\mathbf{1} - \gamma V(\theta)\beta_+K_{c,0}(\theta)^{-1}$ eine stetige Inverse, und es gilt

$$(III.72) \quad K_{c,\gamma}(\theta)^{-1} = K_{c,0}(\theta)^{-1} (\mathbf{1} - \gamma V(\theta)\beta_+K_{c,0}(\theta)^{-1})^{-1}$$

sowie

$$(III.73) \quad \begin{aligned} &\left(1 - \gamma V(\theta)\beta_+K_{c,0}(\theta) - \frac{\gamma}{2c^2}V(\theta)(-ice^{-\theta}\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + z)K_{c,0}(\theta) \right)^{-1} \\ &= (\mathbf{1} - \gamma V(\theta)K_{c,0}(\theta)^{-1}\beta_+)^{-1} \\ &\quad \times \left(\mathbf{1} - \frac{\gamma}{2c^2}V(\theta)(-ice^{-\theta}\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + z)K_{c,0}(\theta)(\mathbf{1} - \gamma V(\theta)K_{c,0}(\theta)^{-1}\beta_+)^{-1} \right)^{-1}. \end{aligned}$$

Mit (III.72) und (III.73) folgt (III.68) aus (III.71). \square

Wir wählen nun ein η wie in Kapitel III.2.5 und definieren für jedes $\tilde{\epsilon} > 0$ die Menge

$$M_{\eta, \tilde{\epsilon}} := \{z \in \mathbb{C} \mid 1 \leq \operatorname{Re} z \leq -(\eta + \tilde{\epsilon}), \quad |\operatorname{Im} z| \leq 1, \quad \operatorname{dist}(z, \sigma(D_{c, \gamma}(\theta))) \geq \tilde{\epsilon}\}.$$

Ferner setzen wir $D(w, r) := \{z \in \mathbb{C} \mid |z - w| < r\}$ für $w \in \mathbb{C}$ und $r > 0$. Wir fixieren im Folgenden ein festes $\tilde{\epsilon} > 0$ so klein, dass für alle $n, n' \in \mathbb{N}$ mit $n \neq n'$ und $1 \leq n, n' \leq \tilde{n}$ die Mengen $D(E_n(\infty, \gamma), 2\tilde{\epsilon})$ und $D(E_{n'}(\infty, \gamma), 2\tilde{\epsilon})$ disjunkt und in der Menge $\{z \in \mathbb{C} \mid 1 \leq \operatorname{Re} z \leq -(\eta + \tilde{\epsilon}), \quad |\operatorname{Im} z| \leq 1\}$ enthalten sind.

Damit können wir nun [141, Corollary 6.5] für dilatierete Operatoren verallgemeinern.

KOROLLAR III.17. *Es sei $|\theta| < \theta_0$, wobei θ_0 in Anhang B definiert ist, und $\theta \in S_{\pi/4}$ sowie $\frac{2\gamma}{c}C(\operatorname{Im} \theta) < 1$. Dann gilt für alle $z \in M_{\eta, \tilde{\epsilon}}$ und hinreichend großen c die Reihenentwicklung*

$$(III.74) \quad [D_{c, \gamma}(\theta) - (c^2 + z)]^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{c^n} R_n(z).$$

Die Reihe konvergiert in Norm gleichmäßig in θ und z . Insbesondere gilt

$$[D_{c, \gamma}(\theta) - (c^2 + z)]^{-1} \xrightarrow{c \rightarrow \infty} [D_{\infty, \gamma}(\theta) - z]^{-1} \beta_+$$

gleichmäßig in θ und z .

BEWEIS. Wir benötigen zunächst eine Abschätzung an die Resolvente von $D_{\infty, \gamma}(\theta)$. Wir teilen die Resolvente gemäß

$$(III.75) \quad [D_{\infty, \gamma}(\theta) - z]^{-1} = [D_{\infty, \gamma}(\theta)|_{\operatorname{Ran} \bar{P}_{\operatorname{disc}(\infty, \gamma; \theta)} - z}]^{-1} \bar{P}_{\operatorname{disc}(\infty, \gamma; \theta)} \\ + \sum_{n=1}^{\tilde{n}} [D_{\infty, \gamma}(\theta)|_{\operatorname{Ran} P_n(\infty, \gamma; \theta) - z}]^{-1} P_n(\infty, \gamma; \theta)$$

auf. Wegen Satz B.3 ist die Norm des ersten Summanden in (III.75) beschränkt durch $2/\eta$. Die Normen der anderen Summanden lassen sich wegen Korollar B.2 gemäß

$$\| [D_{\infty, \gamma}(\theta)|_{\operatorname{Ran} P_n(\infty, \gamma; \theta) - z}]^{-1} P_n(\infty, \gamma; \theta) \| \leq \frac{\|P_n(\infty, \gamma; \theta)\|}{\operatorname{dist}(z, E_n(\gamma))} \leq \frac{C|\theta|}{\operatorname{dist}(z, E_n(\gamma))}$$

abschätzen. Folglich gilt für hinreichend kleine $1/c$ (abhängig von $\tilde{\epsilon}$) und alle $z \in M_{\eta, \tilde{\epsilon}}$ die Entwicklung

$$\left(\mathbf{1} - \frac{z^2}{2c^2} (D_{\infty, \gamma}(\theta) - z)^{-1} \right)^{-1} = (D_{\infty, \gamma}(\theta) - z)^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{z^2}{2c^2} (D_{\infty, \gamma}(\theta) - z)^{-1} \right)^n.$$

Aus der Hardy-Ungleichung erhalten wir für $f \in H^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ die Abschätzungen $\|Vf\| \leq 2\|\nabla f\| \leq a\|\Delta f\| + (1/a)\|f\|$ und $e^{-2\operatorname{Re} \theta} \|\Delta f\| \leq 1/(1 - 2a\gamma) \|D_{\infty, \gamma}(\theta)f\| + 2\gamma/[a(1 - 2a\gamma)] \|f\|$ mit einem hinreichend kleinen $a > 0$. Folglich gilt

$$\left\| \frac{\gamma}{2c^2} V(\theta) (-ice^{-\theta} \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + z) (D_{\infty, \gamma}(\theta) - z)^{-1} \right\| \leq \\ \leq \frac{\gamma}{c} [C_1 + C_2 \| (D_{\infty, \gamma}(\theta) - z)^{-1} \|]$$

mit $C_1, C_2 > 0$ (unabhängig von γ, c und θ), woraus folgt, dass sich auch der letzte Faktor in (III.68) für $1/c$ klein genug in eine Norm-konvergente Reihe in $1/c$ entwickeln lässt. \square

BEMERKUNG III.18. Wie in [141] finden wir

$$R_0(z) := \beta_+ R_{\infty, \gamma; \theta}(z).$$

Da $\frac{-ice^{-\theta} \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla}{2}$ der einzige ungerade Operator (d.h. mit $\boldsymbol{\alpha}$ antikommutierende Operator) in (III.68) ist und auch der einzige Operator der $1/c$ als Vorfaktor hat, und außerdem alle anderen Operatoren in (III.68) entweder einen Vorfaktor $1/c^2$ oder aber einen in c konstanten Vorfaktor haben, folgt, dass in (III.74) die Operatoren zu geraden Potenzen von $1/c$ gerade und die Operatoren zu ungeraden Potenzen von $1/c$ ungerade sind (siehe [141, Bemerkung nach Corollary 6.5]).

Wir wählen nun für ein $\tilde{\epsilon} > 0$ eine positiv orientierte Kontour Γ , so dass Γ in $M_{\eta, \tilde{\epsilon}}$ liegt und nur den Eigenwert $E_n(\gamma)$, jedoch keine anderen Elemente von $\sigma(D_{\infty, \gamma}(\theta))$ im Innern enthält. Dann setzen wir

$$P_n(\infty, \gamma; \theta) := -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} dz R_{\infty, \gamma; \theta}(z) \beta_+.$$

LEMMA III.19. *Unter den Voraussetzungen von Korollar III.17 gibt es eine Konstante $C_{P, n} > 0$ (unabhängig von c und θ), so dass für hinreichend große c*

$$\|P_n(c, \gamma; \theta) - P_n(\infty, \gamma; \theta)\| \leq \frac{C_{P, n}}{c}$$

gilt.

BEWEIS. Dies folgt unmittelbar aus Korollar III.17. \square

Damit können wir nun in den beiden folgenden Korollaren Satz III.15 erweitern. Satz III.15 und Korollar III.21 sind ein gewisser Ersatz für die bei nicht-selbstadjungierten Operatoren fehlende Möglichkeit, die Norm der Resolvente durch den inversen Abstand vom Spektrum nach oben abschätzen zu können.

KOROLLAR III.20. *Unter den Voraussetzungen von Korollar III.17 gibt es eine Konstante $C > 0$ (eventuell abhängig von θ), so dass für alle $z \in \mathbb{C}$ mit $-1 \leq \operatorname{Re} z \leq -\eta$ und $|\operatorname{Im} z| \leq 1$ und alle hinreichend großen c die Abschätzung*

$$\|[D_{c, \gamma}(\theta)|_{\operatorname{Ran} \bar{P}_{\operatorname{disc}, \bar{n}}(c, \gamma; \theta)} - (c^2 + z)]^{-1} \bar{P}_{\operatorname{disc}, \bar{n}}(c, \gamma; \theta)\| \leq C$$

gilt.

BEWEIS. Wegen Korollar III.17 ist $[D_{c, \gamma}(\theta)|_{\operatorname{Ran} \bar{P}_{\operatorname{disc}, \bar{n}}(c, \gamma; \theta)} - (c^2 + z)]^{-1}$ gleichmäßig in $z \in M_{\eta, \tilde{\epsilon}}$ und c (für hinreichend große c) beschränkt. Aus Lemma III.19 und Lemma III.11 folgt die Existenz einer von c unabhängigen Schranke an

$$\|\bar{P}_{\operatorname{disc}, \bar{n}}(c, \gamma; \theta)\| = \|\mathbf{1} - (\Lambda_{c, \gamma}^{(-)}(\theta) + P_{\operatorname{disc}, \bar{n}}(c, \gamma; \theta))\|.$$

Daher ist die Behauptung für $z \in M_{\eta, \tilde{\epsilon}}$ wahr.

Sei also $z_0 \in D(E_n(\infty, \gamma), \tilde{\epsilon})$. Dann gilt $\Gamma := \{z \in \mathbb{C} \mid |z - E_n(\infty, \gamma)| = 2\tilde{\epsilon}\} \subset M_{\eta, \tilde{\epsilon}}$ wegen der Definition der Menge $M_{\eta, \tilde{\epsilon}}$. Da $[D_{c, \gamma}(\theta)|_{\operatorname{Ran} \bar{P}_{\operatorname{disc}, \bar{n}}(c, \gamma; \theta)} - (c^2 + z)]^{-1}$ in $z \in$

$\{z \in \mathbb{C} \mid -1 \leq \operatorname{Re} z \leq -\eta, |\operatorname{Im} z| \leq 1\}$ holomorph ist, gilt

$$\begin{aligned} [D_{c,\gamma}(\theta)|_{\operatorname{Ran} \bar{P}_{\operatorname{disc},\bar{n}}(c,\gamma;\theta)} - (c^2 + z_0)]^{-1} \bar{P}_{\operatorname{disc},\bar{n}}(c,\gamma;\theta) &= -\frac{1}{2\pi i} \\ &\times \int_{\Gamma} [D_{c,\gamma}(\theta)|_{\operatorname{Ran} \bar{P}_{\operatorname{disc},\bar{n}}(c,\gamma;\theta)} - (c^2 + z)]^{-1} \bar{P}_{\operatorname{disc},\bar{n}}(c,\gamma;\theta) \frac{1}{z - z_0} dz, \end{aligned}$$

wobei die Kontour im mathematisch positiven Sinn durchlaufen wird. Hieraus folgt jedoch die Behauptung auch für $z_0 \in D(E_n(\infty, \gamma), \tilde{\epsilon})$. \square

KOROLLAR III.21. *Unter den Voraussetzungen von Satz III.15 und Korollar III.17 gilt: Es gibt ein $C > 0$ (eventuell abhängig von θ), so dass für alle $z \in \mathbb{C}$ mit $-\infty < \operatorname{Re} z \leq -\eta$ und $|\operatorname{Im} z| \leq 1$ und alle hinreichend großen c die Abschätzung*

$$\|[D_{c,\gamma}(\theta)|_{\operatorname{Ran} \bar{P}_{\operatorname{disc},\bar{n}}(c,\gamma;\theta)} - (c^2 + z)]^{-1} \bar{P}_{\operatorname{disc},\bar{n}}(c,\gamma;\theta)\| \leq \frac{C}{-\eta - \operatorname{Re} z}$$

gilt.

BEWEIS. Dies folgt sofort aus Korollar III.20 und aus Satz III.15 in Verbindung mit Lemma III.19. \square

Wir definieren nun eine Transformationsfunktion $\mathcal{U}_{\operatorname{NR}}(c, \gamma; \theta) : L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ durch

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{\operatorname{NR}}(c, \gamma; \theta) &:= \\ &= [P_n(c, \gamma; \theta)P_n(\infty, \gamma; \theta) + (\mathbf{1} - P_n(c, \gamma; \theta))(\mathbf{1} - P_n(\infty, \gamma; \theta))] \\ &\quad \times [\mathbf{1} - (P_n(c, \gamma; \theta) - P_n(\infty, \gamma; \theta))^2]^{-1/2}. \end{aligned}$$

LEMMA III.22. *Es gelten die Voraussetzungen von Korollar III.17 sowie die Ungleichung $C_{\operatorname{P},n}/c < q < 1$ für ein $0 < q < 1$. Dann ist die Abbildung $\mathcal{U}_{\operatorname{NR}}(c, \gamma; \theta)$ beschränkt mit beschränkter Inverser $\mathcal{V}_{\operatorname{NR}}(c, \gamma; \theta)$. Es gilt*

$$(III.76) \quad \mathcal{U}_{\operatorname{NR}}(c, \gamma; \theta)P_l(\infty, \gamma; \theta)\mathcal{U}_{\operatorname{NR}}(c, \gamma; \theta)^{-1} = P_l(c, \gamma; \theta)$$

und

$$(III.77) \quad \|\mathcal{U}_{\operatorname{NR}}(c, \gamma; \theta) - \mathbf{1}\| \leq \frac{C_{\operatorname{NRP}}}{c}$$

mit einer Konstanten $C_{\operatorname{NRP}} > 0$ unabhängig von c und θ . $\mathcal{U}_{\operatorname{NR}}(c, \gamma; \theta)$ hängt holomorph von θ ab.

BEWEIS. Unter Verwendung von Lemma III.19 folgt dies genauso wie Satz III.13. Für die holomorphe Abhängigkeit von θ beachte man, dass die Potenzreihen (in $1/c$) für $R_{c,\gamma;\theta}(z)$, $P_n(c, \gamma; \theta)$ und $\mathcal{U}_{\operatorname{NR}}(c, \gamma; \theta)$ gleichmäßig in θ konvergieren. \square

BEMERKUNG III.23. Aus der Reihendarstellung

$$(1 - A)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} \binom{1/2}{n} A^n$$

für beschränkte Operatoren A mit Norm $\|A\| < 1$ folgt aus Bemerkung III.18, dass in der Reihenentwicklung für $\mathcal{U}_{\operatorname{NR}}(c, \gamma; \theta)$ die Operatoren zu geraden Potenzen von

$1/c$ gerade Operatoren, die Operatoren zu ungeraden Potenzen von $1/c$ ungerade Operatoren sind. Insbesondere haben wir die Darstellung

$$(III.78) \quad \mathcal{U}_{\text{NR}}(c, \gamma; \theta) = \mathcal{U}_{\text{NR},g}(c, \gamma; \theta) + \frac{1}{c} \mathcal{U}_{\text{NR},ug}(c, \gamma; \theta),$$

wobei $\mathcal{U}_{\text{NR},g}(c, \gamma; \theta)$ und $\mathcal{U}_{\text{NR},ug}(c, \gamma; \theta)$ in $1/c$ holomorphe gerade bzw. ungerade Operatoren sind.

Der folgende Satz verallgemeinert [141, Theorem 6.7] und zeigt, dass die untere Komponente eines Eigenspinors des Dirac-Operators für große $c \rightarrow \infty$ gegen null konvergiert.

SATZ III.24. *Unter den Voraussetzungen von Lemma III.22 gilt: Die normierten Eigenfunktionen $\phi_n(c, \gamma; \theta)$ von $D_{c,\gamma}(\theta)$ zum Eigenwert $E_{n,l}(c, \gamma)$ sind von der Form*

$$(III.79) \quad \phi_{n,l}(c, \gamma; \theta) = \phi_{n,l,+}(c, \gamma; \theta) + \frac{1}{c} \phi_{n,l,-}(c, \gamma; \theta),$$

$$\phi_{n,l,\pm}(c, \gamma; \theta) \in \beta_{\pm} L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4),$$

wobei die Funktionen $\phi_{n,l,\pm}(c, \gamma; \theta)$ stetig von $1/c$ abhängen.

BEWEIS. Es gilt

$$P_n(c, \gamma; \theta) D_{c,\gamma}(\theta) P_n(c, \gamma; \theta) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{z}{D_{c,\gamma}(\theta) - z} dz.$$

Jeder Eigenvektor $\tilde{\phi}_n(c, \gamma; \theta)$ von $P_n(c, \gamma; \theta) D_{c,\gamma}(\theta) P_n(c, \gamma; \theta)$ und somit jeder Eigenvektor von $D_{c,\gamma}(\theta)$ zu einem Eigenwert $E_{n,l}(c, \gamma)$ ist gegeben durch

$$\tilde{\phi}_{n,l}(c, \gamma; \theta) = \mathcal{U}_{\text{NR}}(c, \gamma; \theta) \phi_{n,l}(\infty, \gamma; \theta)$$

für ein $\phi_{n,l}(\infty, \gamma; \theta) \in \beta_+ L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$. Somit folgt aus Bemerkung III.23 und der analytischen Störungstheorie

$$\tilde{\phi}_{n,l}(c, \gamma; \theta) = \tilde{\phi}_{n,l,+}(c, \gamma; \theta) + \frac{1}{c} \phi_{n,l,-}(c, \gamma; \theta),$$

wobei die Funktionen $\tilde{\phi}_{n,l}(c, \gamma; \theta)$ und $\tilde{\phi}_{n,l,\pm}(c, \gamma; \theta)$ holomorph von $1/c$ abhängen. Da die Projektionen $P_n(c, \gamma; \theta)$ nicht orthogonal sind, werden die normierten Eigenfunktionen im Allgemeinen nicht holomorph von $1/c$ abhängen. Jedoch gilt dennoch $\|\tilde{\phi}_{n,l}(c, \gamma; \theta)\| \geq 1 - C \frac{1}{c}$ für ein $C > 0$ und somit (III.79). \square

Diese Aussagen werden nun verwendet, um Aussagen über die Konvergenz und Beschränktheit von Eigenfunktionen in der Norm von $H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ zu beweisen.

SATZ III.25. *Unter den Voraussetzungen von Lemma III.22 gilt: Es gibt eine Konstante $C_{\text{EF}} > 0$, unabhängig von c , so dass die normierten Eigenfunktionen $\phi_n(c, \gamma; \theta)$ von $D_{c,\gamma}(\theta)$ zum Eigenwert $E_{n,l}(c, \gamma)$ für hinreichend große c die Abschätzungen*

$$(III.80) \quad \|\nabla \phi_{n,l,+}(c, \gamma; \theta)\| \leq C_{\text{EF}}$$

und

$$(III.81) \quad \|\nabla \phi_{n,l,-}(c, \gamma; \theta)\| \leq \frac{C_{\text{EF}}}{c}$$

erfüllen.

BEWEIS. Wir folgen Esteban und Séré [47, Beweis von Lemma 7 und Theorem 3], die den nicht-relativistischen Grenzfall von selbstadjungierten Dirac-Fock-Operatoren betrachtet haben.

Da $D_{c,\gamma}(\theta)$ nicht selbstadjungiert ist, haben wir einige zusätzliche Schwierigkeiten zu überwinden. Zur Vereinfachung der Notation unterdrücken wir die Abhängigkeit der Funktionen $\phi_{n,l}(c, \gamma; \theta)$ von c, γ und θ .

Es gilt

$$\begin{aligned} E_{n,l}(c, \gamma)^2 \|\phi_{n,l}\|^2 &= \|D_{c,\gamma}(\theta)\phi_{n,l}\|^2 \\ &\geq \|D_{c,0}(\theta)\phi_{n,l}\|^2 - 2\operatorname{Re} \gamma e^{-\theta} (D_{c,0}(\theta)\phi_{n,l}, V\phi_{n,l}) \\ &= c^2 e^{-2\operatorname{Re}\theta} \|\nabla\phi_{n,l}\|^2 + c^4 \|\phi_{n,l}\|^2 + 2ic^3 e^{-\operatorname{Re}\theta} \sin \operatorname{Im} \theta (-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla\phi_{n,l}, \beta\phi_{n,l}) \\ &\quad - 2c\gamma \operatorname{Re} (-ie^{-\theta} \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla\phi_{n,l}, e^{-\theta} V\phi_{n,l}) - 2c^2 \gamma \operatorname{Re} (\beta\phi_{n,l}, e^{-\theta} V\phi_{n,l}) \\ &\geq e^{-2\operatorname{Re}\theta} [c^2(1 - 2\sin \operatorname{Im} \theta - \gamma/4) - 4c\gamma] \|\nabla\phi_{n,l}\|^2 \\ &\quad + [c^4(1 - 2\sin \operatorname{Im} \theta) - 16\gamma c^2] \|\phi_{n,l}\|^2. \end{aligned}$$

Wir haben dabei die Hardy-Ungleichung verwendet. Es folgt wegen $E_{n,l}(c, \gamma)^2 - c^4 \leq 0$ für genügend große c

$$(III.82) \quad \|\nabla\phi_{n,l}\|^2 \leq \frac{E_{n,l}(c, \gamma)^2 - c^4 + 2\sin \operatorname{Im} \theta c^2 + 16c^2}{c^2(1 - 2\sin \operatorname{Im} \theta - 1/4) - 4c\gamma} \|\phi_{n,l}\|^2 \leq C(\sin \operatorname{Im} \theta c^2 + 1) \|\phi_{n,l}\|^2,$$

wobei $C > 0$ unabhängig von c ist.

Man beachte, dass für $\operatorname{Im} \theta = 0$ der Term proportional zu c^2 in (III.82) nicht vorhanden ist, woraus man unmittelbar die Beschränktheit von $\|\nabla\phi_{n,l}\|$ folgern könnte. Um diese Schwierigkeit zu umgehen, schreiben wir die Dirac-Gleichung komponentenweise, wobei wir unter Missbrauch der Notation mit $\phi_{n,l,\pm}$ die oberen bzw. unteren Komponenten von $\phi_{n,l}$ bezeichnen:

$$(III.83) \quad ce^{-\theta} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\phi_{n,l,-} - \gamma e^{-\theta} V\phi_{n,l,+} + c^2\phi_{n,l,+} = E_{n,l}(c, \gamma)\phi_{n,l,+}$$

$$(III.84) \quad ce^{-\theta} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\phi_{n,l,+} - \gamma e^{-\theta} V\phi_{n,l,-} - c^2\phi_{n,l,-} = E_{n,l}(c, \gamma)\phi_{n,l,-}$$

Indem wir (III.83) durch c dividieren, die Hardy-Ungleichung verwenden und ausnützen, dass $E_{n,l}(c, \gamma) - c^2$ beschränkt ist, finden wir unter Verwendung von (III.82)

$$(III.85) \quad \|\nabla\phi_{n,l,-}\| \leq \frac{2}{c} \|\nabla\phi_{n,l,+}\| + \frac{|E_{n,l}(c, \gamma) - c^2|}{c|e^{-\operatorname{Re}\theta}|} \|\phi_{n,l,+}\| \leq C$$

für ein $C > 0$ unabhängig von c , d.h. $\|\nabla\phi_{n,l,-}\|$ ist in c beschränkt. Indem wir (III.84) durch c dividieren, erhalten wir mit Satz III.24 und Gleichung (III.85)

$$(III.86) \quad \|\nabla\phi_{n,l,+}\| \leq \frac{2}{c} \|\nabla\phi_{n,l,-}\| + \frac{|E_{n,l}(c, \gamma) + c^2|}{c|e^{-\operatorname{Re}\theta}|} \|\phi_{n,l,-}\| \leq C$$

für ein $C > 0$ unabhängig von c , was (III.80) zeigt. Wenn wir (III.86) in (III.85) einsetzen, folgt (III.81). \square

BEMERKUNG III.26. Für die Beweise der Sätze III.24 und III.25 haben wir im wesentlichen nur die Hardy-Ungleichung verwendet. Die Sätze gelten somit für eine weit größere Klasse von Potentialen und nicht nur für das Coulomb-Potential. Für das Coulomb-Potential kann man die Richtigkeit der Sätze übrigens fast unmittelbar aus der expliziten Form der Eigenfunktionen ablesen (siehe den Beweis von Lemma III.30.)

Wir benötigen außerdem noch eine Schranke an die Norm des Dilatationsoperators $\mathcal{U}(\theta)$, eingeschränkt auf die Räume $\text{Ran } P_n(c, \gamma; \theta)$. Man beachte, dass der nicht auf einen Eigenraum restringierte Operator $\mathcal{U}(\theta)$ *nicht* beschränkt ist.

LEMMA III.27. *Es sei $\theta \in \mathbb{C}$ mit $|\theta| \leq \pi/4$ und es gelten die Voraussetzungen von Lemma III.22. Dann ist $\mathcal{U}(\theta)|_{\text{Ran } P_n(c, \gamma; 0)} : \text{Ran } P_n(c, \gamma; 0) \rightarrow \text{Ran } P_n(c, \gamma; \theta)$ gleichmäßig in c und θ beschränkt.*

BEWEIS. Sicherlich ist $\mathcal{U}(\theta)|_{\text{Ran } P_n(\infty, \gamma; 0)} : \text{Ran } P_n(\infty, \gamma; 0) \rightarrow \text{Ran } P_n(\infty, \gamma; \theta)$ für jedes $\theta \in \mathbb{C}$ mit $|\theta| \leq \pi/4$ wohldefiniert (siehe [2, 14]) und (als Abbildung zwischen endlich-dimensionalen Vektorräumen) beschränkt. Da der Operator ein beschränkter holomorpher Operator ist, hängt er insbesondere stetig von θ ab, folglich gibt es für $|\theta| \leq \pi/4$ eine von θ unabhängige Schranke $C' > 0$ an die Norm.

Es sei $f \in \text{Ran } P_n(c, \gamma; 0)$. Dann gibt es ein $\tilde{f} \in \text{Ran } P_n(\infty, \gamma; 0)$ mit $f = U_{\text{NR}}(c, \gamma; 0)\tilde{f}$, und es gilt für reelle θ

$$f(\theta) := \mathcal{U}_{\text{el}}(\theta)f = \mathcal{U}(\theta)U_{\text{NR}}(c, \gamma; 0)\mathcal{U}(\theta)^{-1}\tilde{f}(\theta) = U_{\text{NR}}(c, \gamma; \theta)\tilde{f}(\theta),$$

wobei $\tilde{f}(\theta) := \mathcal{U}_{\text{el}}(\theta)\tilde{f}$ ist. Durch holomorphe Fortsetzung erhalten wir für komplexe θ die Gleichung

$$f(\theta) = U_{\text{NR}}(c, \gamma; \theta)\tilde{f}(\theta).$$

Folglich gilt wegen Lemma III.22

$$\|f(\theta)\| \leq \|U_{\text{NR}}(c, \gamma; \theta)\| \|\tilde{f}(\theta)\| \leq (1 + C_{\text{NRP}}/c)C' \|\tilde{f}\| \leq (1 + C_{\text{NRP}}/c)C' \|f\|$$

für ein $C' > 0$ unabhängig von c und θ . □

Das folgende Korollar zeigt, dass auch die Projektionen auf die Feinstrukturkomponenten gleichmäßig in c beschränkt sind. Dies folgt im Wesentlichen daraus, dass die dilatierten Projektionen wegen Lemma III.27 ähnlich zu den (selbstadjungierten) nicht-dilatierten Projektionen sind. Die Beschränktheit der Projektionen $P_{n,l}(c, \gamma; \theta)$ in c kann im Allgemeinen nicht aus der Beschränktheit der Projektionen $P_n(c, \gamma; \theta)$ gefolgert werden (siehe [97, Kapitel II-1.5]).

KOROLLAR III.28. *Es sei $1 \leq n \leq \tilde{n}$. Dann gilt unter den Voraussetzungen von Lemma III.27*

$$\|P_{n,l}(c, \gamma; \theta)\| \leq C$$

für ein $C > 0$ unabhängig von n, l, c und θ .

BEWEIS. Da die Projektionen $P_{n,l}(c, \gamma; 0) = \mathcal{U}(\theta)^{-1}P_{n,l}(c, \gamma; 0)\mathcal{U}(\theta)$ orthogonal sind, folgt dies aus Lemma III.28. □

III.3.2. Anwendung auf Erwartungswerte von Dirac-Matrizes. Die obigen Aussagen über den nicht-relativistischen Grenzfall ermöglichen es nun, Aussagen über Erwartungswerte der α -Matrix zu treffen. Da α ein ungerader Operator ist, liefert der Erwartungswert dieser Matrix Skalarprodukte der oberen mit den unteren Komponenten eines Dirac-Spinors. Man erwartet also, dass solche Erwartungswerte für geeignete Zustände für $c \rightarrow \infty$ wie $1/c$ gleichmäßig in diesen Zuständen gegen Null konvergieren. Die folgenden Sätze und Lemmata zeigen, dass dies insbesondere richtig ist, wenn einer der Zustände ein Bindungszustand ist und der andere ein beliebiger Zustand im positiven Spektralraum. Dieses Ergebnis ist jedoch nicht zu erwarten für zwei beliebige Zustände aus dem positiven Spektralraum. Dies kann man unter anderem daran erkennen, dass die freie positive Spektralprojektion nur stark gegen β_+ konvergiert, nicht jedoch in Norm, wovon man sich anhand der expliziten Form der Spektralprojektion in Gleichung (II.4) leicht überzeugen kann.

LEMMA III.29. *Es gelten die Voraussetzungen von Lemma III.27 und es sei \tilde{n} wie in Kapitel III.2.5. Dann gibt es eine Konstante $C > 0$, unabhängig von c und θ , so dass für alle $1 \leq n, n' \leq \tilde{n}$, $1 \leq l \leq n$, $1 \leq l' \leq n'$ und $k_1, k_2 \in \mathbb{R}^3$ die Abschätzung*

$$\|P_{n,l}(c, \gamma; \theta)k_1 \cdot \alpha e^{ik_2 \cdot x} P_{n',l'}(c, \gamma; \theta)\| \leq \frac{C|k_1|}{c}$$

gilt.

BEWEIS. Da α ein ungerader Operator ist, folgt dies aus Satz III.24 und Korollar III.28. \square

LEMMA III.30. *Es sei $c \geq 1$ und $\gamma/c < \sqrt{3}/2$. Dann gibt es eine Konstante $C > 0$, unabhängig von c , so dass*

$$\| |x| P_{n,l}(c, \gamma; 0) \| \leq C$$

erfüllt ist, wobei x den Operator der Multiplikation mit der Ortsvariablen bezeichnet.

BEWEIS. Wir definieren die unitäre Dilatation U_c

$$f_c(x) := (U_c f)(x) := c^{-3/2} f(c^{-1}x)$$

und stellen fest, dass $U_c D_{c,\gamma} U_c^{-1} = c^2 D_{1,\gamma/c}$ gilt. Wenn also $f \in H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ eine normierte Eigenfunktion von $D_{c,\gamma}$ zum Eigenwert $E_{n,l}$ ist, dann ist f_c eine normierte Eigenfunktion von $D_{1,\gamma/c}$ zum Eigenwert $E_{n,l}/c^2$. Die Radialteile $f_{c,\pm}(r)$ der oberen bzw. unteren Komponenten von f_c sind (siehe [104, Abschnitt 36]) gegeben durch

$$f_{c,\pm}(r) := \frac{\pm(2\lambda)^{3/2}}{\Gamma(2\tilde{\gamma} + 1)} \left[\frac{(1 \pm E_{n,l}/c^2) \Gamma(2\tilde{\gamma} + n_r + 1)}{4 \frac{\gamma}{c\lambda} (\frac{\gamma}{c\lambda} - \kappa) n_r!} \right] (2\lambda r)^{\tilde{\gamma}-1} e^{-\lambda r} \\ \times \left\{ \left(\frac{\gamma}{c\lambda} - \kappa \right) F(-n_r, 2\tilde{\gamma} + 1, 2\lambda r) \mp n_r F(1 - n_r, 2\tilde{\gamma} + 1, 2\lambda r) \right\}.$$

Hierbei ist die radiale Quantenzahl $n_r \in \mathbb{N}_0$ falls $\kappa < 0$ und $n_r \in \mathbb{N}$ falls $\kappa > 0$. Dabei ist $\kappa \in \pm\mathbb{N}$ der Eigenwert des Spin-Bahn-Operators (siehe [141, Kapitel 4.6]), wobei F die konfluente hypergeometrische Funktion bezeichnet, die hier lediglich ein Polynom in $2\lambda r$ ist (siehe [104, Abschnitt 36] und [103, Abschnitt d]). Ferner gilt

$\tilde{\gamma} := \sqrt{\kappa^2 - \gamma^2/c^2}$ und $\lambda := \sqrt{1 - E_{n,l}^2/c^4}$. Folglich sind die Radialteile $f_{\pm}(r)$ der oberen bzw. unteren Komponenten von f gegeben durch

$$f_{\pm}(r) := \frac{\pm(2c\lambda)^{3/2}}{\Gamma(2\tilde{\gamma} + 1)} \left[\frac{(1 \pm E_{n,l}/c^2)\Gamma(2\tilde{\gamma} + n_r + 1)}{4\frac{\gamma}{c\lambda}(\frac{\gamma}{c\lambda} - \kappa)n_r!} \right] (2\lambda r)^{\tilde{\gamma}-1} e^{-c\lambda r} \\ \times \left\{ \left(\frac{\gamma}{c\lambda} - \kappa \right) F(-n_r, 2\tilde{\gamma} + 1, 2c\lambda r) \mp n_r F(1 - n_r, 2\tilde{\gamma} + 1, 2c\lambda r) \right\}.$$

Mittels der expliziten Formel (II.5) für die Eigenwerte sehen wir, dass $c\lambda$ eine in c beschränkte Funktion ist mit $c\lambda \rightarrow \gamma/n$ für $c \rightarrow \infty$. Ferner gilt offensichtlich $\tilde{\gamma} \rightarrow |\kappa|$. Dies zeigt die Behauptung. \square

LEMMA III.31. *Es gelten die Voraussetzungen von Lemma III.27 und es sei \tilde{n} wie in Kapitel III.2.5. Ferner sei $f : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ mit $|f(z)| \leq |z|$. Dann gibt es eine Konstante $C > 0$, unabhängig von c , so dass für alle $1 \leq n \leq \tilde{n}$, $1 \leq l \leq n$ und $k_1, k_2 \in \mathbb{R}^3$ die Abschätzung*

$$\|P_{n,l}(c, \gamma; 0)k_1 \cdot \alpha f(k_2 \cdot x)P_{n,l}(c, \gamma; 0)\| \leq \frac{C|k_1||k_2|}{c}$$

gilt.

BEWEIS. Wegen Lemma III.30 ist $\|xP_{n,l}(c, \gamma; 0)\|$ gleichmäßig in c beschränkt, also insbesondere (mit den Bezeichnungen von Satz III.24) $x\phi_{n,l,+}(c, \gamma; 0)$. Damit folgt die Behauptung genau wie in Lemma III.29. \square

Der folgende Satz zeigt, dass die Aussage von Lemma III.29 auch richtig ist, wenn man eine der beiden Projektionen durch die Projektion auf den gesamten positiven Spektralraum ersetzt. Diese Verallgemeinerung ist nicht offensichtlich, da nicht einmal die untere Komponente der freien positiven Spektralprojektion in Norm wie $1/c$ gegen null geht. Daher benötigen wir im Beweis zusätzlich, dass die H^1 -Norm der oberen Komponente von normierten Bindungszuständen gleichmäßig in c beschränkt ist (Satz III.25).

SATZ III.32. *Es gelten die Voraussetzungen von Lemma III.27 und es sei \tilde{n} wie in Kapitel III.2.5. Dann gibt es eine Konstante $C > 0$, unabhängig von c und θ , so dass für alle $1 \leq n \leq \tilde{n}$, $1 \leq l \leq n$ und $k_1, k_2 \in \mathbb{R}^3$ die Abschätzung*

$$\|P_{n,l}(c, \gamma; \theta)k_1 \cdot \alpha e^{ik_2 \cdot x} \Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)\| \leq \frac{C|k_1|(1 + |k_2|)}{c}$$

gilt.

BEWEIS. Wegen Korollar III.9 und Korollar III.28 gilt

$$\|P_{n,l}(c, \gamma; \theta)k_1 \cdot \alpha e^{ik_2 \cdot x} \Lambda_{c,\gamma}^{(\pm)}(\theta)\| \leq \|P_{n,l}(c, \gamma; \theta)k_1 \cdot \alpha e^{ik_2 \cdot x} \Lambda_{c,0}^{(\pm)}(\theta)\| + C_{\text{NR}}|k_1|\frac{\gamma}{c}$$

mit einem $C > 0$ unabhängig von θ und c . Es reicht also

$$\|P_{n,l}(c, \gamma; \theta)k \cdot \alpha e^{ik_2 \cdot x} \Lambda_{c,0}^{(\pm)}(\theta)\| \leq \frac{C|k_1|(1 + |k_2|)}{c}$$

für ein $C > 0$ zu zeigen. Wir wählen dazu zunächst $f \in \text{Ran } P_{n,l}(c, \gamma; \bar{\theta})$ und $g \in \text{Ran } \Lambda_{c,0}^{(\pm)}(\theta)$ normiert, aber sonst beliebig. Es gilt $g = V_{\text{FW}}(c; \theta)(\tilde{g}, 0)^T$ für ein $\tilde{g} \in$

$L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2)$. Es folgt

$$g = \mathcal{F}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{c^2 + E_c(p; \theta)}{N_c(p; \theta)} \mathcal{F} \tilde{g} \\ \frac{ce^{-\theta} \boldsymbol{\sigma} \cdot p}{N_c(p; \theta)} \mathcal{F} \tilde{g} \end{pmatrix},$$

wobei wir hier mit \mathcal{F} sowohl die Fouriertransformation auf $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2)$ als auch auf $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ bezeichnen. Entsprechend gilt

$$f = (f_+, f_-)^T$$

mit $f_{\pm} \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^2)$. Es folgt

$$\begin{aligned} & |(f, P_{n,l}(c, \gamma; \theta) k_1 \boldsymbol{\alpha} e^{ik_2 \cdot x} \Lambda_{c,0}^{(\pm)}(\theta) g)| \\ & \leq |(f_+, k_1 \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathcal{F}^{-1} \frac{-ce^{-\theta} \boldsymbol{\sigma} \cdot p}{N_c(p; \theta)} \mathcal{F} \tilde{g})| + |k_1| \|f_-\| \|\tilde{g}\| \sup_{p \in \mathbb{R}^3} \left| \frac{c^2 + E_c(p; \theta)}{N_c(p; \theta)} \right|. \end{aligned}$$

Mit ähnlichen Überlegungen wie im Beweis von Satz III.1 sieht man, dass das Supremum $\sup_{p \in \mathbb{R}^3} \left| \frac{c^2 + E_c(p; \theta)}{N_c(p; \theta)} \right|$ unabhängig von c und θ beschränkt ist. Somit erhalten wir aus Satz III.24 die Behauptung für den zweiten Summanden.

Für den ersten Summanden beobachten wir $\sup_{p \in \mathbb{R}^3} \left| \frac{ce^{-\theta}}{N_c(p; \theta)} \right| \leq e^{\pi/4}/c$ und erhalten

$$\begin{aligned} & |(f_+, k_1 \cdot \boldsymbol{\sigma} e^{ik_2 \cdot x} \mathcal{F} \frac{-ce^{-\theta} \boldsymbol{\sigma} \cdot p}{N_c(p; \theta)} \mathcal{F}^{-1} \tilde{g})| \\ & = |(\boldsymbol{\sigma} \cdot (-i \nabla) k_1 \cdot \boldsymbol{\sigma} e^{-ik_2 \cdot x} f_+, \mathcal{F} \frac{-ce^{-\theta}}{N_c(p; \theta)} \mathcal{F}^{-1} \tilde{g})| \leq \frac{|k_1| e^{\pi/4}}{c} \|\nabla e^{ik_2 \cdot x} f_+\| \|\tilde{g}\|. \end{aligned}$$

Wegen Satz III.1 gilt $\|\tilde{g}\| \leq \sqrt{1 + C_{\text{FW}} |\text{Im } \theta|} \|g\|$, woraus wegen Satz III.24 und Satz III.25 die Abschätzung

$$(III.87) \quad |(f, P_{n,l}(c, \gamma; \theta) k_1 \boldsymbol{\alpha} e^{ik_2 \cdot x} \Lambda_{c,0}^{(\pm)}(\theta) g)| \leq C \|f\| \|g\|$$

folgt mit einem $C > 0$.

Wir wählen nun $f, g \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ beliebig und wenden (III.87) auf die Funktionen $P_{n,l}(c, \gamma; \bar{\theta}) f$ und $\Lambda_{c,0}^{(\pm)}(\theta) g$ an. Daraus folgt wegen Korollar III.28 sowie Lemma III.11 die Behauptung. \square

Teil 2

Das Dirac-Fock-Funktional

KAPITEL IV

Dirac-Fock-Funktional und Minimierer

IV.1. Einleitung

Bach et al. [8] haben gezeigt, dass die Energie des relativistischen Elektronen-Positronen-Feldes (siehe Gleichung (I.1)) in Hartree-Fock-Näherung in Wechselwirkung mit dem Coulomb-Feld eines Atomkerns nicht-negativ ist, wenn man die Quantisierung bezüglich des äußeren Feldes wählt, und dass das Vakuum ein Minimierer ist. Sie zeigten ferner, dass die Quantisierung bezüglich des äußeren Feldes optimal ist in dem Sinne, dass jede andere Wahl der Quantisierung zu einer niedrigeren Grundzustandsenergie führt.

Barbaroux et al. [19] haben die Existenz von Atomen in diesem Modell betrachtet, d.h. sie haben gezeigt, dass das Funktional einen Minimierer hat, der die No-Pair-Dirac-Fock-Gleichungen erfüllt, wenn man den Erwartungswert der Ladung fixiert.

Die Existenz von Lösungen der Dirac-Fock-Gleichungen wurde von Esteban und Séré [48] und Paturel [120] bewiesen. Ferner haben Esteban und Séré [47] den nicht-relativistischen Grenzfall der Dirac-Fock-Gleichungen betrachtet. Sie haben gezeigt, dass gewisse Lösungen der Dirac-Fock-Gleichungen gegen energieminimierende Lösungen der Hartree-Fock-Gleichungen konvergieren, wenn die Lichtgeschwindigkeit gegen unendlich geht. Das erlaubt ihnen, den Begriff der Grundzustandslösungen und Grundzustandsenergie der Dirac-Fock-Gleichungen zu definieren.

Im Sinne von Middleman [115] sollte man die physikalische Grundzustandsenergie durch Maximierung der Grundzustandsenergie (wie z.B. in [19] definiert) über alle erlaubten Einteilchen-Elektronenräume erhalten. Man könnte vermuten, dass ein entsprechender Grundzustand eine Lösung der Dirac-Fock-Gleichungen ist. Ferner sollte eine solche Lösung die Energie unter allen Lösungen der Dirac-Fock-Gleichungen minimieren. Wir nennen diese Vermutung die „Middleman-Vermutung“.

Die Gültigkeit der Middlemanschen Vermutung wurde bereits von Barbaroux et al. [18] diskutiert. Sie bestätigten die Vermutung für den Fall abgeschlossener Schalen und schwacher Elektron-Elektron-Wechselwirkung sowie großer Lichtgeschwindigkeit. Im Falle offener Schalen wurde die Vermutung lediglich von Barbaroux et al. [20] im Falle von Wasserstoff bewiesen. Alle anderen Fälle sind unbekannt.

Eine stärkere Vermutung, die von Barbaroux et al. [18] formuliert wurde, ist: Für das Maximin-Paar (maximierendes Λ und minimierendes γ) ist γ eine orthogonale Projektion auf die ersten N Eigenfunktionen des selbstkonsistenten Dirac-Fock-Operators und Λ ist die Spektralprojektion auf den negativen Spektralraum

dieses Operators. Barbaroux et al. [18] zeigten, dass diese Vermutung im nicht-relativistischen Limes im Falle offener Schalen und für schwache Elektron-Elektron-Wechselwirkung nicht wahr ist, was für $N = 1$ auch unter allgemeineren Voraussetzungen bewiesen werden kann (siehe Barbaroux et al. [20]). Sie bestätigten ihre Vermutung jedoch für abgeschlossene Schalen im nicht-relativistischen Grenzfall und für schwache Elektron-Elektron-Wechselwirkung.

In diesem Kapitel folgen wir Barbaroux et al. [18] und betrachten den Fall schwacher Wechselwirkung zwischen den Elektronen. Ähnlich zu Barbaroux et al. [18, Proposition 8] und Esteban und Séré [47, Theorem 5] zeigen wir die Existenz einer eindeutigen Lösung der Dirac-Fock-Gleichungen mit der Eigenschaft, dass die Eigenwerte zu diesen Lösungen die kleinsten Eigenwerte des entsprechenden Dirac-Fock-Operators sind und der nächste Eigenwert echt größer ist.

Wieder ähnlich zu Barbaroux et al. [18] und zu Esteban und Séré [47, Theorem 6] ermöglicht uns das zu zeigen, dass diese Lösung der Minimierer der Dirac-Fock-Energie über der Menge aller Lösungen der Dirac-Fock-Gleichungen mit nicht-negativen Eigenwerten ist. Wir können jedoch sogar zeigen, dass diese Lösung der Minimierer des Dirac-Fock-Funktional bei Minimierung über *alle* Ladungsdichtematrizes ist (siehe das entsprechende Ergebnis von Barbaroux et al. [18, Proposition 8, Gleichung (15)]), wenn die Quantisierung bezüglich dieser Lösung gewählt wird. Wir lassen also nicht nur Positronen in den Ladungsdichtematrizes zu, sondern benötigen auch die Annahme nicht mehr, dass die außerdiagonalen Terme von γ verschwinden, wie dies bei Barbaroux et al. (Corollary 6) vorausgesetzt wurde. Wir zeigen außerdem, dass der Minimierer eindeutig bestimmt und in einem gewissen Sinne sphärisch symmetrisch ist.

Unsere Methoden sind so direkt, dass wir nicht nur Existenzaussagen erhalten, sondern auch wichtige Eigenschaften der Lösungen beweisen können. Außerdem erhalten wir explizite Abschätzungen an die erlaubten Kopplungskonstanten.

IV.2. Modell und Definitionen

Wir verwenden die Notation von Barbaroux, Farkas, Helffer und Siedentop [19] und folgen der Darstellung in [87]. Insbesondere bezeichnen wir in diesem Kapitel mit dem Zeichen γ eine Ladungsdichtematrix und keine Kopplungskonstante. Wir werden daher für die Kopplungskonstante des Dirac-Operators den Buchstaben g verwenden. Des Weiteren ist in diesem Kapitel die Lichtgeschwindigkeit $c = 1$. Wir werden den Buchstaben c auch anderweitig verwenden.

Wir geben hier einen kurzen Überblick über die Notation aus [19]. Die erforderlichen technischen Hilfsmittel aus dieser Arbeit sowie aus einigen anderen Arbeiten haben wir in Anhang A zusammengefasst.

In diesem Kapitel setzen wir $D_g := D_{1,g}$, d.h.

$$D_g := -i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta - g|\cdot|^{-1}.$$

Physikalisch gilt $g = Z\alpha$, wobei $\alpha \approx 1/137$ die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante ist und Z die Kernladungszahl des Elements.

Wir geben zunächst einige Definitionen aus [19]. Zur Vereinfachung der Notation führen wir die Menge $G := \mathbb{R}^3 \times \{1, 2, 3, 4\}$ und das Maß $dx := d\mathbf{x} \otimes d\mu$ ein, wobei $d\mathbf{x}$ das Lebesgue-Maß auf \mathbb{R}^3 ist und $d\mu$ das Zählmaß auf der Menge $\{1, 2, 3, 4\}$. Wir bezeichnen den Banachraum der Spurklasse-Operatoren auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ mit $\mathfrak{S}^1(\mathcal{H})$ und die zugehörige Norm mit $\|\cdot\|_1$. Ferner setzen wir

$$F := \{\gamma \in \mathfrak{S}^1(\mathcal{H}) \mid \gamma = \gamma^*, D_0\gamma \in \mathfrak{S}^1(\mathcal{H})\}.$$

F ist ein Banachraum mit der Norm $\|\gamma\|_F := \|D_0\gamma\|_1 = \|D_0\|\|\gamma\|_1$. Wegen Lemma A.7 (bzw. Lemma II.2) ist $\|\gamma\|_{F,g} := \|D_g\gamma\|_1$ eine äquivalente Norm für $0 \leq g < \sqrt{3}/2$.

Wir schreiben den Integralkern eines $\gamma \in F$ unter Verwendung seiner Eigenwerte λ_n und Eigenspinoren ξ_n als

$$\gamma(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \xi_n(x) \overline{\xi_n(y)}.$$

Die zu γ gehörende Einteilchen-Dichte ist

$$\rho_\gamma(\mathbf{x}) := \sum_{s=1}^4 \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n |\xi_n(x)|^2$$

und der Operator für das zugehörige elektrische Potential $\phi^{(\gamma)} := \rho_\gamma * |\cdot|^{-1}$. Der entsprechende Austauschoperator $X^{(\gamma)}$ ist durch seinen Integralkern

$$X^{(\gamma)}(x, y) := \gamma(x, y) / |\mathbf{x} - \mathbf{y}|$$

gegeben. Der Operator für die Gesamtwechselwirkung ist

$$W^{(\gamma)} = \phi^{(\gamma)} - X^{(\gamma)}.$$

Das Coulomb-Skalarprodukt ist gegeben durch

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

und das Austausch-Skalarprodukt durch

$$E(\gamma, \gamma') := \frac{1}{2} \int_G dx \int_G dy \frac{\overline{\gamma(x, y)} \gamma'(x, y)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}.$$

Die Energie der Gesamtwechselwirkung ist

$$Q(\gamma, \gamma') := D(\rho_\gamma, \rho_{\gamma'}) - E(\gamma, \gamma').$$

Für $\alpha \geq 0$ und $\gamma \in F$ ist der Dirac-Fock-Operator definiert durch

$$D_{g,\alpha}^{(\gamma)} := D_g + \alpha W^{(\gamma)}.$$

Wir führen einige nützliche Eigenschaften dieser Operatoren in Anhang A.1 auf. Man beachte, dass wir α als kleinen Parameter verwenden werden. Einige der diskutierten Ergebnisse gelten jedoch auch für den physikalischen Wert $\alpha_{\text{phys}} \approx 1/137$.

Für $N \in \mathbb{N}$ und $\delta \in F$ definieren wir

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{S}}_{\partial N}^{(\delta)} &:= \{\gamma \in F \mid -\Lambda_-^{(\delta)} \leq \gamma \leq \Lambda_+^{(\delta)}, \operatorname{tr} \gamma = N\}, \\ \tilde{\mathcal{S}}^{(\delta)} &:= \{\gamma \in F \mid -\Lambda_-^{(\delta)} \leq \gamma \leq \Lambda_+^{(\delta)}\}, \\ \mathcal{S}_N &:= \{\gamma \in F \mid 0 \leq \gamma, \operatorname{tr} \gamma \leq N\}\end{aligned}$$

und das Dirac-Fock-Funktional

$$\mathcal{E}_{g,\alpha}(\gamma) := \operatorname{tr} D_g \gamma + \alpha Q(\gamma, \gamma)$$

wobei $\Lambda_+^{(\delta)} = \chi_{[0,\infty)}(D_{g,\alpha}^{(\delta)})$ die Projektion auf den positiven Spektralraum von $D_{g,\alpha}^{(\delta)}$ ist und $\Lambda_-^{(\delta)} = 1 - \Lambda_+^{(\delta)}$ die Projektion auf den negativen Spektralraum (vgl. die entsprechende Definition für den Fall $\alpha = 0$ in Kapitel II.1).

Außerdem werden wir häufig die Abkürzungen

$$c_{g,\alpha,N} := (b_g - 4\alpha N)^{-1}, \quad \tilde{c}_{g,\alpha,N} := (\pi/4)\alpha N c_{g,\alpha,N}$$

verwenden mit $b_g := \sqrt{1 - g^2}(\sqrt{4g^2 + 9} - 4g)/3$ (siehe auch Lemma A.7). Mit ϵ_j^0 und $\epsilon_j^{(\gamma)}$ ($j = 1, \dots$) bezeichnen wir die Eigenwerte von D_g bzw. $D_{g,\alpha}^{(\gamma)}$ (nach Größe geordnet und im Gegensatz zu Kapitel II.1 *unter Zählung der Vielfachheiten*).

Wir werden Lösungen der Dirac-Fock-Gleichungen betrachten:

DEFINITION IV.1. *Wir bezeichnen die Menge der Lösungen der Dirac-Fock-Gleichungen mit DF, d.h.*

$$\text{DF} := \{\gamma \in F \mid \gamma = \gamma^2, [D_{g,\alpha}^{(\gamma)}, \gamma] = 0, \gamma \Lambda_+^{(\gamma)} = \gamma\}.$$

Für festes g und kleines α finden wir folgende Ergebnisse: Für Atome mit abgeschlossenen Schalen gibt es eine Lösung $\delta \in \text{DF}$, so dass δ die Projektion auf die ersten N positiven Eigenwerte von $D_{g,\alpha}^{(\delta)}$ ist (Satz IV.5). Wir beweisen dieses Ergebnis mit Hilfe des Banachschen Fixpunktsatzes, was als Nebenprodukt sofort die Eindeutigkeit der Lösung liefert. Außerdem beweisen wir, dass der Fixpunkt (Korollar IV.9) und das Energiefunktional $\mathcal{E}_{g,\alpha}$ (Theorem IV.10) in einem gewissen Sinne sphärisch symmetrisch sind und dass der Fixpunkt das Funktional $\mathcal{E}_{g,\alpha}$ auf DF minimiert (Korollar IV.7). Hierbei geht die Eindeutigkeit des Fixpunktes entscheidend ein.

Ferner zeigen wir (Satz IV.13), dass diese Lösung das Funktional $\mathcal{E}_{g,\alpha}$ sogar auf der Menge $\tilde{\mathcal{S}}_{\partial q}^{(\delta)}$ minimiert. Hierfür ist die Einschränkung $\Lambda_+^{(\delta)} \gamma \Lambda_-^{(\delta)} = 0$ nicht erforderlich, eine Tatsache, die in der Diskussion der No-Pair-Hartree-Fock-Theorie in [19] offen geblieben war. Satz IV.13 wurde bereits in [86] bewiesen.

Man beachte, dass sich der Begriff „abgeschlossene Schalen“ hier auf den Coulomb-Dirac-Operator bezieht, d.h. für $N \in \mathbb{N}$ liegt der Fall der abgeschlossenen Schalen vor, wenn $\epsilon_{N+1}^0 > \epsilon_N^0$ gilt. Dabei spielt es keine Rolle, ob es sich um die Lücke zwischen Schalen verschiedener Hauptquantenzahlen handelt oder um die Feinstrukturaufspaltung. Der Fall abgeschlossener Schalen ist also für $N = 2, 8, 10, \dots$ gegeben. Zur Abkürzung bezeichnen wir die Menge aller solchen N mit CS.

IV.3. Das Spektrum von Dirac-Fock-Operatoren

Zum Beweis der Hauptergebnisse müssen wir die Eigenwerte von Dirac-Fock-Operatoren durch die Eigenwerte des Coulomb-Dirac-Operators kontrollieren. Die entsprechenden Abschätzungen werden wir in diesem Abschnitt unter Verwendung des Minimax-Prinzips von Griesemer und Siedentop [70] herleiten, das wir in Anhang A.2 wiedergegeben haben. Wir werden dabei den Coulomb-Dirac-Operator als ungestörten Operator behandeln und den Dirac-Fock-Operator als gestörten Operator. Als Erstes stellen wir sicher, dass die Voraussetzungen des Minimax-Theorems [70, Theorem 3] bzw. Satz A.8 erfüllt sind.

LEMMA IV.2 ([87], Lemma 1). *Es sei $A = D_{g,\alpha}^{(\gamma)}$ mit $0 \leq \gamma \in F$, $\mathfrak{h} = L^2(\mathbb{R}^3)^4$, $\mathfrak{Q} = \mathcal{D}(A)$. Ferner sei $\Lambda_+ := \chi_{(0,\infty)}(D_g)$, $\Lambda_- := \chi_{(-\infty,0)}(D_g)$, $\mathfrak{h}_\pm := \Lambda_\pm \mathfrak{h}$ und $0 \notin \sigma(D_{g,\alpha}^{(\gamma)})$. Dann sind die Voraussetzungen von Satz A.8 erfüllt, wenn $(\pi/2)\alpha\|\gamma\|_1 \leq b_g$ gilt.*

BEWEIS. Es sei $f \in \mathfrak{Q}_-$. Dann gilt

$$\begin{aligned} (f, D_{g,\alpha}^{(\gamma)} f) &= (f, D_g f) + \alpha(f, W^{(\gamma)} f) \leq (f, D_g f) + \alpha(f, \phi^{(\gamma)} f) \\ &\leq (f, D_g f) + \frac{\pi}{2} \alpha \|\gamma\|_1 (f, |\nabla| f) \leq (f, D_g f) + \frac{\pi}{2} \alpha \|\gamma\|_1 \frac{1}{b_g} (f, |D_g| f) \leq 0, \end{aligned}$$

wobei wir die Lemmata A.3 und A.7 sowie Formel (A.2) benützt haben. Die Bedingung

$$(f, D_{g,\alpha}^{(\gamma)} f) > 0$$

für alle $f \in \mathfrak{Q}(A) \cap \mathcal{H}_+$ ist trivialerweise erfüllt wegen $W^{(\gamma)} \geq 0$ (Lemma A.3). Es bleibt die Beschränktheit von $(|D_{g,\alpha}^{(\gamma)}| + 1)^{\frac{1}{2}} P_- \Lambda_+$ zu zeigen. Dazu gehen wir wie folgt vor: Wie in [69, Lemma 1] gilt

$$P_- \Lambda_+ = -\frac{\alpha}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (D_{g,\alpha}^{(\gamma)} - i\eta)^{-1} W^{(\gamma)} (D_g - i\eta)^{-1} d\eta \Lambda_+,$$

d.h. wir müssen den Ausdruck

$$\int_{-\infty}^{\infty} (|D_{g,\alpha}^{(\gamma)}| + 1)^{\frac{1}{2}} (D_{g,\alpha}^{(\gamma)} - i\eta)^{-1} W^{(\gamma)} (D_g - i\eta)^{-1} d\eta$$

abschätzen. Nun gilt $\|(D_g - i\eta)^{-1}\| \leq [(\epsilon_1^0)^2 + \eta^2]^{-1/2}$. Ferner betrachten wir die Funktion

$$[\lambda_0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}, f_\eta(\lambda) := \sqrt{(\lambda + 1)/(\lambda^2 + \eta^2)},$$

wobei nach Annahme $\lambda_0 := \inf \sigma(|D_{g,\alpha}^{(\gamma)}|) > 0$ gilt. Diese Funktion nimmt ihr Maximum beim Punkt $\max\{\lambda_0, -1 + \sqrt{1 + \eta^2}\}$ an, d.h. es gilt

$$\sup_{\lambda} f_\eta(\lambda) = \begin{cases} \sqrt{(\lambda_0 + 1)/(\lambda_0^2 + \eta^2)} & |\eta| \leq \sqrt{(\lambda_0 + 1)^2 - 1} \\ \sqrt{\frac{(-1 + \sqrt{1 + \eta^2}) + 1}{(-1 + \sqrt{1 + \eta^2})^2 + \eta^2}} & |\eta| > \sqrt{(\lambda_0 + 1)^2 - 1}. \end{cases}$$

Wir folgern (vgl. Schritt 4 im Beweis von Satz III.8), dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left\| (|D_{g,\alpha}^{(\gamma)}| + 1)^{1/2} (D_{g,\alpha}^{(\gamma)} - i\eta)^{-1} \right\| \|W^{(\gamma)}\| \|(D_g - i\eta)^{-1}\| d\eta$$

endlich ist, woraus die Beschränktheit von $(|D_{g,\alpha}^{(\gamma)}| + 1)^{\frac{1}{2}} P_- \Lambda_+$ folgt. \square

Lemma A.7 zeigt, dass die Bedingung $0 \in \rho(D_{g,\alpha}^{(\gamma)})$ in Lemma IV.2 erfüllt ist, wenn $b_g > 4\alpha\|\gamma\|_1$ gilt.

Lemma IV.2 ermöglicht es, die Eigenwerte des Dirac-Fock-Operators durch die Eigenwerte des Coulomb-Dirac-Operators zu kontrollieren. Da das Minimax-Prinzip die Eigenwerte geordnet nach Größe und unter Zählung der Vielfachheiten liefert, erhalten wir nicht nur Informationen über die Lokalisierung der Eigenwerte, sondern auch über die Dimension der Projektion auf einen gegebenen Teil des diskreten Spektrums. Man beachte, dass die Abschätzung nur von $\|\gamma\|_1$ abhängt, aber nicht von γ selbst.

LEMMA IV.3 ([87], Lemma 2). *Es sei $0 \leq \gamma \in F$ und es gelten die Voraussetzungen von Lemma IV.2. Dann gilt für alle $n \in \mathbb{N}$ die Abschätzung*

$$\epsilon_n^0 \leq \epsilon_n^{(\gamma)} \leq (1 + (\pi/2)\alpha\|\gamma\|_1 b_g^{-1}) \epsilon_n^0.$$

BEWEIS. Wegen $0 \leq X^{(\gamma)}$, $0 \leq \phi^{(\gamma)}$ und $0 \leq W^{(\gamma)}$ (Lemma A.3) folgt aus Lemma A.2 und Lemma A.7 die Ungleichungskette

$$\begin{aligned} D_g &\leq D_g + \alpha W^{(\gamma)} \leq D_g + \alpha \phi^{(\gamma)} \leq D_g + \frac{\pi}{2} \alpha \|\gamma\|_1 |\nabla| \\ &\leq D_g + \frac{\pi}{2} \alpha \|\gamma\|_1 b_g^{-1} |D_g| \leq (1 + \frac{\pi}{2} \alpha \|\gamma\|_1 b_g^{-1}) (D_g)_+ + (1 - \frac{\pi}{2} \alpha \|\gamma\|_1 b_g^{-1}) (D_g)_-, \end{aligned}$$

wobei $(D_g)_+$ und $(D_g)_-$ der positive bzw. negative Teil des Coulomb-Dirac-Operators ist. Wir wählen nun $\mathfrak{h}_{\pm} := \Lambda_{\pm} \mathfrak{h}$. Dann folgt aus der obigen Operatorungleichung sofort für alle $n \in \mathbb{N}$ die Ungleichung $\lambda_n(D_g) \leq \lambda_n(D_{g,\alpha}^{(\gamma)}) \leq (1 + (\pi/2)\alpha\|\gamma\|_1 b_g^{-1}) \lambda_n(D_g)$, wobei die λ_n die Minimax-Werte sind, die in Satz A.8 definiert sind. Wegen Lemma IV.2 sind die Voraussetzungen von Satz A.8 für $D_{g,\alpha}^{(\gamma)}$ erfüllt. Für D_g sind die Voraussetzungen wegen der Wahl von $\mathfrak{h}_{\pm} := \Lambda_{\pm} \mathfrak{h}$ trivialerweise erfüllt. Für den Operator

$$(1 + (\pi/2)\alpha\|\gamma\|_1/d_g)(D_g)_+ + (1 - (\pi/2)\alpha\|\gamma\|_1/d_g)(D_g)_-$$

sind die Voraussetzungen ebenfalls erfüllt, da er dieselben positiven und negativen Spektralräume hat wie D_g . Somit folgt aus Satz A.8 sofort die behauptete Ungleichung. \square

LEMMA IV.4 ([87], Lemma 3). *Es sei $0 \leq \gamma \in F$ mit ρ_{γ} sphärisch symmetrisch und es gelten die Voraussetzungen von Lemma IV.2. Dann gilt für alle $n \in \mathbb{N}$ die Ungleichungskette*

$$\epsilon_n^0 \leq \epsilon_n^{(\gamma)} \leq \epsilon(g - \alpha\|\gamma\|_1)_n^0,$$

wobei $\epsilon(g - \alpha\|\gamma\|_1)_n^0$ die Eigenwerte des Coulomb-Dirac-Operators $D_{g-\alpha\|\gamma\|_1}$ sind, d.h. des Coulomb-Dirac-Operators, in dem die Kopplungskonstante g durch $g - \alpha\|\gamma\|_1$ wurde.

BEWEIS. Die erste Ungleichung ist dieselbe wie in Lemma IV.3. Für die zweite Ungleichung stellen wir fest, dass aus der Newtonschen Ungleichung $\phi^{(\gamma)} \leq \|\gamma\|_1 |\cdot|^{-1}$ folgt. Daher gilt wegen Lemma A.3 die Abschätzung

$$D_{g,\alpha}^{(\gamma)} = D_g + \alpha\phi^{(\gamma)} - \alpha X^{(\gamma)} \leq D_g + \alpha\|\gamma\|_1 |\cdot|^{-1}.$$

Da

$$(f, (D_0 - g|\cdot|^{-1} + \alpha\|\gamma\|_1 |\cdot|^{-1})f) = (f, D_{g-\alpha\|\gamma\|_1} f) \leq 0$$

wegen der Kato-Ungleichung und Lemma A.7 für alle $f \in \mathfrak{Q}_-$ gilt, erhalten wir aus dem Minimax-Satz A.8

$$\lambda_n(D_{g-\alpha\|\gamma\|_1}) \leq \epsilon(g - \alpha\|\gamma\|_1)_n^0.$$

Zusammen mit Lemma IV.2 folgt daraus die Behauptung. \square

Wir definieren nun $c := (1 + (\pi/2)\alpha N/b_g)\epsilon_N^0$ und $\eta := \epsilon_{N+1}^0 - c = \epsilon_{N+1}^0 - (1 + (\pi/2)\alpha N/b_g)\epsilon_N^0$. Es sei

$$\alpha_0 := \sup\{\alpha \in \mathbb{R} | \epsilon_{N+1}^0 - (1 + \frac{\pi}{2}\alpha N/b_g)\epsilon_N^0 > 0\} = 2(\epsilon_{N+1}^0 - \epsilon_N^0)b_g/(\pi N\epsilon_N^0).$$

Um die Notation zu vereinfachen, haben wir die Abhängigkeit dieser Größen von g und α unterdrückt. Schließlich setzen wir

$$\begin{aligned} g_{g,N}(\alpha) := & (\epsilon_N^0)^2 \pi^2 N^3 \alpha^3 + [-6\pi N^2 \epsilon_N^0 \epsilon_{N+1}^0 + (4\pi - 1/4\pi^2) N^2 (\epsilon_N^0)^2] b_g \alpha^2 \\ & + [(\pi - 12)N \epsilon_N^0 \epsilon_{N+1}^0 - 4N \epsilon_1^0 \epsilon_N^0 + 12n(\epsilon_{N+1}^0)^2 + (4 - \pi) N (\epsilon_N^0)^2] b_g^2 \alpha \\ & - b_g^3 (\epsilon_N^0 + \epsilon_{N+1}^0)^2 \end{aligned}$$

und definieren α'_0 als die kleinste Wurzel der kubischen Gleichung $g_{g,N}(\alpha) = 0$. Ferner folgt aus $Z \leq \alpha_{\text{phys}}^{-1} \sqrt{1 - (1 + \sqrt{33})/16)^2} \approx 124.23$ die Ungleichung $\epsilon_1^0 \geq \epsilon_3^0 - \epsilon_1^0$, so dass für diese Werte von Z die Abschätzung $\epsilon_1^0 \geq \eta$ gilt.

SATZ IV.5 ([87], Theorem 1). *Es sei $N \in \text{CS}$ und $\alpha < \min\{\alpha_0, \alpha'_0, b_g/(4N)\}$. Wir wählen eine Kontour C gemäß*

$$C(t) := \begin{cases} \epsilon_1^0 - \frac{\eta}{2} + t(c + \frac{\eta}{2} - (\epsilon_1^0 - \frac{\eta}{2})) - i\frac{\eta}{2} & 0 \leq t \leq 1 \\ c + \frac{\eta}{2} - i\frac{\eta}{2} + (t-1)\eta & 1 \leq t \leq 2 \\ c + \frac{\eta}{2} + (t-2)(\epsilon_1^0 - \frac{\eta}{2} - (c + \frac{\eta}{2})) + i\frac{\eta}{2} & 2 \leq t \leq 3 \\ \epsilon_1^0 - \frac{\eta}{2} + i\frac{\eta}{2} - i(t-3)\eta & 3 \leq t \leq 4. \end{cases}$$

Dann hat die Abbildung

$$T : S_N \rightarrow S_N, \gamma \mapsto -(2\pi i)^{-1} \int_C (D_{g,\alpha}^{(\gamma)} - z)^{-1} dz$$

einen eindeutigen Fixpunkt.

Wir bemerken, dass unsere Abschätzung an die zulässigen Werte für die Feinstrukturkonstante α wie $1/N$ gegen Null geht. Der hauptsächliche technische Grund hierfür ist, dass die Kontrolle der Eigenwerte des Dirac-Fock-Operators durch die Eigenwerte des Coulomb-Dirac-Operators mit wachsendem N schlechter wird, da die Lücke zwischen den Eigenwerten kleiner wird (siehe Lemma IV.3). Dies ist auch der Grund dafür, dass unsere Abschätzungen an die Kontraktionseigenschaft der Abbildung T mit steigendem N schlechter wird.

BEWEIS VON SATZ IV.5.

Schritt 1: Man beachte, dass S_N eine abgeschlossene Teilmenge von F ist. Es sei $\gamma \in S_N$. Wegen der Ungleichungen (siehe Lemma IV.3)

$$\epsilon_1^0 \leq \epsilon_k^0 \leq \epsilon_k^{(\gamma)} \leq (1 + \frac{\pi}{2}\alpha N b_g^{-1})\epsilon_k^0 \leq (1 + \frac{\pi}{2}\alpha N b_g^{-1})\epsilon_N^0 < \epsilon_{N+1}^0$$

für $k = 1, \dots, N$ und weil $T(\gamma)$ die Projektion auf den spektralen Teilraum von $D_{g,\alpha}^{(\gamma)}$ zu den N kleinsten Eigenwerten von $D_{g,\alpha}^{(\gamma)}$ ist (Reed und Simon [124, Theorem XII.6]), folgt $\gamma \in F$, $\text{tr } T(\gamma) = N$ und $\gamma \geq 0$. Folglich ist T wohldefiniert.

Schritt 2: Wir zeigen, dass die Abbildung T eine Kontraktion ist: Es sei $\gamma, \gamma' \in S_N$. Es sei P die Projektion auf $\text{Ran}(|D_g|(T(\gamma) - T(\gamma')))$. Wegen $\dim \text{Ran}((T(\gamma) - T(\gamma'))) \leq 2N$ gilt $\dim \text{Ran}(|D_g|(T(\gamma) - T(\gamma'))) \leq 2N$, woraus $\|P\|_1 \leq 2N$ folgt. Daher gilt

$$\begin{aligned} \|T(\gamma) - T(\gamma')\|_{F,g} &= \| |D_g|(T(\gamma) - T(\gamma')) \|_1 = \|P|D_g|(T(\gamma) - T(\gamma'))\|_1 \\ &\leq \|P\|_1 \| |D_g|(T(\gamma) - T(\gamma')) \| \leq \frac{2N}{1 - 4\alpha N/b_g} \| |D_{g,\alpha}^{(\gamma)}|(T(\gamma) - T(\gamma')) \| \\ &\leq 2N c_{g,\alpha,N} b_g \| |D_{g,\alpha}^{(\gamma)}|(T(\gamma) - T(\gamma')) \| \\ &\leq \pi^{-1} c_{g,\alpha,N} b_g N \left\| \int_C |D_{g,\alpha}^{(\gamma)}| (D_{g,\alpha}^{(\gamma)} - z)^{-1} - (D_{g,\alpha}^{(\gamma')} - z)^{-1} dz \right\| \\ &\leq \frac{\alpha c_{g,\alpha,N} N b_g}{\pi} \left\| \int_C |D_{g,\alpha}^{(\gamma)}| (D_{g,\alpha}^{(\gamma)} - z)^{-1} W^{(\gamma-\gamma')} (D_{g,\alpha}^{(\gamma')} - z)^{-1} dz \right\| \\ &\leq \alpha c_{g,\alpha,N} N (2\eta + (c - \epsilon_1^0)) \times \\ &\quad \max_{z \in C([0,4])} (\| |D_{g,\alpha}^{(\gamma)}|(D_{g,\alpha}^{(\gamma)} - z)^{-1} \|) \max_{z \in C([0,4])} \left\| (D_{g,\alpha}^{(\gamma')} - z)^{-1} \right\| \| \gamma - \gamma' \|_{F,g}, \end{aligned}$$

wobei wir Lemma A.7, die Resolventengleichung, Lemma A.2 und Gleichung (A.1) benützt haben.

Es sei $z = x + iy \in \mathbb{C}$ ($x, y \in \mathbb{R}$) beliebig. Wir zeigen Abschätzungen an $\| |D_{g,\alpha}^{(\gamma)}|(D_{g,\alpha}^{(\gamma)} - z)^{-1} \|$. Es sei $A := \mathbb{R} \setminus [(0, \epsilon_1^0) \cup (c, \epsilon_{N+1}^0)]$ und E die Spektralschar von $D_{g,\alpha}^{(\gamma)}$. Wegen $E[(0, \epsilon_1^0) \cup (c, \epsilon_{N+1}^0)] = 0$ folgt

$$\| |D_{g,\alpha}^{(\gamma)}|(D_{g,\alpha}^{(\gamma)} - z)^{-1} \| \leq \sup_{\lambda \in A} |\lambda|/|\lambda - z| = \sup_{\lambda \in A} f_{x,y}(\lambda)$$

mit

$$f_{x,y}(\lambda) := |\lambda|/|\lambda - z| = |\lambda|((\lambda - x)^2 + y^2)^{-1/2}.$$

Es sei zunächst $x = c + \eta/2$ und y beliebig. Wegen $f_{x,y}(\lambda) \leq |\lambda|/|\lambda - x|$ erhalten wir

$$\sup_{\lambda \in A} f_{x,y}(\lambda) \leq |\epsilon_{N+1}^0|/|\epsilon_{N+1}^0 - x| = 2\epsilon_{N+1}^0/\eta.$$

Ähnlich gilt für $x = \epsilon_1^0 - \eta/2$ und beliebiges y die Abschätzung

$$\| |D_{g,\alpha}^{(\gamma)}|(D_{g,\alpha}^{(\gamma)} - z)^{-1} \| \leq 2\epsilon_1^0/\eta.$$

Es sei nun $y = \pm\eta/2$ und $x \in [\epsilon_1^0 - \eta/2, c + \eta/2]$. Offensichtlich gilt mit $B := [\epsilon_1^0, c] \cup [\epsilon_{n+1}^0, \infty)$ die Identität

$$\sup_{\lambda \in A} f_{x,y}(\lambda) = \sup_{\lambda \in B} f_{x,y}(\lambda).$$

Eine kleine Rechnung zeigt, dass die Funktion $f_{x,y}$ ihr Maximum auf dem Intervall $[0, \infty)$ bei $\lambda_0 = (x^2 + y^2)/x$ annimmt. Ferner gilt $f_{x,y}(\lambda) \leq |\lambda|/|y|$ für alle $\lambda \in \mathbb{R}$, woraus

$$\| |D_{g,\alpha}^{(\gamma)}| (D_{g,\alpha}^{(\gamma)} - z)^{-1} \| \leq f_{x,y}(\lambda_0) \leq (x^2 + y^2)/(x|y|)$$

folgt. Da die Funktion $h_y(b) := (b^2 + y^2)/(b|y|)$ ihr Minimum auf $(0, \infty)$ bei $b = |y|$ annimmt und für $b > |y|$ monoton steigend ist, erhalten wir

$$\| |D_{g,\alpha}^{(\gamma)}| (D_{g,\alpha}^{(\gamma)} - z)^{-1} \| \leq [(c + \eta/2)^2 + \eta^2/4] / [(c + \eta/2)\eta/2],$$

weil $x > y$ gilt wegen der Bemerkung vor dem Satz. Eine kleine Rechnung zeigt nun

$$\frac{(c + \eta/2)^2 + (\eta/2)^2}{(c + \eta/2)\eta/2} \leq \frac{2\epsilon_{N+1}^0}{\eta},$$

woraus $\| |D_{g,\alpha}^{(\gamma)}| (D_{g,\alpha}^{(\gamma)} - z)^{-1} \| \leq 2\epsilon_{N+1}^0/\eta$ für alle $z \in C([0, 4])$ folgt. Außerdem benützen wir

$$\| (D_{g,\alpha}^{(\gamma')} - z)^{-1} \| \leq 1/\text{dist}(z, \sigma(D_{g,\alpha}^{(\gamma')})) = 2/\eta$$

für $z \in \rho(D_{g,\alpha}^{(\gamma')})$, woraus zusammen

$$\begin{aligned} \| T(\gamma) - T(\gamma') \|_{F,g} &\leq \alpha c_{g,\alpha,N} N \cdot (2\eta + (c - \epsilon_1^0)) 2\epsilon_{N+1}^0 \eta^{-1} 2\eta^{-1} \| \gamma - \gamma' \|_{F,g} \\ &= \alpha [4N c_{g,\alpha,N} \epsilon_{n+1}^0 (2\eta + (c - \epsilon_1^0))] \eta^{-2} \| \gamma - \gamma' \|_{F,g} \end{aligned}$$

folgt. Die Bedingung $4\alpha N c_{g,\alpha,N} \epsilon_{n+1}^0 (2\eta + (c - \epsilon_1^0)) \eta^{-2} < 1$ führt zu der Ungleichung $g_{g,N}(\alpha) < 0$, woraus die Behauptung folgt. \square

Man beachte, dass die Menge der Dichte-Matrizes $\gamma \in F$ mit sphärisch symmetrischer Dichte ρ_γ in der F -Norm abgeschlossen ist. Dies sieht man wie folgt: Man wähle eine F -konvergente Folge γ_n solcher Dichtematrizes. Wir haben lediglich zu zeigen, dass die Dichte des Grenzwertes ebenfalls sphärisch symmetrisch ist. Jedoch folgt aus der Konvergenz in F die Konvergenz der entsprechenden Dichten ρ_n in L^1 . Es sei R eine Rotation. Dann gilt $\rho_{n,R}(x) := \rho_n(Rx) \stackrel{a.e.}{=} \rho_n(x)$ und somit $L^1\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} \rho_n = L^1\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} \rho_{n,R}$. Daher können wir den Fixpunktsatz auf diese kleinere Menge anwenden. Das verbessert die Abschätzungen im Beweis von Satz IV.5 geringfügig, wenn wir Lemma IV.4 verwenden. Wir stellen das Ergebnis der numerischen Auswertung dieser komplizierteren Bedingung in Abbildung IV.1 graphisch dar. Wir bemerken Folgendes zu dieser Abbildung: In unseren Beweisen benützen wir aus theoretischen Gründen zwei verschiedene Parameter, nämlich g und α . Physikalisch würde man folgende Wahl treffen: (i) $g = \alpha_{\text{phys}} Z$, wobei Z die Kernladungszahl des betreffenden Elements ist. (ii) $\alpha = \alpha_{\text{phys}}$, wobei $\alpha_{\text{phys}} \approx 1/137$. Um eine Beziehung zur Physik herzustellen, wählen wir die erste Möglichkeit und stellen den maximalen Wert von α dar, der unsere Voraussetzungen erfüllt. Die Grafik zeigt, dass wir α_{phys} nicht erreichen; jedoch liegt unser Ergebnis für hoch ionisierte mittelschwere Atome in der richtigen Größenordnung.

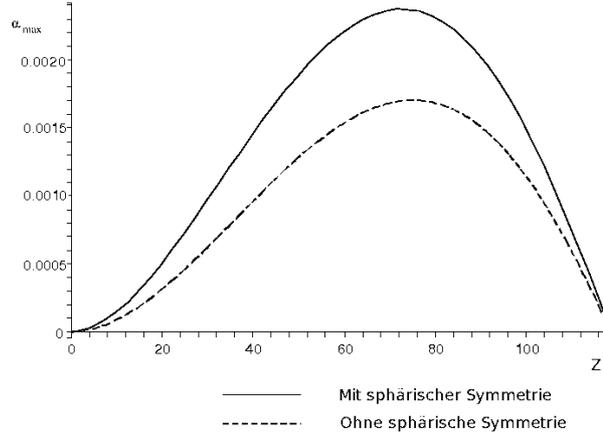


ABBILDUNG IV.1. Der maximale Wert von α , für den die Kontraktionseigenschaft von T garantiert werden kann, in Abhängigkeit von der Kernladung $Z = 137g$ und für $N = 2$ mit und ohne die zusätzliche Annahme der sphärischen Symmetrie.

KOROLLAR IV.6 ([87], Corollary 1). *Es sei $N \in \text{CS}$ und α erfülle die Voraussetzungen von Satz IV.5. Dann gibt es ein eindeutiges $\delta \in F$, das die Projektion auf den Eigenraum zu den N kleinsten Eigenwerten von $D_{g,\alpha}^{(\delta)}$ ist.*

BEWEIS. Satz IV.5 liefert die Existenz eines solchen δ . Andererseits erfüllt jede Projektion γ auf die N kleinsten Eigenwerte von $D_{g,\alpha}^{(\gamma)}$ die Gleichung $T(\gamma) = \gamma$, die die eindeutige Lösung δ hat. \square

Wir setzen

$$\begin{aligned} E_N &:= \epsilon_1^0 + \dots + \epsilon_{N-1}^0 & a &:= 2\pi N^2(E_N + \epsilon_N^0) \\ b &:= \left[-\frac{3}{4}\pi E_N - \left(4 + \frac{\pi}{4}\right)\epsilon_{N+1}^0 + \left(4 - \frac{\pi}{2}\right)\epsilon_N^0\right]b_g N & c &:= (-\epsilon_N^0 + \epsilon_{N+1}^0)b_g^2 \\ a_{g,N} &:= (-b - \sqrt{b^2 - 4ac})/(2a). \end{aligned}$$

KOROLLAR IV.7 ([87], Corollary 2). *Es sei $N \in \text{CS}$ und es existiere eine Lösung δ der Gleichung $T(\gamma) = \gamma$. Dann minimiert diese die Energie des Dirac-Fock-Funktional auf der Menge der Dirac-Fock-Lösungen, d.h. diese Lösung erfüllt*

$$\mathcal{E}_{g,\alpha}(\delta) = \min\{\mathcal{E}_{g,\alpha}(\gamma) \mid \gamma \in \text{DF}, \text{tr } \gamma = N\},$$

wenn $\alpha \leq \min\{a_{g,N}, b_g/(4N), \alpha_0\}$ gilt.

BEWEIS. Wegen Lemma A.4 gilt für alle $\gamma \geq 0$ die Ungleichung

$$(IV.1) \quad \mathcal{E}_{g,\alpha}(\gamma) = \text{tr } D_{g,\alpha}^{(\gamma)}\gamma - \alpha Q(\gamma, \gamma) \leq \text{tr } D_{g,\alpha}^{(\gamma)}\gamma.$$

Wir wählen eine beliebige Lösung $\gamma \in \text{DF}$ mit $\text{tr } \gamma = N$. Mit Lemma A.4 und Lemma

A.7 erhalten wir

$$\begin{aligned}
(IV.2) \quad \mathcal{E}_{g,\alpha}(\gamma) &= \operatorname{tr} D_{g,\alpha}^{(\gamma)} \gamma - \alpha Q(\gamma, \gamma) \geq \operatorname{tr} D_{g,\alpha}^{(\gamma)} \gamma - \alpha D(\rho_\gamma, \rho_\gamma) \\
&\geq \operatorname{tr} D_{g,\alpha}^{(\gamma)} \gamma - \frac{\pi}{4} \alpha N \operatorname{tr} |\nabla| |\gamma| \geq \operatorname{tr} D_{g,\alpha}^{(\gamma)} \gamma - \frac{\pi}{4} \alpha N c_{g,\alpha,N} \operatorname{tr} |D_{g,\alpha}^{(\gamma)}| |\gamma| \\
&= (1 - \tilde{c}_{g,\alpha,N}) \operatorname{tr} D_{g,\alpha}^{(\gamma)} \gamma.
\end{aligned}$$

Es seien ϵ_k , $k = 1, \dots, N$, diejenigen Eigenwerte (geordnet nach ihrer Größe und unter Zählung der Vielfachheiten) von $D_{g,\alpha}^{(\gamma)}$, deren Eigenvektoren im Wertebereich von γ sind. Wenn die ϵ_k , $k = 1, \dots, N$, die Ungleichung

$$\epsilon_1^0 \leq \epsilon_k \leq \left(1 + \frac{\pi}{2} \alpha N b_g^{-1}\right) \epsilon_N^0$$

für $k = 1, \dots, N$ erfüllen, dann ist γ die Projektion auf den Eigenraum zu den N kleinsten Eigenwerten von $D_{g,\alpha}^{(\gamma)}$ und daher gleich dem eindeutigen Fixpunkt δ von T . Wegen Gleichung (IV.1) und Lemma IV.3 erhalten wir für die Energie des Fixpunktes

$$\mathcal{E}_{g,\alpha}(\delta) \leq \sum_{m=1}^N \epsilon_m^{(\delta)} \leq \left(1 + \frac{\pi}{2} \alpha N b_g^{-1}\right) \sum_{m=1}^N \epsilon_m^0.$$

Wenn es andererseits ein $l \in \{1, \dots, N\}$ gibt, so dass $\epsilon_j \geq \epsilon_{N+1}^{(0)}$ für alle $j \geq l$ und $\epsilon_j \leq \left(1 + \frac{\pi}{2} \alpha N b_g^{-1}\right) \epsilon_n^{(0)}$ für alle $j \leq l-1$ gilt, dann erhalten wir aus (IV.2) die Abschätzung

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_{g,\alpha}(\gamma) &\geq (1 - \tilde{c}_{g,\alpha,N}) \operatorname{tr} D_{g,\alpha}^{(\gamma)} \gamma = (1 - \tilde{c}_{g,\alpha,N}) \sum_{m=1}^N \epsilon_m \\
&\geq (1 - \tilde{c}_{g,\alpha,N}) \left(\sum_{m=1}^{l-1} \epsilon_m^0 + \sum_{m=l}^N \epsilon_m \right) \geq (1 - \tilde{c}_{g,\alpha,N}) \left(\sum_{m=1}^{N-1} \epsilon_m^0 + \epsilon_{N+1}^0 \right).
\end{aligned}$$

Wegen $\epsilon_m \geq \epsilon_{N+1}^{(0)} > \epsilon_N^{(0)}$ für $m \geq l$ folgt

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_{g,\alpha}(\gamma) - \mathcal{E}_{g,\alpha}(\delta) &= (1 - \tilde{c}_{g,\alpha,N}) \sum_{m=1}^{N-1} \epsilon_m^0 + (1 - \tilde{c}_{g,\alpha,N}) \epsilon_{N+1}^0 - \left(1 + \frac{\pi}{2} \alpha \frac{N}{b_g}\right) \sum_{m=1}^N \epsilon_m^0 \\
&= -\alpha \left(\frac{\pi}{4} N c_{g,\alpha,N} + \frac{\pi N}{2 b_g} \right) \sum_{m=1}^{N-1} \epsilon_m^0 + \left(1 - \frac{\pi}{4} \alpha N c_{g,\alpha,N}\right) \epsilon_{N+1}^0 - \left(1 + \frac{\pi}{2} \alpha \frac{N}{b_g}\right) \epsilon_N^0.
\end{aligned}$$

Die Bedingung $\mathcal{E}_{g,\alpha}(\gamma) - \mathcal{E}_{g,\alpha}(\delta) \geq 0$ liefert die in α quadratische Gleichung

$$\begin{aligned}
2\pi N^2 (E_N + \epsilon_N^0) \alpha^2 + \left[-\frac{3\pi}{4} E_N - \left(4 + \frac{\pi}{4}\right) \epsilon_{N+1}^0 + \left(4 - \frac{\pi}{2}\right) \epsilon_N^0 \right] b_g N \alpha \\
+ (-\epsilon_N^0 + \epsilon_{N+1}^0) b_g^2 = 0,
\end{aligned}$$

deren kleinste Wurzel $a_{g,N}$ relevant ist. \square

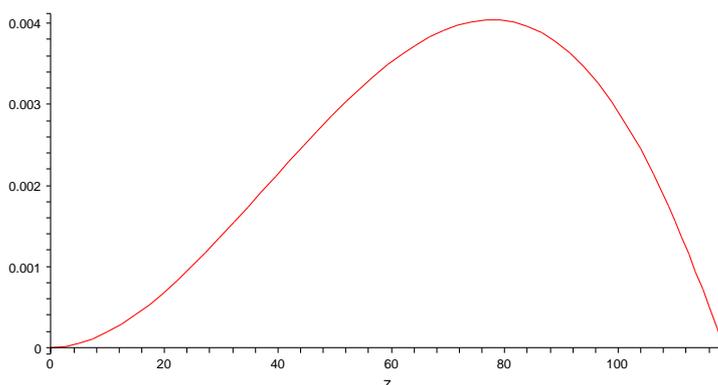


ABBILDUNG IV.2. Die Konstante $\min\{a_{g,n}, b_g/(4N), \alpha_0\}$ in Abhängigkeit von der Kernladung $Z = 137g$ für $N = 2$.

IV.4. Sphärische Symmetrie

Als nächsten Schritt folgen wir teilweise [18] und zeigen, dass der Fixpunkt von T in einem gewissen Sinne sphärisch symmetrisch ist. Für jedes $R \in SO(3)$ gibt es ein $U_R \in SU(2)$ mit $(R\mathbf{x}) \cdot \vec{\sigma} = U_R(\mathbf{x} \cdot \vec{\sigma})U_R^{-1}$ für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$. Man beachte, dass U_R nicht eindeutig ist; die beiden möglichen Wahlen unterscheiden sich jedoch nur um -1 . Da wir lediglich an Eigenvektoren interessiert sind, kümmern wir uns nicht weiter um diese Zweideutigkeit. Für

$$f = \begin{pmatrix} f^{(u)} \\ f^{(l)} \end{pmatrix} \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$$

definieren wir

$$f_R(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} U_R f^{(u)}(R^{-1}\mathbf{x}) \\ U_R f^{(l)}(R^{-1}\mathbf{x}) \end{pmatrix}.$$

Offensichtlich gilt $f_R \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$. Für $\gamma = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n |\xi_n\rangle \langle \xi_n| \in F$ definieren wir

$$\gamma_R := \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n |(\xi_n)_R\rangle \langle (\xi_n)_R|.$$

Zunächst zeigen wir das folgende Lemma:

LEMMA IV.8 ([87], Lemma 4). *Es sei $f \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ Eigenfunktion von $D_{g,\alpha}^{(\gamma)}$ mit Eigenwert ϵ . Dann ist $f_R \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ Eigenfunktion von $D_{g,\alpha}^{(\gamma_R)}$ mit Eigenwert ϵ .*

BEWEIS. Wir behandeln den Dirac-Fock-Operator Term für Term:

Erster Term: Es sei $Q = R^{-1}$. Dann gilt

$$(IV.3) \quad (-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla f_R)(x) = V_R(-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla f)(Qx)$$

mit

$$V_R = \begin{pmatrix} U_R & 0 \\ 0 & U_R \end{pmatrix}.$$

Beweis: Wir bezeichnen mit ∂ die totale Ableitung und mit ∂_j die entsprechende partielle Ableitung. Es gilt

$$\partial_j f_R = \begin{pmatrix} U_R \partial_j f_R^{(u)} \\ U_R \partial_j f_R^{(l)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_R [(\partial f^{(u)}) \circ Q] Q e_j \\ U_R [(\partial f^{(l)}) \circ Q] Q e_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_R \sum_{k=1}^3 [(\partial_k f^{(u)}) \circ Q] Q_{kj} \\ U_R \sum_{k=1}^3 [(\partial_k f^{(l)}) \circ Q] Q_{kj} \end{pmatrix},$$

woraus

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla f_R &= \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \begin{pmatrix} \sigma_j U_R [(\partial_k f^{(l)}) \circ Q] Q_{kj} \\ \sigma_j U_R [(\partial_k f^{(u)}) \circ Q] Q_{kj} \end{pmatrix} \\ &= \sum_{k=1}^3 \begin{pmatrix} U_R U_R^{-1} (\vec{\sigma} \cdot \text{Re}_k) U_R (\partial_k f^{(l)}) \circ Q \\ U_R U_R^{-1} (\vec{\sigma} \cdot \text{Re}_k) U_R (\partial_k f^{(u)}) \circ Q \end{pmatrix} = \sum_{k=1}^3 \begin{pmatrix} U_R \sigma_k (\partial_k f^{(l)}) \circ Q \\ U_R \sigma_k (\partial_k f^{(u)}) \circ Q \end{pmatrix} \\ &= V_R (\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla f) \circ Q \end{aligned}$$

folgt.

Zweiter Term: Es gilt

$$(IV.4) \quad \beta f_R = \beta \begin{pmatrix} U_R & 0 \\ 0 & U_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f^{(u)} \circ Q \\ f^{(l)} \circ Q \end{pmatrix} = V_R (\beta f) \circ Q$$

Dritter Term:

$$(IV.5) \quad |\cdot|^{-1} f_R = V_R |Q \cdot|^{-1} f \circ Q = V_R |\cdot|^{-1} f \circ Q$$

Vierter Term:

$$\begin{aligned} (IV.6) \quad \phi^{(\gamma_R)} f_R &= V_R \left[\sum_n \lambda_n \left\langle \begin{pmatrix} U_R [\xi_n^{(u)} \circ Q] \\ U_R [\xi_n^{(l)} \circ Q] \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} U_R [\xi_n^{(u)} \circ Q] \\ U_R [\xi_n^{(l)} \circ Q] \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{C}^4} * \frac{1}{|\cdot|} \right] (f \circ Q) \\ &= V_R \int \sum_n \lambda_n \left\langle \begin{pmatrix} \xi_n^{(u)}(\mathbf{y}) \\ \xi_n^{(l)}(\mathbf{y}) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \xi_n^{(u)}(\mathbf{y}) \\ \xi_n^{(l)}(\mathbf{y}) \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{C}^4} \frac{d\mathbf{y}}{|\cdot - R\mathbf{y}|} f \circ Q \\ &= V_R [(\phi^{(\gamma)} \circ Q)(f \circ Q)] = V_R [(\phi^{(\gamma)} f) \circ Q] \end{aligned}$$

Fünfter Term: Es gilt

$$\begin{aligned} (IV.7) \quad (X^{(\gamma_R)} f_R)(\mathbf{x}) &= \int \sum_n \lambda_n \begin{pmatrix} U_R \xi_n^{(u)}(Q\mathbf{x}) \\ U_R \xi_n^{(l)}(Q\mathbf{x}) \end{pmatrix} \left\langle \begin{pmatrix} U_R \xi_n^{(u)}(Q\mathbf{y}) \\ U_R \xi_n^{(l)}(Q\mathbf{y}) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} U_R f^{(u)}(Q\mathbf{y}) \\ U_R f^{(l)}(Q\mathbf{y}) \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{C}^4} \frac{d\mathbf{y}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \\ &= V_R \int d\mathbf{y} \sum_n \lambda_n \frac{\begin{pmatrix} \xi_n^{(u)}(Q\mathbf{x}) \\ \xi_n^{(l)}(Q\mathbf{x}) \end{pmatrix} \left\langle \begin{pmatrix} \xi_n^{(u)}(\mathbf{y}) \\ \xi_n^{(l)}(\mathbf{y}) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} f^{(u)}(\mathbf{y}) \\ f^{(l)}(\mathbf{y}) \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{C}^4}}{|\mathbf{x} - R\mathbf{y}|} \\ &= V_R (X^{(\gamma)} f)(Q\mathbf{x}), \end{aligned}$$

woraus

$$(D^{(\gamma_R)} f_R)(\mathbf{x}) = V_R (D_{g,\alpha}^{(\gamma)} f)(Q\mathbf{x}) = \epsilon V_R f(Q\mathbf{x}) = \epsilon f_R(\mathbf{x})$$

folgt, was die Behauptung zeigt. \square

KOROLLAR IV.9 ([87], Corollary 3). *Wenn $\alpha < \alpha_0$ gilt und wenn T einen eindeutigen Fixpunkt δ hat, dann gilt*

$$\delta_R = \delta$$

für alle $R \in SO(3)$, d.h. δ ist sphärisch symmetrisch.

BEWEIS. Wegen des vorangehenden Lemmas folgt die Behauptung aus der Eindeutigkeit des Fixpunktes von T . \square

Der folgende Satz ist in [18, Seite 4] angedeutet.

SATZ IV.10 ([87], Theorem 2). *Das Energiefunktional $\mathcal{E}_{g,\alpha}$ ist invariant unter Rotationen von Dichtematrizes, d.h. für alle $\gamma \in F$ und alle $R \in SO(3)$ gilt*

$$\mathcal{E}_{g,\alpha}(\gamma) = \mathcal{E}_{g,\alpha}(\gamma_R).$$

BEWEIS. Wir bemerken die Identitäten $2E(\gamma, \gamma) = \text{tr } X^{(\gamma)}\gamma$ und $2D(\rho_\gamma, \rho_\gamma) = \text{tr } \phi^{(\gamma)}\gamma$. Für alle $f \in H^1(\mathbb{R}^3)^4$, alle $\gamma \in F$ und alle $R \in SO(3)$ erhalten wir unter Verwendung von (IV.3) bis (IV.7) die Gleichungen

$$(IV.8) \quad (f_R, D_g f_R) = \int_G \overline{V_R f(Q\mathbf{x})}^t V_R(D_g f)(Q\mathbf{x}) dx = (f, D_g f)$$

$$(IV.9) \quad (f_R, X^{(\gamma_R)} f_R) = \int_G \overline{V_R f(Q\mathbf{x})}^t V_R(X^{(\gamma)} f)(Q\mathbf{x}) dx = (f, X^{(\gamma)} f)$$

$$(IV.10) \quad (f_R, \phi^{(\gamma_R)} f_R) = \int_G \overline{V_R f(Q\mathbf{x})}^t V_R(\phi^{(\gamma)} f)(Q\mathbf{x}) dx = (f, \phi^{(\gamma)} f).$$

Das zeigt die Behauptung. \square

IV.5. Lösungen der Dirac-Fock-Gleichungen als Minimierer

In diesem Abschnitt zeigen wir, dass die oben konstruierte Lösung der Dirac-Fock-Gleichungen einen Minimierer des Dirac-Fock-Funktional auf der Menge aller Dichtematrizes liefert, wenn die Quantisierung bezüglich der Lösung der Dirac-Fock-Gleichungen gewählt wird. Diese Aussage wurde bereits in [86] bewiesen, jedoch musste dort noch die Existenz einer entsprechenden Lösung vorausgesetzt werden.

Wir benötigen zunächst eine technische Bemerkung:

DEFINITION IV.11. *Es sei $\gamma \in F$ und P_- eine orthogonale Projektion. Dann heißt γ Dichtematrix bezüglich P_- genau dann, wenn die Operatorungleichung*

$$0 \leq \gamma + P_- \leq 1$$

erfüllt ist.

Für Dichtematrizes bezüglich P_- gilt das folgende Lemma:

LEMMA IV.12 ([87], Lemma 5). *Es sei γ eine Dichtematrix bezüglich P_- und es sei $P_+ := 1 - P_-$. Dann gelten die folgenden Operatorungleichungen*

$$\begin{aligned} P_- \gamma P_- P_- \gamma P_- + P_- \gamma P_+ P_+ \gamma P_- &\leq -P_- \gamma P_- \\ P_+ \gamma P_+ P_+ \gamma P_+ + P_+ \gamma P_- P_- \gamma P_+ &\leq P_+ \gamma P_+. \end{aligned}$$

BEWEIS. Der Beweis folgt aus der Tatsache, dass die Ungleichung $0 \leq \gamma + P_- \leq 1$ die Ungleichung $(\gamma + P_-)^2 \leq \gamma + P_-$ impliziert (siehe [8], Gleichungen (18) und (19)). \square

Mit diesen Vorbereitungen ist das Hauptergebnis dieses Abschnitts ein Korollar aus dem folgenden Satz:

SATZ IV.13 ([87], Theorem 3). *Es sei $\delta = \chi_{[0, \epsilon_N^{(\delta)}]}(D_{g, \alpha}^{(\delta)})$ und $N = \text{tr } \delta$. Ferner gelte $\gamma \in \tilde{\mathcal{S}}^{(\delta)}$ und $\gamma' := \gamma - \delta$. Darüber hinaus sei $0 < \frac{\pi}{4} c_{g, \alpha, N} \alpha < 1$. Dann gilt*

$$(IV.11) \quad \mathcal{E}_{g, \alpha}(\gamma) \geq \mathcal{E}_{g, \alpha}(\delta),$$

wenn eine der folgenden Bedingungen erfüllt ist:

- (1) Die Dichtematrix γ' ist eine orthogonale Störung von δ , d.h. $\delta \gamma' \delta = 0$.
- (2) Es gilt $\gamma \in \tilde{\mathcal{S}}_{\partial N}^{(\delta)}$ und die Differenz $\epsilon_{N+1}^{(\delta)} - \epsilon_N^{(\delta)}$ ist so groß, dass

$$(IV.12) \quad \left(1 - \frac{\pi}{4} c_{g, \alpha, N} \alpha\right) \epsilon_{N+1}^{(\delta)} - \left(1 + \frac{\pi}{4} c_{g, \alpha, N} \alpha\right) \epsilon_N^{(\delta)} \geq 0$$

gilt.

BEWEIS. Zunächst bemerken wir, dass aus der Voraussetzung die Ungleichung $\epsilon_{N+1}^{(\delta)} > \epsilon_N^{(\delta)}$ folgt. Wir setzen $P_- := \chi_{(-\infty, \epsilon_N^{(\delta)}]}(D_{g, \alpha}^{(\delta)})$ und $P_+ := 1 - P_-$. Diese Wahl der Projektionen bedeutet, dass wir den Dirac-See so verschieben, dass die Eigenfunktionen der besetzten Orbitale zum Dirac-See gehören.

Wir wählen nun eine beliebige Dichtematrix in $\gamma \in \tilde{\mathcal{S}}^{(\delta)}$. Es gilt

$$0 \leq \gamma + \Lambda_- = \gamma' + \delta + \Lambda_- = \gamma' + P_- \leq 1,$$

d.h. γ' ist eine Dichtematrix bezüglich P_- , wobei $\Lambda_+ := \Lambda_+^{(\delta)}$ und $\Lambda_- := \Lambda_-^{(\delta)}$ ist. Wir setzen nun γ in das Funktional ein und erhalten

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{g, \alpha}(\gamma) &= \text{tr}(D_g(\gamma' + \delta)) + \alpha Q(\gamma' + \delta, \gamma' + \delta) \\ &= \text{tr}(D_g \delta) + \alpha Q(\delta, \delta) + \text{tr}(D_g \gamma') + 2\alpha Q(\delta, \gamma') + \alpha Q(\gamma', \gamma') \\ &= \mathcal{E}_{g, \alpha}(\delta) + \text{tr} D_{g, \alpha}^{(\delta)} \gamma' + \alpha Q(\gamma', \gamma') \geq \mathcal{E}_{g, \alpha}(\delta) + \text{tr} D_{g, \alpha}^{(\delta)} \gamma' - \alpha E(\gamma', \gamma'). \end{aligned}$$

Ferner gilt

$$\begin{aligned} \gamma' \gamma' &= P_+ \gamma' P_+ \gamma' P_+ + P_+ \gamma' P_+ \gamma' P_- + P_+ \gamma' P_- \gamma' P_+ + P_+ \gamma' P_- \gamma' P_- \\ &\quad + P_- \gamma' P_- \gamma' P_- + P_- \gamma' P_- \gamma' P_+ + P_- \gamma' P_+ \gamma' P_- + P_- \gamma' P_+ \gamma' P_+. \end{aligned}$$

Mit Lemma A.5 und Lemma A.7 berechnen wir $E(\gamma', \gamma')$, wobei wir die Ungleichungen aus Lemma IV.12 beachten. Außerdem verschwinden alle Terme der Form

$$\text{tr}(|D_{g, \alpha}^{(\delta)}|^{\frac{1}{2}} P_- \gamma' P_+ P_+ \gamma' P_+ |D_{g, \alpha}^{(\delta)}|^{\frac{1}{2}}),$$

denn die Spektralprojektionen vertauschen mit $D_{g,\alpha}^{(\delta)}$. Wir finden

$$\begin{aligned} E(\gamma', \gamma') &\leq \frac{\pi}{4} \operatorname{tr} (\gamma' |\nabla| \gamma') \leq \frac{\pi}{4} c_{g,\alpha,N} \operatorname{tr} (\gamma' |D_{g,\alpha}^{(\delta)}| \gamma') \\ &\leq \frac{\pi}{4} c_{g,\alpha,N} \operatorname{tr} \left(|D_{g,\alpha}^{(\delta)}|^{\frac{1}{2}} (P_+ \gamma' P_+ - P_- \gamma' P_-) |D_{g,\alpha}^{(\delta)}|^{\frac{1}{2}} \right) \\ &= \frac{\pi}{4} c_{g,\alpha,N} \operatorname{tr} \left(D_{g,\alpha}^{(\delta)} (P_+ \gamma' P_+ + \Lambda_- \gamma' \Lambda_- - \delta \gamma' \delta) \right). \end{aligned}$$

Ferner gilt

$$\operatorname{tr} D_{g,\alpha}^{(\delta)} \gamma' = \operatorname{tr} \left(D_{g,\alpha}^{(\delta)} (P_+ \gamma' P_+ + \Lambda_- \gamma' \Lambda_- + \delta \gamma' \delta) \right),$$

d.h. wir erhalten insgesamt

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{g,\alpha}(\gamma) &= \mathcal{E}_{g,\alpha}(\delta) + \operatorname{tr} D_{g,\alpha}^{(\delta)} \gamma' + \alpha Q(\gamma', \gamma') \\ &\geq \mathcal{E}_{g,\alpha}(\delta) + \left(1 - \frac{\pi}{4} c_{g,\alpha,N} \alpha\right) \operatorname{tr} D_{g,\alpha}^{(\delta)} P_+ \gamma' P_+ \\ &\quad + \left(1 + \frac{\pi}{4} c_{g,\alpha,N} \alpha\right) \operatorname{tr} D_{g,\alpha}^{(\delta)} \delta \gamma' \delta + \left(1 - \frac{\pi}{4} c_{g,\alpha,N} \alpha\right) \operatorname{tr} D_{g,\alpha}^{(\delta)} \Lambda_- \gamma' \Lambda_-. \end{aligned}$$

Wir sehen, dass die Energie wächst, wenn γ' eine orthogonale Störung von δ ist, denn in diesem Fall gilt $\delta \gamma' \delta = \delta(\gamma - \delta)\delta = 0$. Dies zeigt den ersten Teil der Behauptung.

Wir wenden uns nun dem Beweis des zweiten Teils der Behauptung zu: Von nun an nehmen wir $\gamma \in \tilde{\mathcal{S}}_{\partial N}^{(\delta)}$ an. Wegen $\operatorname{tr} \gamma = \operatorname{tr} \delta$ gilt $\operatorname{tr} \gamma' = 0$. Ferner ist

$$\operatorname{tr} \gamma' = \operatorname{tr} \Lambda_- \gamma' \Lambda_- + \operatorname{tr} \delta \gamma' \delta + \operatorname{tr} P_+ \gamma' P_+,$$

so dass

$$0 \leq -\operatorname{tr} \Lambda_- \gamma' \Lambda_- = \operatorname{tr} \delta \gamma' \delta + \operatorname{tr} P_+ \gamma' P_+$$

gilt, denn $\Lambda_- \gamma' \Lambda_- = \Lambda_- \gamma \Lambda_-$ ist ein negativer Operator. Es folgt

$$\operatorname{tr} \delta \gamma' \delta \geq -\operatorname{tr} P_+ \gamma' P_+.$$

Man beachte $\operatorname{tr} \delta \gamma' \delta \leq 0$. Es gilt sogar $-1 \leq \delta \gamma' \delta \leq 0$, denn es ist

$$\begin{aligned} (f, \delta \gamma' \delta f) &= (f_{\text{DF}}, \delta \gamma' \delta f_{\text{DF}}) \\ &= (f_{\text{DF}}, \delta \gamma \delta f_{\text{DF}}) - (f_{\text{DF}}, \delta f_{\text{DF}}) \leq (f_{\text{DF}}, \Lambda_+ f_{\text{DF}}) - (f_{\text{DF}}, f_{\text{DF}}) = 0 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} (f, \delta \gamma' \delta f) &= (f_{\text{DF}}, \delta \gamma' \delta f_{\text{DF}}) = (f_{\text{DF}}, \delta \gamma \delta f_{\text{DF}}) - (f_{\text{DF}}, \delta f_{\text{DF}}) \\ &\geq -(f_{\text{DF}}, \Lambda_- f_{\text{DF}}) - (f_{\text{DF}}, f_{\text{DF}}) = -(f_{\text{DF}}, f_{\text{DF}}) \geq -(f, f), \end{aligned}$$

wobei wir $f_{\text{DF}} := \delta f$ gesetzt haben.

Es seien nun $\lambda_i, i = 1, \dots, N$, und $f_i, i = 1, \dots, N$, Eigenwerte und die entsprechenden Eigenvektoren von $\delta \gamma' \delta$, und $\lambda_i, i > N$, sowie $f_i, i > N$, Eigenwerte und die entsprechenden Eigenvektoren von $P_+ \gamma' P_+$. Dann gilt

$$\operatorname{tr} D_{g,\alpha}^{(\delta)} \delta \gamma' \delta = \sum_{i=1}^N \lambda_i (f_i, D_{g,\alpha}^{(\delta)} f_i) \geq \epsilon_N^{(\delta)} \operatorname{tr} \delta \gamma' \delta \geq -\epsilon_N^{(\delta)} \operatorname{tr} P_+ \gamma' P_+$$

und

$$\operatorname{tr} D_{g,\alpha}^{(\delta)} P_+ \gamma' P_+ = \sum_{i=N+1}^{\infty} \lambda_i (f_i, D_{g,\alpha}^{(\delta)} f_i) \geq \epsilon_{N+1}^{(\delta)} \operatorname{tr} P_+ \gamma' P_+.$$

Es folgt

$$\begin{aligned}
(IV.13) \quad \mathcal{E}_{g,\alpha}(\gamma) - \mathcal{E}_{g,\alpha}(\delta) &\geq (1 - \frac{\pi}{4}c_{g,\alpha,N}\alpha) \operatorname{tr} D_{g,\alpha}^{(\delta)} P_+ \gamma' P_+ \\
&\quad + (1 + \frac{\pi}{4}c_{g,\alpha,N}\alpha) \operatorname{tr} D_{g,\alpha}^{(\delta)} \delta \gamma' \delta \\
&\geq (1 - \frac{\pi}{4}c_{g,\alpha,N}\alpha) \epsilon_{N+1}^{(\delta)} \operatorname{tr} P_+ \gamma' P_+ - (1 + \frac{\pi}{4}c_{g,\alpha,N}\alpha) \epsilon_N^{(\delta)} \operatorname{tr} P_+ \gamma' P_+ \\
&= [(1 - \frac{\pi}{4}c_{g,\alpha,N}\alpha) \epsilon_{N+1}^{(\delta)} - (1 + \frac{\pi}{4}c_{g,\alpha,N}\alpha) \epsilon_N^{(\delta)}] \operatorname{tr} P_+ \gamma' P_+.
\end{aligned}$$

Wegen $\operatorname{tr} P_+ \gamma' P_+ = \operatorname{tr} P_+ \gamma P_+ \geq 0$ zeigt das die Behauptung. \square

Wir setzen $a := (2\pi N^2 - 1/8\pi^2 N) \epsilon_N^0$, $b := ((4N - 1/4\pi - 1/2\pi N) \epsilon_N^0 - (4N + 1/4\pi) \epsilon_{N+1}^0) b_g$ und $c := (\epsilon_{N+1}^0 - \epsilon_N^0) (b_g)^2$ und definieren damit

$$k_{g,N} := (-b - \sqrt{b^2 - 4ac}) (2a)^{-1}.$$

KOROLLAR IV.14 ([87], Corollary 4). *Es sei $N \in \text{CS}$ und δ wie in Satz IV.13. Ferner sei $\alpha \leq \min\{k_{g,N}, \frac{b_g}{4N}\}$. Dann gilt*

$$(IV.14) \quad \mathcal{E}_{g,\alpha}(\delta) = E_N^{\text{DF}} := \inf\{\mathcal{E}_{g,\alpha}(\gamma) \mid \gamma \in \tilde{\mathcal{S}}_{\partial N}^{(\delta)}\}.$$

BEWEIS. Es reicht, Gleichung (IV.12) in Satz IV.13 zu verifizieren. Wegen Lemma IV.3 reicht es,

$$(1 - \frac{\pi}{4}c_{g,\alpha,N}\alpha) \epsilon_{N+1}^0 - (1 + \frac{\pi}{4}c_{g,\alpha,N}\alpha) \cdot (1 + \frac{\pi}{2}\alpha N b_g^{-1}) \epsilon_N^0 \geq 0$$

zu zeigen. Diese Bedingung führt zu der quadratischen Gleichung

$$\begin{aligned}
(2\pi N^2 - \frac{1}{8}\pi^2 N) \epsilon_N^0 \alpha^2 + ((4N - \frac{1}{4}\pi - \frac{1}{2}\pi N) \epsilon_N^0 - (4N + \frac{1}{4}\pi) \epsilon_{N+1}^0) b_g \alpha \\
+ (\epsilon_{N+1}^0 - \epsilon_N^0) (b_g)^2 = 0,
\end{aligned}$$

deren relevante kleinere Lösung durch $k_{g,N}$ gegeben ist. \square

Wir schließen das Kapitel mit einigen Bemerkungen:

- (1) Im Sinne von Mittleman ist die Grundzustandsenergie E_N^M von N relativistischen Elektronen im Feld eines Kerns mit Kopplungskonstante g in Hartree-Fock-Näherung definiert durch

$$(IV.15) \quad E_N^M := \sup\{\inf\{\mathcal{E}_{g,\alpha}(\gamma) \mid \gamma \in \tilde{\mathcal{S}}_{\partial N}^{(\delta)}\} \mid \delta \in F, \delta = \delta^2, \operatorname{tr} \delta = N\}.$$

Korollar IV.14 zusammen mit Gleichung (IV.11) zeigt unter den dort gemachten Annahmen, dass $E_N^M \geq E_N^{\text{DF}}$ gilt. Die umgekehrte Ungleichung gilt – ohne Einschränkung auf abgeschlossene Schalen – für hinreichend kleine α (Barbaroux et al. [18, Formel (13)]). Folglich stimmen diese beiden Definitionen der Grundzustandsenergien für hinreichend kleine α überein. In der Tat zeigt das eine Vermutung von Barbaroux-Esteban-Séré für diesen Fall. (Siehe Barbaroux et al. [18, Theorem 5]).

- (2) Da diese Vermutung im Falle offener Schalen falsch ist (siehe [18, 20]), zeigt die vorangehende Bemerkung auch, dass die Einschränkung auf den Fall abgeschlossener Schalen nicht nur technischer Art ist.
- (3) Unter der Annahme, dass δ eine sphärisch symmetrische Dichte ρ_δ hat, lässt sich die Behauptung von Korollar IV.14 sogar für größere α zeigen, indem Lemma IV.4 statt Lemma IV.3 verwendet wird. Die Ergebnisse dieser numerischen Berechnung sind zusätzlich in Abbildung IV.3 dargestellt.

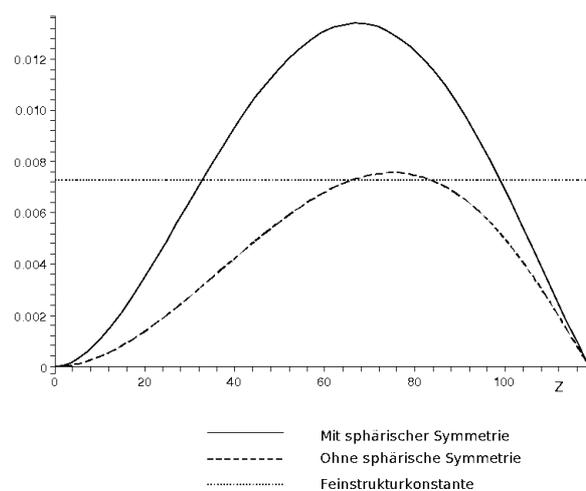


ABBILDUNG IV.3. Der maximale Wert von α , für den wir garantieren können, dass eine Projektion $\delta \in DF$ auf die kleinsten Eigenwerte von $D^{(\delta)}$ die Energie minimiert, in Abhängigkeit von der Kernladung $Z = 137g$ und für $N = 2$.

Teil 3

Atome in Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld

KAPITEL V

Das Pauli-Fierz-Modell

In diesem Teil untersuchen wir Atome mit einem oder mehreren Elektronen in Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld in zweiter Quantisierung in Coulomb-Eichung. Von Interesse ist dabei insbesondere die Lebensdauer angeregter Zustände. In Kapitel V betrachten wir das Pauli-Fierz-Modell, in dem die Elektronen nicht-relativistisch durch den Schrödinger-Operator beschrieben werden. Dieses Modell wurde eingehend von Bach, Fröhlich und Sigal [9, 10, 12, 13], von Griesemer, Lieb und Loss [68], von Fröhlich, Griesemer und Schlein [58, 58, 59, 60], sowie vielen weiteren untersucht. Bach et al. [13] haben unter anderem die Lebensdauer angeregter Zustände betrachtet. Sie zeigen, dass die Überlebenswahrscheinlichkeit (für kleine Kopplungskonstanten) durch einen in der Zeit exponentiell abfallenden Term und einen polynomialen Term nach oben beschränkt ist. Wir verwenden und erweitern die Analysis von Bach, Fröhlich und Sigal, um (ebenfalls für kleine Kopplungskonstanten) eine obere und untere Schranke an die Überlebenswahrscheinlichkeit zu beweisen. Auf die inhaltlichen und technischen Unterschiede zu der Arbeit [13] werden wir in Bemerkung V.13 in Kapitel V.3 im Detail eingehen. Abou Salem, Faupin, Fröhlich und Sigal [1] haben wenige Monate nach [79] ein ähnliches Ergebnis mit etwas anderen Methoden bewiesen. Die Darstellung in Kapitel V folgt [79].

Wir bemerken, dass wir in Kapitel VI ein relativistisches Elektron im Feld eines Atomkerns betrachten. Sowohl im Pauli-Fierz-Modell als auch im relativistischen Modell stimmen unsere Formeln an den führenden exponentiellen Term für den Zerfall mit den Vorhersagen der Goldenen Regel (siehe [124, Kapitel XII.6] und [24, Abschnitt 59 ff.]) überein.

In beiden Modellen werden wir wie in [12, 13] komplex dilatierete Operatoren verwenden. Da diese Operatoren nicht normal sind, existiert keine hinreichend gute Störungstheorie für die Spektren dieser Operatoren. Wie in [12, 13] werden wir daher die Technik der Feshbach-Projektion in Verbindung mit Abschätzungen an den numerischen Wertebereich verwenden.

Die sogenannte Feshbach-Methode ist nach dem Physiker Herman Feshbach benannt, der diese zur Behandlung von Resonanzen in der Kernphysik verwendet hat [52, Gleichung (2.14)]. Auch Howland [85] verwendet die Methode bzw. den Feshbach-Operator unter der Bezeichnung „Livšic-Matrix“, da Livšic [110, 109] die Methode in der Streutheorie verwendet hatte. Darüber hinaus ist die Methode unter dem Namen „Schur-Komplement“ bekannt. Diese Bezeichnung scheint auf Haynsworth [80]

zurückzugehen, die die Bezeichnung in Anlehnung an die Schursche Determinantenformel verwendete. Für eine detaillierte Übersicht über die Geschichte des Schur-Komplements und seine Anwendungen in der Mathematik verweisen wir auf [148]. Auch Menniken und Motovilov [113, 112] verwenden das Schur-Komplement unter der Bezeichnung „Transfer-Funktion“ zur Behandlung von Resonanzen bei 2×2 -Operator-Matrizes.

Man beachte, das wir in diesem und dem folgenden Kapitel bei Operatoren der Form PAP , wobei A ein abgeschlossener Operator ist und P eine Projektion mit $\text{Dom } A \subset \text{Ran } P$, nicht zwischen den Operatoren PAP und $PAP|_{\text{Ran } P}$ unterscheiden. Es ist aus dem Zusammenhang ersichtlich, welcher der Operatoren gemeint ist. Skalarprodukte werden wir in diesem und dem folgenden Kapitel mit $\langle \cdot, \cdot \rangle$ bezeichnen.

V.1. Modell und Definitionen

Der Hilbert-Raum des Pauli-Fierz-Modells ist

$$\mathcal{H} := \mathcal{H}_{\text{el}} \otimes \mathcal{F},$$

wobei

$$\mathcal{H}_{\text{el}} := \mathcal{A}_N L^2[(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{Z}_2)]^N$$

der Hilbert-Raum für N Elektronen mit Spin und

$$\mathcal{F} := \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{S}_N L^2[(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{Z}_2)]^N$$

der Fock-Raum (mit Vakuum Ω) des quantisierten elektromagnetischen Feldes unter Berücksichtigung der zwei Polarisationen der Photonen ist. \mathcal{A}_N und \mathcal{S}_N sind die Projektionen auf die Teilräume der Funktionen, die anti-symmetrisch bzw. symmetrisch unter einer Permutation der Variablen sind. Der Operator

$$H'_{\text{el}} := -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{3N} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\sum_{j=1}^N \frac{-\mathfrak{z}}{|x_j|} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{|x_i - x_j|} \right],$$

der auf $\text{Dom}(H'_{\text{el}}) := \mathcal{H}_{\text{el}} \cap H^2[(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{Z}_2)]^N$ selbstadjungiert ist, beschreibt die Elektronen, und der Operator für das gesamte System ist

$$H'_g := \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^N : [\sigma_j \cdot (-i\hbar\nabla_{x_j} - eA'_{\kappa'}(x_j))]^2 : + H'_f + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\sum_{j=1}^N \frac{-\mathfrak{z}}{|x_j|} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{|x_i - x_j|} \right],$$

wobei \mathfrak{z} die Kernladungszahl ist, $e < 0$ die Elektronenladung, \hbar die reduzierte Planck-Konstante, ϵ_0 die Dielektrizitätskonstante des Vakuums, m die Masse des Elektrons, σ_j der Vektor der Pauli-Matrizes für das j -te Elektron, und $: \dots :$ Normalordnung bedeutet.

Die kinetische Energie der Photonen ist

$$(V.1) \quad H'_f := \hbar c \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk |k| a_\mu'^*(k) a'_\mu(k),$$

wobei die $a_\mu'^*(k)$ und $a'_\mu(k)$ die üblichen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren sind. Das Strahlungsfeld in zweiter Quantisierung ist $A'_{\kappa'}(x) := A'_{\kappa'}(x)_+ + A'_{\kappa'}(x)_-$, wobei

$$(V.2) \quad A'_{\kappa'}(x)_+ := \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk \kappa'(|k|) \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 c |k| (2\pi)^3}} \varepsilon'_\mu(k) e^{-ik \cdot x} a_\mu'^*(k)$$

$$(V.3) \quad A'_{\kappa'}(x)_- := \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk \kappa'(|k|) \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 c |k| (2\pi)^3}} \varepsilon'_\mu(k) e^{i\alpha k \cdot x} a'_\mu(k)$$

gilt. Hierbei sind $\varepsilon'_\mu(k)$, $\mu = 1, 2$, die Polarisationsvektoren des Photons, die nur von der Richtung von k abhängen, und c ist die Lichtgeschwindigkeit.

Wir benützen hier SI-Einheiten; für physikalische Details zu diesen Operatoren verweisen wir auf [34, 35]. Wir setzen $a_0 := \alpha^{-1}(\frac{\hbar}{mc})$ (Bohr-Radius), $\zeta := a_0$ und $\xi^{-1} := \frac{\alpha}{a_0}$. Des Weiteren ist $\kappa'(r) := \kappa(r\xi)$ eine Abschneidefunktion, die von der Sommerfeldschen Feinstrukturkonstanten $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$ abhängt. κ ist eine Funktion, die auf dem Intervall $[0, \infty)$ positiv ist, die Bedingung $\kappa(r) \rightarrow 1$ für $r \rightarrow 0$ erfüllt und eine analytische Fortsetzung in einen Kegel um die positive reelle Achse hat, die beschränkt ist und schneller als jedes inverse Polynom abfällt, z.B. $\kappa(r) := e^{-r^4}$. Wir folgen [13, 12] und skalieren den Operator mit der Transformation $x_j \rightarrow \zeta x_j$ und $k \rightarrow \xi^{-1}k$. Die zugehörige unitäre Abbildung bezeichnen wir mit U . Nach dieser Transformation werden die Positionen der Elektronen in Einheiten von a_0 gemessen, die Wellenvektoren der Photonen in Einheiten von $\frac{\alpha}{a_0}$ und Energien in Einheiten von 2Ry , wobei das Rydberg definiert ist durch $\text{Ry} := \frac{\alpha^2 m c^2}{2}$. Diese Wahl der Skalierung bzw. der physikalischen Einheiten ist für die Beschreibung von photonischen Übergängen zwischen angeregten Zuständen von Atomen zweckmäßig. Die Einheit der Photonenkoordinaten ist so nämlich gerade von der Ordnung der Radien der klassischen Elektronenumlaufbahnen, die Einheit der Energie von der Ordnung der Energieniveaudifferenzen des Atoms und die Einheit der photonischen Wellenvektoren gerade von der Ordnung der Wellenvektoren der Lichtquanten, die bei den betrachteten Übergängen ausgesandt werden. Die Skalierung unterscheidet sich von der in [13, 12] gewählten um einen Faktor zwei, da dies den Vergleich mit dem relativistischen Modell in Kapitel VI vereinfacht.

Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren transformieren sich gemäß

$$U a'_\mu(k) U^{-1} = \xi^{3/2} a_\mu(\xi k), \quad U a_\mu'^*(k) U^{-1} = \xi^{3/2} a_\mu'^*(\xi k).$$

Ferner setzen wir

$$\varepsilon_\mu(k) := \varepsilon'_\mu(\xi^{-1}k), \quad \mu = 1, 2.$$

Folglich erhalten wir

$$U H'_g U^{-1} = \alpha^2 (m c^2) H_g,$$

mit $H_g := H_0 + W_g$ und $H_0 := H_{\text{el}} \otimes \mathbf{1}_f + \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f$, wobei

$$(V.4) \quad H_{\text{el}} := -\frac{1}{2}\Delta_{3N} + \sum_{j=1}^N \frac{-3}{|x_j|} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{|x_i - x_j|}.$$

Hierbei ist

$$(V.5) \quad H_f := \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk |k| a_\mu^*(k) a_\mu(k)$$

und die Wechselwirkung ist gegeben durch

$$W_g := \sum_{j=1}^N \left\{ \alpha^{3/2} A_\kappa(\alpha x_j) \cdot (-i \nabla_{x_j}) + \frac{\alpha^3}{2} : A_\kappa^2(\alpha x_j) : \right. \\ \left. + \frac{\alpha^{5/2}}{2} \sigma_j \cdot (\nabla \times A_\kappa)(\alpha x_j) \right\},$$

wobei $A_\kappa(x) := A_\kappa(x)_+ + A_\kappa(x)_-$ mit

$$(V.6) \quad A_\kappa(x)_+ := \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} \frac{dk \kappa(|k|)}{\sqrt{4\pi^2|k|}} \varepsilon_\mu(k) e^{-ik \cdot x} a_\mu^*(k)$$

$$(V.7) \quad A_\kappa(x)_- := \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} \frac{dk \kappa(|k|)}{\sqrt{4\pi^2|k|}} \varepsilon_\mu(k) e^{ik \cdot x} a_\mu(k)$$

das transformierte Strahlungsfeld in zweiter Quantisierung ist.

Wie in [13] setzen wir $g := \alpha^{3/2}$. Im Folgenden betrachten wir die Kopplungskonstante $g := \alpha^{3/2} > 0$ als den Störungsparameter. Wir nehmen an, dass das Spektrum von H_{el} die Struktur

$$\sigma(H_{\text{el}}) = \{E_1, E_2, \dots\} \cup [\Sigma, \infty)$$

hat, wobei $\Sigma := \inf \sigma_{\text{ess}}(H_{\text{el}})$ gilt und $E_1 < E_2 < \dots$ (mindestens zwei) Eigenwerte sind, die sich höchstens bei Σ häufen. Dies ist für $N \leq 3$ erfüllt [149], jedoch nicht für $N \geq 23 + 1$ [105].

Wir betrachten einen (festen) Eigenwert E_n of H_{el} mit $n \geq 2$. Für $0 < \epsilon < 1/3$ setzen wir $\rho_0 := g^{2-2\epsilon}$ und $\mathcal{A} := [E_n - \delta/2, E_n + \delta/2] + i[-g^{2-\epsilon}, \infty)$, wobei $\delta := \text{dist}(E_n, \sigma(H_{\text{el}}) \setminus \{E_n\}) > 0$ ist. Die Abhängigkeit der Menge \mathcal{A} von g unterdrücken wir zur Verkürzung der Notation. Wir definieren Operatoren

$$(V.8) \quad H_{\text{el}}(\theta) := \mathcal{U}_{\text{el}}(\theta) H_{\text{el}} \mathcal{U}_{\text{el}}(\theta)^{-1}, \quad H_g(\theta) := \mathcal{U}(\theta) H_g \mathcal{U}(\theta)^{-1} \text{ und} \\ W_g(\theta) := \mathcal{U}(\theta) W_g \mathcal{U}(\theta)^{-1}$$

für reelle θ , wobei $\mathcal{U}(\theta)$ die unitäre Gruppe ist, die vom Erzeuger der Dilatationen generiert wird. Sie ist so definiert, dass die Koordinaten der Elektronen gemäß $x_j \mapsto e^\theta x_j$ dilatiert werden, und die Impulse der Photonen gemäß $k \mapsto e^{-\theta} k$. Man kann zeigen [13, Corollary 1.3, Corollary 1.4], dass die Operatoren in Gleichung (V.8) für $|\theta| \leq \theta_0$ mit einem $\theta_0 > 0$ holomorphe Familien von Operatoren sind. Wir setzen $\theta := i\vartheta$ mit $\vartheta > 0$. Ferner ist $\mathcal{U}_{\text{el}}(\theta)$ die oben beschriebene Dilatation auf dem elektronischen Hilbert-Raum.

Wir definieren (mit $r > 0$ klein genug) $P_{\text{el},n'}(\theta) := -(2\pi i)^{-1} \int_{|E_{n'} - z| = r} (H_{\text{el}}(\theta) - z)^{-1} dz$ als Projektion auf den Eigenraum von $H_{\text{el}}(\theta)$ zum Eigenwert $E_{n'}$ und setzen $\bar{P}_{\text{el},n'}(\theta) := 1 - P_{\text{el},n'}(\theta)$. Ferner definieren wir $P := P_{\text{el},n}(\theta) \otimes \chi_{H_f \leq \rho_0}$ und $\bar{P} := 1 - P(\theta)$. Zur Abkürzung schreiben wir $P_{\text{el},n'} := P_{\text{el},n'}(0)$.

Wir folgen [13] und verwenden den Feshbach-Operator

$$(V.9) \quad \mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z) := P(\theta)(H_g(\theta) - z)P(\theta) \\ - P(\theta)W_g(\theta)\bar{P}(\theta)[\bar{P}(\theta)(H_g(\theta) - z)\bar{P}(\theta)]^{-1}\bar{P}(\theta)W_g(\theta)P(\theta).$$

Die wichtigsten Eigenschaften dieses Operators fassen wir in Anhang B ohne Beweis zusammen. Für Details verweisen wir den Leser auf [12, Abschnitt IV] und [13] sowie auf Kapitel VI, wo wir analoge Aussagen für das relativistische Modell betrachten werden.

Bach, Fröhlich und Sigal [12, 13] haben gezeigt, dass der Feshbach-Operator in einem gewissen Sinne durch die Operatoren

$$(V.10) \quad \tilde{Z}^{od}(\alpha) := \lim_{\epsilon \downarrow 0} \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk P_{\text{el},n} w_{0,1}(k, \mu; 0) \\ \times \bar{P}_{\text{el},n} [\bar{P}_{\text{el},n} H_{\text{el}} - E_j + |k| - i\epsilon]^{-1} \bar{P}_{\text{el},n} w_{1,0}(k, \mu; 0) P_{\text{el},n}$$

und

$$(V.11) \quad \tilde{Z}^d(\alpha) := \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} \frac{dk}{|k|} P_{\text{el},n} w_{0,1}(k, \mu; 0) P_{\text{el},n} w_{1,0}(k, \mu; 0) P_{\text{el},n}$$

approximiert werden kann. Die Kopplungsfunktionen $w_{0,1}(k, \mu; \theta)$ und $w_{1,0}(k, \mu; \theta)$ werden wir später mit $\theta \neq 0$ benötigen. Wenn wir den Impuls des j -ten Elektrons mit p_j bezeichnen, dann sind die Kopplungsfunktionen

$$(V.12) \quad w_{0,1}(k, \mu; \theta) := w_{1,0}(k, \mu; \bar{\theta})^* := \sum_{j=1}^N \{ e^{-\theta} G_{x_j}^{(\theta)}(k, \mu) \cdot p_j + \frac{1}{2} \sigma_j \cdot B_{x_j}^{(\theta)}(k, \mu) \}$$

mit

$$(V.13) \quad G_x^{(\theta)}(k, \mu) := \frac{e^{-\theta} \kappa(e^{-\theta} |k|)}{\sqrt{4\pi^2 |k|}} e^{i\alpha k \cdot x} \epsilon_\mu(k)$$

und

$$(V.14) \quad B_x^{(\theta)}(k, \mu) := \frac{\alpha e^{-2\theta} \kappa(e^{-\theta} |k|)}{i \sqrt{4\pi^2 |k|}} e^{i\alpha k \cdot x} (k \times \epsilon_\mu(k)).$$

Wir setzen

$$(V.15) \quad \tilde{Z}(\alpha) := Z_j^d(\alpha) + Z_j^{od}(\alpha), \quad \tilde{Z}(\alpha; \theta) := \mathcal{U}_{\text{el}}(\theta) \tilde{Z}(\alpha) \mathcal{U}_{\text{el}}(\theta)^{-1}, \\ Z(\theta) := \tilde{Z}(0; \theta) \text{ und } Z := \tilde{Z}(0; 0).$$

Bereits in [13] wurde bemerkt, dass der Realteil der Matrix Z die Lamb-Verschiebung in Übereinstimmung mit Bethes Ergebnis [23] liefert. Die Lamb-Verschiebung wird in Bemerkung VI.3 besprochen, auch wenn ihre mathematische Behandlung nicht Gegenstand dieser Arbeit ist.

Wir betrachten den Feshbach-Operator $\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z)$ als Operator auf $\text{Ran } P$. Ebenso betrachten wir die Operatoren $\tilde{Z}(\alpha) := Z^d(\alpha) + Z^{od}(\alpha)$ und $\tilde{Z}(\alpha, \theta)$ als Operatoren auf $\text{Ran } P_{\text{el},n}$ bzw. $\text{Ran } P_{\text{el},n}(\theta)$.

Wir können nun das Hauptergebnis dieses Kapitels formulieren, das wir in Kapitel V.3 beweisen werden.

SATZ V.1 ([79], Theorem 1). *Es sei $0 < \epsilon < 1/3$ und $g > 0$ klein genug. Es seien ϕ_1 und ϕ_2 normierte Eigenvektoren von H_{el} mit Eigenwert E_n und $\psi_i := \phi_i \otimes \Omega$. Außerdem sei der Imaginärteil $\text{Im } Z := \frac{1}{2i}(Z - Z^*)$ von Z auf $\text{Ran } P_{\text{el},n}$ strikt positiv. Dann gilt mit dem dimensionslosen Zeitparameter $s \geq 0$*

$$\langle \psi_1, e^{-isH_g} \psi_2 \rangle = \langle \phi_1, e^{-is(E_n - g^2 Z)} \phi_2 \rangle + b(g, s),$$

wobei $|b(g, s)| \leq Cg^\epsilon$ für ein $C \geq 0$.

Aus diesem Satz folgt sofort das folgende Korollar:

KOROLLAR V.2 ([79], Corollary 2). *Es gelten die Voraussetzungen von Satz V.1 und es sei $\psi := \phi \otimes \Omega$, wobei $\phi := \phi_1 = \phi_2$ ein Eigenvektor von Z mit Eigenwert Γ ist. Dann gilt, wenn $0 < \tau := g^2 s$ konstant gehalten wird,*

$$\lim_{g \downarrow 0} |\langle \psi, e^{-isH_g} \psi \rangle| = e^{-\tau \text{Im } \Gamma}.$$

Bevor wir uns in den folgenden Abschnitten dem Beweis dieses Ergebnisses widmen werden, halten wir noch einige Beobachtungen fest:

BEMERKUNG V.3. Die Einschränkung $\epsilon < 1/3$ ist rein technischer Natur und auf die Abschätzungen aus [13, 12] zurückzuführen, die im Beweis verwendet werden. Es ist möglich, diese Abschätzungen so zu verbessern, dass auch der Fall $\epsilon = 1/3$ eingeschlossen ist. Wir verzichten jedoch auf die Durchführung dieser langwierigen und technischen Abschätzungen für das Pauli-Fierz-Modell, um die Darstellung nicht unnötig zu verlängern. Stattdessen geben wir für das relativistische Modell in Kapitel VI Abschätzungen, die den Fall $\epsilon = 1/3$ mit einschließen.

BEMERKUNG V.4. Die Aussage des Satzes kann auch mit Hilfe der ursprünglichen Operatoren formuliert werden: Es seien ϕ'_1 und ϕ'_2 normierte Eigenvektoren von H'_{el} mit Eigenwert $\alpha^2 m c^2 E_n$ und $\psi'_i := \phi'_i \otimes \Omega$. Dann gilt $\langle \psi'_1, e^{-it\hbar^{-1}H'_g} \psi'_2 \rangle = \langle \phi'_1, e^{-it\frac{\alpha^2 m c^2}{\hbar}(E_n - g^2 Z)} \phi'_2 \rangle + \mathcal{O}(\alpha^{3\epsilon/2}) = \langle \phi_1, e^{-it\frac{\alpha^2 m c^2}{\hbar}(E_n - g^2 Z)} \phi_2 \rangle + \mathcal{O}(\alpha^{3\epsilon/2})$ mit $\phi_i \otimes \Omega = U[\phi'_i \otimes \Omega]$. Hierbei ist

$$\begin{aligned} Z' := & \frac{\hbar^2}{\alpha^4 m^3 c^2} \left[\lim_{\epsilon \downarrow 0} \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk \frac{\kappa'(|k|)^2}{4\pi^2 |k|} P'_{\text{el},n} \epsilon'_\mu(k) \cdot p' \bar{P}'_{\text{el},n} \right. \\ & \times [\bar{P}'_{\text{el},n} H'_{\text{el}} - \alpha^2 m c^2 E_n + \hbar c |k| - i\epsilon]^{-1} \bar{P}'_{\text{el},n} \epsilon'_\mu(k) \cdot p' P'_{\text{el},n} \\ & \left. + \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} \frac{dk}{\hbar c |k|} \frac{\kappa'(|k|)^2}{4\pi^2 |k|} P'_{\text{el},n} \epsilon'_\mu(k) \cdot p' P'_{\text{el},n} \epsilon'_\mu(k) \cdot p' P'_{\text{el},n} \right]. \end{aligned}$$

$P'_{\text{el},n}$ ist dabei die Projektion auf den Eigenraum von H'_{el} zum Eigenwert $\alpha^2 m c^2 E_n$, und wir haben $p'_j := -i \hbar \nabla_{x_j}$ und $p' := \sum_{j=1}^n p'_j$ gesetzt.

BEMERKUNG V.5. Man beachte, dass die Matrix $\tilde{Z}(\alpha)$ von der Feinstrukturkonstanten α abhängt, da auch die Kopplungsfunktionen in (V.12), (V.13) und (V.14) α -abhängig sind. Wegen des exponentiellen Abfalls der Eigenfunktionen des elektronischen Operators kann $\tilde{Z}(\alpha)$ in eine Potenzreihe in $\alpha = g^{2/3}$ entwickelt werden. Der Term nullter Ordnung entspricht dabei den elektrischen Dipolübergängen (E1-Übergänge), die Terme höherer Ordnung entsprechen magnetischen Dipolübergängen und elektrischen und magnetischen Übergängen höherer Ordnung.

Für ein $C > 0$ gilt

$$(V.16) \quad g^2 \|\tilde{Z}(\alpha; \theta) - Z(\theta)\| \leq Cg^{2+2/3}.$$

Es ist leicht zu sehen, dass der Imaginärteil von Z durch (siehe auch [12, Gleichung (IV.19)]) die Gleichung

$$(V.17) \quad \begin{aligned} \operatorname{Im} Z &= \pi \sum_{n'=1}^{n-1} \sum_{\mu=1,2} \int_{|\omega|=1} d\omega (E_{n'} - E_n)^2 \\ &\quad \times \frac{\kappa(E_n - E_{n'})^2}{4\pi^2(E_n - E_{n'})} P_{\text{el},n}[\epsilon_\mu(\omega) \cdot p] P_{\text{el},n'}[\epsilon_\mu(\omega) \cdot p] P_{\text{el},n} \\ &= \frac{2}{3} \sum_{n'=1}^{n-1} (E_n - E_{n'}) \kappa(E_n - E_{n'})^2 P_{\text{el},n} p P_{\text{el},n'} p P_{\text{el},n} \end{aligned}$$

gegeben ist. Im letzten Schritt haben wir dabei die Beziehungen

$$\sum_{\mu=1,2} (\epsilon_\mu(\omega))_m (\epsilon_\mu(\omega))_n = \delta_{m,n} - \omega_m \omega_n$$

und

$$\int_{|\omega|=1} d\omega \omega_m \omega_n = \frac{4\pi \delta_{m,n}}{3}$$

verwendet, wobei $\delta_{m,n}$ das Kronecker-Symbol ist. Ferner ist $p := \sum_{j=1}^N p_j$ und der Ausdruck $P_{\text{el},n} p P_{\text{el},n'} p P_{\text{el},n}$ bedeutet ein euklidisches Skalarprodukt. Analog setzen wir $x := \sum_{j=1}^N x_j$. Mit der Kommutatorbeziehung

$$[x, H_{\text{el}}] = ip$$

erhalten wir

$$(V.18) \quad \operatorname{Im} Z = \frac{2}{3} \sum_{n'=1}^{n-1} (E_n - E_{n'})^3 \kappa(E_n - E_{n'})^2 P_{\text{el},n} x P_{\text{el},n'} x P_{\text{el},n}.$$

Wir analysieren Gleichung (V.18) für das Wasserstoffatom in Kapitel V.4, wo wir insbesondere zeigen werden, dass $\operatorname{Im} Z$ in der Tat strikt positiv ist außer für $n = 2$. Für $n = 2$ hat $\operatorname{Im} Z$ einen Eigenwert null, da der $2s$ -Zustand des Wasserstoffs nicht über elektrische Dipolübergänge zerfallen kann. Die $2p$ -Zustände können jedoch über elektrische Dipolübergänge zerfallen. Es scheint ein interessantes offenes Problem zu sein, auch diesen Fall zu behandeln.

Man beachte, dass die Zerfallsrate proportional zu $g^2 \alpha^2 \propto \alpha^5$ ist, in Übereinstimmung mit der Literatur in der Physik (siehe zum Beispiel [24, Abschnitt 59]).

BEMERKUNG V.6. Die Eigenvektoren von H_{el} sind analytische Vektoren für den Erzeuger der Dilatationen, und daher ist

$$\mathcal{U}_{\text{el}}(\theta) : \ker(H_{\text{el}}(0) - E_j) \rightarrow \ker(H_{\text{el}}(\theta) - E_j)$$

eine beschränkte und beschränkt invertierbare Abbildung zwischen endlich-dimensionalen Vektorräumen. (Letzteres ist wahr für $|\operatorname{Im} \theta| < \pi/2$, siehe [2, 14] sowie [124, Kapitel XIII.10]) Folglich sind die Matrizes $Z(0)$ und $Z(\theta)$ ähnlich. Insbesondere sind die beschränkten Operatoren $[-g^2 Z(0) \otimes \mathbf{1}_f + e^{-\theta} \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f]_{\operatorname{Ran} P(0)}$ und $[-g^2 Z(\theta) \otimes \mathbf{1}_f + e^{-\theta} \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f]_{\operatorname{Ran} P(\theta)}$ ähnlich (vergleiche [13, Abschnitt 3]). Wir werden diese Tatsache im Beweis von Satz V.1 und in Kapitel V.3 benützen.

V.2. Abschätzungen an den numerischen Wertebereich

Wie in [13] benötigen wir Abschätzungen an den numerischen Wertebereich und die Norm der Inversen verschiedener Operatoren. Wir benützen zahlreiche Aussagen und Ergebnisse, die von Bach, Fröhlich und Sigal [13, 12] bewiesen wurden und ohne Beweis in Anhang B.2 zusammengefasst sind. Die meisten dieser Aussagen werden wir in Kapitel VI für das relativistische Modell beweisen.

Wir benützen die folgenden Definitionen aus [13] (siehe auch Kapitel III.2.5 für den Fall des Dirac-Operators): Für $\eta > 0$ mit $E_n + \delta/2 < \Sigma - \eta$ definieren wir $P_{\text{disc}}(\theta) := \sum_{i: E_i \leq \Sigma - \eta} P_i(\theta)$ und $\bar{P}_{\text{disc}}(\theta) := 1 - P_{\text{disc}}(\theta)$.

Außerdem benötigen wir den Operator (siehe [12, Gleichung (IV.67)])

$$(V.19) \quad Q^{(\theta)}(z) := \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk P(\theta)[w_{0,1}(k, \mu; \theta) \otimes \mathbf{1}_f] \\ \times \left[\frac{\bar{P}(\theta)(|k|)}{H_{\text{el}}(\theta) + e^{-i\vartheta}(H_f + |k|) - z} \right] [w_{1,0}(k, \mu; \theta) \otimes \mathbf{1}_f] P(\theta),$$

definiert auf $\text{Ran } P(\theta)$ und für $z \in \mathcal{A}$. Wir haben hierbei die Definition $\bar{P}(\theta)(|k|) := \bar{P}_{\text{el},j}(\theta) \otimes \mathbf{1}_f + P_{\text{el},j}(\theta) \otimes \chi_{H_f + |k| \geq \rho_0}$ benützt. Des Weiteren werden wir den Operator $Q_0^{(\theta)}(z)$ auf $\text{Ran } P_{\text{el},n}(\theta)$ benützen, der für alle $\phi \in \text{Ran } P_{\text{el},n}(\theta)$ durch $[Q_0^{(\theta)}(z)\phi] \otimes \Omega := Q^{(\theta)}(z)[\phi \otimes \Omega]$ definiert ist. Er ist explizit gegeben durch die Formel

$$(V.20) \quad Q_0^{(\theta)}(z) \\ = \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk \chi_{|k| \geq \rho_0} P_{\text{el},n}(\theta) w_{0,1}(k, \mu; \theta) \left[\frac{P_{\text{el},n}(\theta)}{E_n + e^{-i\vartheta}|k| - z} \right] w_{1,0}(k, \mu; \theta) P_{\text{el},n}(\theta) \\ + \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk P_{\text{el},n}(\theta) w_{0,1}(k, \mu; \theta) \left[\frac{\bar{P}_{\text{el},n}(\theta)}{H_{\text{el}}(\theta) + e^{-i\vartheta}|k| - z} \right] w_{1,0}(k, \mu; \theta) P_{\text{el},n}(\theta).$$

Wir bemerken, dass beide Operatoren für $z \in \mathcal{A}$ holomorph sind. Das folgt aus der Tatsache, dass die Resolventen in den Definitionen der Operatoren gleichmäßig in $z \in \mathcal{A}$ beschränkt werden können. (Siehe den Beweis von Lemma V.7 für einen Beweis im Falle von $Q_0^{(\theta)}(z)$. Der Beweis für $Q^{(\theta)}(z)$ verläuft ähnlich und benützt zusätzlich den Spektralsatz für H_f .)

Man beachte, dass wegen der Annahme $\text{Im } Z > 0$ in Satz V.1 eine Konstante $c > 0$ existiert mit $\text{Im } Z \geq c$. Da Z beschränkt ist, gibt es Konstanten $a, b > 0$ so dass $\text{NumRan } Z$ gemäß $\text{NumRan } Z \subset A(c, a, b)$ lokalisiert ist, wobei die Menge $A(c, a, b)$ durch $A(c, a, b) := ic + [-a, a] + i[0, b]$ definiert ist (siehe Abbildung V.1). Wir setzen $\nu := \min\{\vartheta, \arctan(c/(2a))\}$.

Schließlich definieren wir für $w \in \mathbb{C}$ und $r > 0$ die Menge $D(w, r) := \{z \in \mathbb{C} \mid |z - w| < r\}$, und für $A \subset \mathbb{C}$ setzen wir $D(A, r) := \{z \in \mathbb{C} \mid \text{dist}(z, A) < r\}$. Das Symbol $[z, w]$ bezeichnet entweder die Strecke zwischen $z \in \mathbb{C}$ und $w \in \mathbb{C}$ oder eine lineare Kontour von $z \in \mathbb{C}$ nach $w \in \mathbb{C}$. Entsprechend ist $[z_1, w_1] + [z_2, w_2]$ entweder als Summe der Mengen $[z_1, w_1] \subset \mathbb{C}$ und $[z_2, w_2] \subset \mathbb{C}$ zu verstehen, oder als Zusammensetzung der entsprechenden Wege.

Da die operatorwertige Funktion $Q_0^{(\theta)}$ für die Lokalisierung der Polterme im Beweis der Zeitentwicklung entscheidend ist, benötigen wir einige Eigenschaften dieser Funktion:

LEMMA V.7 ([79], Lemma 3). *Es sei $0 < \vartheta$ genügend klein und $g^\epsilon / \sin \vartheta \leq 1/2$. Dann ist $Q_0^{(\theta)}(z)$ gleichmäßig beschränkt für $z \in \mathcal{A}$.*

BEWEIS. Der Beweis folgt wie in [12, Kapitel IV], jedoch unter Verwendung der folgenden Abschätzungen: Für den ersten Summanden in Gleichung (V.20) benützen wir die Abschätzung $|e^{-i\vartheta}|k| + E_n - z| \geq |\operatorname{Im}(e^{-i\vartheta}|k| + E_n - z)| \geq |\sin \vartheta|k| - g^{2-\epsilon}| \geq |\sin \vartheta| \cdot ||k| - \rho_0/2| \geq 1/2 \sin \vartheta|k|$, die wegen $|k| \geq \rho_0$ gilt. Für den zweiten Summanden in (V.20) beobachten wir, dass für alle $E_{n'}$ mit $n' \neq n$ die Abschätzung $|E_{n'} + e^{-\theta}|k| - z| \geq \sin \vartheta \delta/2 - g^{2-\epsilon} \geq 1/4\delta \sin \vartheta$ gilt, und dass aus Satz B.3

$$\|(H_{\text{el}}(\theta) - (z - e^{-i\vartheta}|k|))^{-1} \bar{P}_{\text{disc}}(\theta)\| \leq \frac{2}{\Sigma - \eta - \operatorname{Re} z + \cos \vartheta|k|}$$

folgt. □

Aus diesem Lemma erhält man sofort das folgende Korollar:

KOROLLAR V.8 ([79], Corollary 4). *Es gibt eine Konstante $C > 0$, so dass für alle $z \in \mathcal{A}$ die Abschätzung*

$$\operatorname{NumRan}(E_n - g^2 Q_0^{(\theta)}(z)) \subset D(E_n, C \cdot g^2)$$

gilt.

Wir benützen das folgende Lemma, um die Inverse des Feshbach-Operators zu kontrollieren:

LEMMA V.9 ([79], Lemma 5). *Es sei A ein beschränkter Operator auf einem Banach-Raum und es sei A' ähnlich zu A , d.h. es gibt einen beschränkten, beschränkt invertierbaren Operator G mit $A' = GAG^{-1}$. Ferner sei B ein anderer beschränkter Operator. Dann gilt für alle $q > 1$ und für alle $z \notin D(\operatorname{NumRan}(A), q \cdot \|B\| \|G\| \cdot \|G^{-1}\|)$ die Abschätzung*

$$\|(A' + B - z)^{-1}\| \leq \|G\| \cdot \|G^{-1}\| \frac{q}{q-1} \cdot \operatorname{dist}(z, \operatorname{NumRan}(A))^{-1}.$$

Insbesondere folgt $\sigma(A' + B) \subset D(\operatorname{NumRan}(A), q \cdot \|B\| \|G\| \cdot \|G^{-1}\|)$.

BEWEIS. Zuerst beobachtet man, dass für alle $z \notin \operatorname{NumRan}(A)$ wegen der Ähnlichkeit von A' und A

$$\|(A' - z)^{-1}\| \leq \|G\| \cdot \|G^{-1}\| \cdot \|(A - z)^{-1}\| \leq \|G\| \cdot \|G^{-1}\| \cdot \operatorname{dist}(z, \operatorname{NumRan}(A))^{-1}$$

gilt. Durch eine Reihenentwicklung erhalten wir für $z \notin D(\operatorname{NumRan}(A), q \cdot \|B\| \cdot \|G\| \cdot \|G^{-1}\|)$ die Identität

$$(A' + B - z)^{-1} = (A' - z)^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} [-B(A' - z)^{-1}]^n.$$

Wir erhalten die Behauptung, indem wir auf beiden Seiten die Norm nehmen. □

Wir folgen [13] und kontrollieren den Feshbach-Operator $\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z)$ für $z \in D(E_n, \rho_0/2)$ wie folgt (siehe Abbildung V.1):

LEMMA V.10 ([79], Lemma 6). *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$ und $0 < g \ll \vartheta$ klein genug. Dann gelten die folgenden Aussagen:*

- a) *Es gibt Konstanten $C_1, C_2 > 0$, so dass $\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z)$ für alle $z \in D(E_n, \rho_0/2) \setminus D(\text{NumRan}(E_n - g^2 Z(0) \otimes \mathbf{1}_f + e^{-\theta} \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f)|_{\text{Ran } P(0)}, C_1 \cdot g^{2+\epsilon})$ beschränkt invertierbar ist und für $\lambda \in [E_n - \rho_0/2, E_n + \rho_0/2]$ die Abschätzung*

$$\|\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - \lambda)^{-1}\| \leq \frac{C_2}{\sin \nu \sqrt{(E_n - \lambda)^2 + cg^4}}$$

gilt, wobei c und ν in Kapitel V.2 nach Gleichung (V.20) definiert wurden. Dasselbe gilt für $(E_n - z - g^2 Q^{(\theta)}(z) \otimes \mathbf{1}_f + e^{-\theta} \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f)|_{\text{Ran } P(\theta)}$.

- b) *Es gibt eine Konstante $C > 0$, so dass für alle $z \in \mathbb{C} \setminus \text{NumRan}(E_n - g^2 Z(0))|_{\text{Ran } P_{\text{el},n}(0)}$ der Operator $(E_n - z - g^2 Z(\theta))|_{\text{Ran } P_{\text{el},n}(\theta)}$ beschränkt invertierbar ist und die Abschätzung*

$$\begin{aligned} & \|[(E_n - z - g^2 Z(\theta))|_{\text{Ran } P_{\text{el},n}(\theta)}]^{-1}\| \\ & \leq \frac{C}{\text{dist}(z, \text{NumRan}(E_n - g^2 Z(0))|_{\text{Ran } P_{\text{el},n}(0)})} \end{aligned}$$

erfüllt. Es gibt Konstanten $C_1, C_2 > 0$, so dass für alle $z \in D(E_n, \rho_0/2) \setminus D(\text{NumRan}(E_n - g^2 Z(0))|_{\text{Ran } P_{\text{el},n}(0)}, C_1 \cdot g^{2+\epsilon})$ der Operator

$(E_n - z - g^2 Q_0^{(\theta)}(z))|_{\text{Ran } P_{\text{el},n}(\theta)}$ beschränkt invertierbar ist und die Abschätzung

$$\begin{aligned} & \|[(E_n - z - g^2 Q_0^{(\theta)}(z))|_{\text{Ran } P_{\text{el},n}(\theta)}]^{-1}\| \\ & \leq \frac{C_2}{\text{dist}(z, \text{NumRan}(E_n - g^2 Z(0))|_{\text{Ran } P_{\text{el},n}(0)})} \end{aligned}$$

erfüllt.

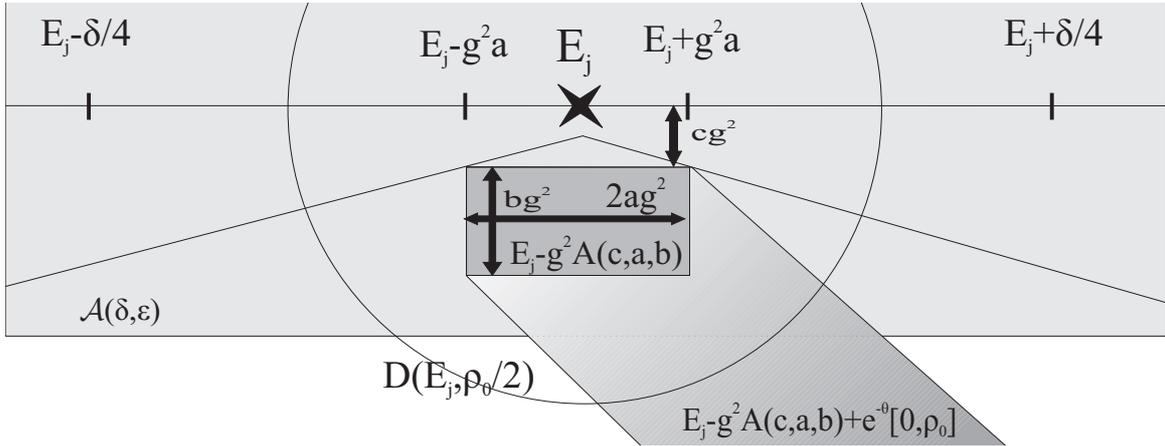


ABBILDUNG V.1. Die numerischen Wertebereiche der Operatoren $E_n - g^2 Z(0)$ und $\text{NumRan}(E_n - g^2 Z(0) \otimes \mathbf{1}_f + e^{-\theta} \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f)|_{\text{Ran } P(0)}$.

BEWEIS. Wegen der Ähnlichkeit (vgl. Bemerkung V.6) von $Z(0)$ und $Z(\theta)$ erhalten wir sofort für ein $C_3 > 0$ die Abschätzung

$$\begin{aligned} & \|[(E_n - z - g^2 Z(\theta) \otimes \mathbf{1}_f + e^{-\theta} \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f)|_{\text{Ran } P(\theta)}]^{-1}\| \\ & \leq C_1 \cdot \text{dist}(z, \text{NumRan}(E_n - g^2 Z(0) \otimes \mathbf{1}_f + e^{-\theta} \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f)|_{\text{Ran } P(0)})^{-1}. \end{aligned}$$

Wegen Lemma B.9, Korollar B.11 und Lemma V.9 gibt es Konstanten $C_1, C_2 > 0$, so dass

$$\begin{aligned} & \|\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z)^{-1}\| \\ & \leq C_2 \operatorname{dist}(z, \operatorname{NumRan}(E_n - g^2 Z(0) \otimes \mathbf{1}_f + e^{-\theta} \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f)|_{\operatorname{Ran} P(0)})^{-1} \end{aligned}$$

gilt für $z \notin D(\operatorname{NumRan}(E_n - g^2 Z(0) \otimes \mathbf{1}_f + e^{-\theta} \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f)|_{\operatorname{Ran} P(0)})$, $C_1 \cdot g^{2+\epsilon}$. Es folgt $\operatorname{NumRan}[(-g^2 Z(0) \otimes \mathbf{1}_f + e^{-\theta} \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f)|_{\operatorname{Ran} P(0)}] \subset -g^2 A(c, a, b) + e^{-\theta} [0, \rho_0]$ (siehe Abbildung V.1). Durch geometrische Überlegungen sehen wir, dass diese Menge in der Menge $-i \frac{\epsilon}{2} g^2 - i \{r e^{i\phi} \mid -(\nu - \frac{\pi}{2}) \leq \phi \leq \nu - \frac{\pi}{2}, r \in [0, \infty)\}$ enthalten ist. Das wiederum impliziert die Behauptung in a).

Die Behauptung in b) zeigt man auf ähnliche Weise. \square

Da die Abschätzungen in Lemma V.10 a) für $\lambda \in [E_n - \delta/2, E_n + \delta/2] \setminus (E_n - \rho_0/2, E_n + \rho_0/2)$ nicht zu gelten scheinen (siehe auch die Bemerkung nach Lemma B.10) beschränken wir im nächsten Lemma $\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - \lambda)^{-1}$ in diesem Gebiet auf andere Weise.

LEMMA V.11 ([79], Lemma 7). *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$ und $0 < g \ll \vartheta$ klein genug. Dann ist $\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z)$ für alle $z \in \mathcal{A} \setminus D(E_n, \rho_0/2)$ beschränkt invertierbar und es gibt eine Konstante $C > 0$, so dass für hinreichend kleine $g > 0$ und für $z \in \mathcal{A} \setminus D(E_n, \rho_0/2)$ der numerische Wertebereich von $\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z)$ wie folgt lokalisiert ist:*

$$\operatorname{NumRan}(\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z) + z) \subset D(E_n + e^{-\theta} [0, \rho_0], Cg^2).$$

Insbesondere gilt für $\lambda \in [E_n - \delta/2, E_n + \delta/2] \setminus (E_n - \rho_0/2, E_n + \rho_0/2)$ die Abschätzung

$$\|\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - \lambda)^{-1}\| \leq \frac{1}{\sin \vartheta |\lambda - E_n| - Cg^2}.$$

Analoge Aussagen gelten, wenn wir $\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z)$ durch $E_n - z - g^2 Q_0^{(\theta)}(z)$ ersetzen.

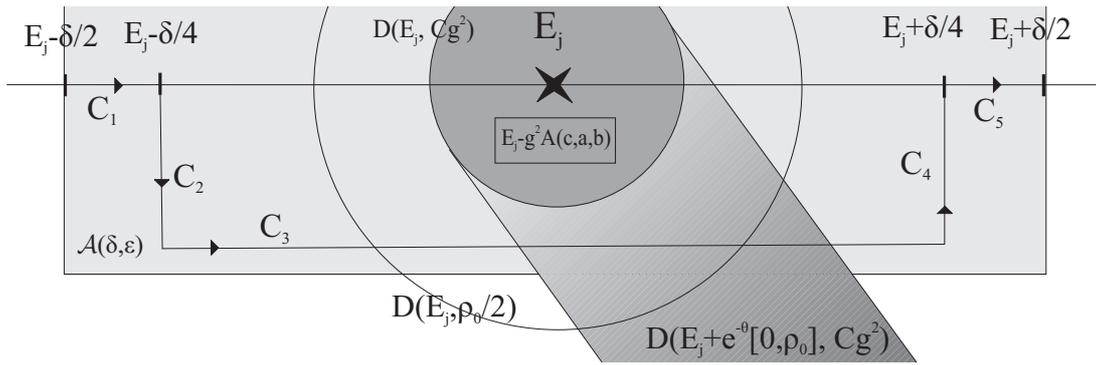


ABBILDUNG V.2. Globale Lokalisierung des numerischen Wertebereichs von $E_n + g^2 Q_0^{(\theta)}(z)$ und des Feshbach-Operators $\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z) + z$.

BEWEIS. Aus Lemma B.9 folgt $\|P(\theta)W_g(\theta)P(\theta)\| = \mathcal{O}(g^{2+\epsilon})$. Daher reicht es, die Abschätzung

$$\|P(\theta)W_g(\theta)\bar{P}(\theta)[\bar{P}(\theta)(H_g(\theta) - z)\bar{P}(\theta)]^{-1}\bar{P}(\theta)W_g(\theta)P(\theta)\| = \mathcal{O}(g^2)$$

zu zeigen.

Wir folgen [13, Beweis von Lemma 3.14] und benützen eine Entwicklung in eine Neumann-Reihe:

$$(V.21) \quad \begin{aligned} & \bar{P}(\theta)[\bar{P}(\theta)(H_g(\theta) - z)\bar{P}(\theta)]^{-1}\bar{P}(\theta) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \bar{P}(\theta)[\bar{P}(\theta)(H_0(\theta) - z)\bar{P}(\theta)]^{-1}\bar{P}(\theta) \\ & \quad \times \left[-\bar{P}(\theta)W_g(\theta)\bar{P}(\theta) [\bar{P}(\theta)(H_0(\theta) - z)\bar{P}(\theta)]^{-1}\bar{P}(\theta) \right]^n. \end{aligned}$$

Diese Entwicklung gilt zunächst für $z \in \mathcal{A}$ mit $\text{Im } z \geq C$ für ein $C > 0$ (unabhängig von g). Wir definieren $B_\theta(\rho) := H_{\text{el}}(\theta) \otimes \mathbf{1}_f - E_n + e^{-\theta}(\mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f + \rho)$ wie in [13] (siehe auch Anhang B.2). Die rechte Seite von Gleichung (V.21) ist gleich

$$(V.22) \quad \begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} |B_\theta(\rho_0)|^{-1/2} |B_\theta(\rho_0)|^{1/2} \bar{P}(\theta) [\bar{P}(\theta)(H_0(\theta) - z)\bar{P}(\theta)]^{-1} \\ & \quad \times \bar{P}(\theta) |B_{\bar{\theta}}(\rho_0)|^{1/2} \left[-|B_{\bar{\theta}}(\rho_0)|^{-1/2} W_g(\theta) |B_\theta(\rho_0)|^{-1/2} |B_\theta(\rho_0)|^{1/2} \bar{P}(\theta) \right. \\ & \quad \left. \times [\bar{P}(\theta)(H_0(\theta) - z)\bar{P}(\theta)]^{-1} \bar{P}(\theta) |B_{\bar{\theta}}(\rho_0)|^{1/2} \right]^n |B_{\bar{\theta}}(\rho_0)|^{-1/2} =: R(z) \end{aligned}$$

für alle $z \in \mathcal{A}$ mit $\text{Im } z \geq C$. Wegen Lemma B.6 und Korollar B.5 konvergiert die Reihe in Gleichung (V.22) gleichmäßig für $z \in \mathcal{A}$ und ist daher eine holomorphe Funktion von z im Innern von \mathcal{A} . Daher gilt

$$\bar{P}(\theta)[\bar{P}(\theta)(H_g(\theta) - z)\bar{P}(\theta)]^{-1}\bar{P}(\theta) = R(z)$$

für alle $z \in \mathcal{A}$ durch holomorphe Fortsetzung und für alle $z \in \mathcal{A}$ gilt

$$(V.23) \quad \begin{aligned} & P(\theta)W_g(\theta)\bar{P}(\theta) [\bar{P}(\theta)(H_g(\theta) - z)\bar{P}(\theta)]^{-1} \bar{P}(\theta)W_g(\theta)P(\theta) \\ &= P(\theta)|B_{\bar{\theta}}(\rho_0)|^{1/2} |B_{\bar{\theta}}(\rho_0)|^{-1/2} W_g(\theta) R(z) W_g(\theta) |B_\theta(\rho_0)|^{-1/2} |B_\theta(\rho_0)|^{1/2} P(\theta). \end{aligned}$$

Man beachte die Identitäten $\| |B_\theta(\rho_0)| P(\theta) \| = \| B_\theta(\rho_0) P(\theta) \|$ und $\| P(\theta) |B_{\bar{\theta}}(\rho_0)| \| = \| P(\theta) B_{\bar{\theta}}(\rho_0) \|$. Unter Verwendung von

$$\| P(\theta) |B_{\bar{\theta}}(\rho_0)|^{1/2} \| \leq \| P(\theta) |B_{\bar{\theta}}(\rho_0)| \| \cdot \| |B_{\bar{\theta}}(\rho_0)|^{-1/2} \| = \mathcal{O}(\rho_0^{1/2}),$$

und indem wir die Potenzen von ρ_0 in (V.23) zählen, erhalten wir die erste Behauptung. Die Abschätzung an die Inverse folgt aus geometrischen Überlegungen. Die Behauptung über $E_n - z - g^2 Q_0^{(\theta)}(z)$ folgt aus Lemma V.7. \square

Man beachte, dass wegen des Wechselwirkungsterms $W_g(\theta)$ auf beiden Seiten der Resolvente $[\bar{P}(\theta)(H_g(\theta) - z)\bar{P}(\theta)]^{-1}$ und wegen der Projektionen $P(\theta)$ die Divergenz der Resolvente für $\rho_0 \rightarrow 0$ vollständig kompensiert wird (siehe auch die Bemerkung nach Lemma B.8).

Wir benützen das folgende Korollar anstelle von [13, Theorem 3.2]:

KOROLLAR V.12 ([79], Corollary 8). *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$ und $0 < g \ll \vartheta$ klein genug. Dann gilt*

$$\mathcal{A} \setminus (E_n - D(g^2 A(c, a, b), C \cdot g^{2+\epsilon}) + e^{-\theta}[0, \rho_0]) \subset \rho(H_g(\theta))$$

für ein $C > 0$. Insbesondere ist das Intervall $[E_n - \delta/2, E_n + \delta/2]$ in der Resolventenmenge $\rho(H_g(\theta))$ enthalten.

BEWEIS. Wegen Lemma V.11 ist $\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z)$ beschränkt invertierbar für alle $z \in \mathcal{A} \setminus D(E_n, \rho_0/2)$. Wegen Lemma V.10 ist $\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z)$ beschränkt invertierbar für

$$z \in D(E_n, \rho_0/2) \setminus D(\text{NumRan}(E_n - g^2 Z(0) \otimes \mathbf{1}_f + e^{-\theta} \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f)|_{\text{Ran } P(0)}, C_1 \cdot g^{2+\epsilon}).$$

Die Behauptung folgt nun aus Lemma B.8. \square

V.3. Lebensdauer angeregter Zustände

In diesem Abschnitt geben wir nun den Beweis von Satz V.1:

BEWEIS VON SATZ V.1.

Schritt 1: Spektraler Cutoff. Wir zeigen zunächst, dass wir einen spektralen Cutoff mit einem Fehler der Ordnung $\mathcal{O}(g)$ einführen können: Wir wählen eine Funktion $F \in C_0^\infty((E_n - \delta/2, E_n + \delta/2))$ mit $0 \leq F(x) \leq 1$ für alle $x \in [E_n - \delta/2, E_n + \delta/2]$ und $F(x) = 1$ für alle $x \in [E_n - \delta/4, E_n + \delta/4]$. Mit Hilfe des fast-analytischen Spektralkalküls [82, 36] finden wir

$$\begin{aligned} F(H_g) &= \frac{1}{\pi} \int dx dy \frac{\partial \tilde{F}(z)}{\partial \bar{z}} (H_g - z)^{-1} \\ &= \frac{1}{\pi} \int dx dy \frac{\partial \tilde{F}(z)}{\partial \bar{z}} (H_0 - z)^{-1} - \frac{1}{\pi} \int dx dy \frac{\partial \tilde{F}(z)}{\partial \bar{z}} (H_g - z)^{-1} W_g (H_0 - z)^{-1}, \end{aligned}$$

wobei $\tilde{F} \in C_0^\infty(\mathbb{C})$ eine fast-analytische Fortsetzung von $F(x)$ mit

$$\left| \frac{\partial \tilde{F}(z)}{\partial \bar{z}} \right| = \mathcal{O}(|\text{Im } z|^2)$$

ist. Wegen

$$\frac{1}{\pi} \int dx dy \frac{\partial \tilde{F}(z)}{\partial \bar{z}} \langle e^{isH_g} \psi_1, (H_0 - z)^{-1} \psi_2 \rangle = \langle e^{isH_g} \psi_1, \psi_2 \rangle$$

und

$$\begin{aligned} &\left| \frac{1}{\pi} \int dx dy \langle e^{isH_g} \psi_1, \frac{\partial \tilde{F}(z)}{\partial \bar{z}} (H_g - z)^{-1} W_g (H_0 - z)^{-1} \psi_2 \rangle \right| \\ &\leq \frac{1}{\pi} \int dx dy \|\psi_1\| \left\| \frac{\partial \tilde{F}(z)}{\partial \bar{z}} \right\| \|(H_g - z)^{-1}\| \|(E_n - z)^{-1}\| \|W_g \psi_2\| \leq Cg, \end{aligned}$$

erhalten wir $\langle \psi_1, e^{-isH_g} \psi_2 \rangle = \langle \psi_1, e^{-isH_g} F(H_g) \psi_2 \rangle + \mathcal{O}(g)$.

Schritt 2: Analog zu [89] und [13] schreiben wir

$$\begin{aligned} \langle \psi_1, e^{-isH_g} F(H_g) \psi_2 \rangle &= -\frac{1}{2\pi i} \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int d\lambda e^{-i\lambda s} F(\lambda) [f(0, \lambda - i\epsilon) - f(0, \lambda + i\epsilon)] \\ &= -\frac{1}{2\pi i} \int d\lambda e^{-i\lambda s} F(\lambda) [f(\bar{\theta}, \lambda) - f(\theta, \lambda)], \end{aligned}$$

wobei $f(\theta, \lambda) := \langle \psi_1(\bar{\theta}), \frac{1}{H_g(\bar{\theta}) - \lambda} \psi_2(\theta) \rangle$ mit $\psi_i(\theta) := \phi_i(\theta) \otimes \Omega$ und $\phi_i(\theta) := \mathcal{U}_{\text{el}}(\theta) \phi_i$. Wir haben im ersten Schritt den Satz von Stone [122, Theorem VII.13] benützt. Im zweiten Schritt haben wir die Analytizität von $H_g(\theta)$ benützt sowie die Tatsache, dass $H_g(\theta)$ kein Spektrum im Intervall $[E_n - \delta/2, E_n + \delta/2]$ hat (siehe [13, Theorem 3.2] und Korollar V.12).

Indem wir die Identität

$$\langle \psi_1(\bar{\theta}), \frac{1}{H_g(\theta) - \lambda} \psi_2(\theta) \rangle = \langle \psi_1(\bar{\theta}), \mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - \lambda)^{-1} \psi_2(\theta) \rangle$$

(siehe [12, Gleichung (IV).14] und Lemma B.8) beachten und die zweite Resolventengleichung verwenden, erhalten wir

$$\begin{aligned} (V.24) \quad f(\theta, \lambda) &= \langle \psi_1(\bar{\theta}), \mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - \lambda)^{-1} \psi_2(\theta) \rangle \\ &= \langle \phi_1(\bar{\theta}), [E_n - \lambda - g^2 Q_0^{(\theta)}(\lambda)]^{-1} \phi_2(\theta) \rangle - \langle \psi_1(\bar{\theta}), [E_n - \lambda - g^2 Q_0^{(\theta)}(\lambda)]^{-1} \otimes \mathbf{1}_f \\ &\quad \times [\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - \lambda) - (E_n - \lambda + e^{-\theta} \mathbf{1}_{el} \otimes H_f - g^2 Q^{(\theta)}(\lambda)) P(\theta)] \\ &\quad \times \mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - \lambda)^{-1} \psi_2(\theta) \rangle =: \tilde{f}(\theta, \lambda) + B(\theta, \lambda), \end{aligned}$$

wobei $\tilde{f}(\theta, \lambda)$ der erste Term in der Summe ist.

Die Strategie besteht nun darin, die Kontour für den ersten Term geeignet zu verschieben, um einen Polbeitrag (siehe Abbildung V.3) zu erhalten und den zweiten Term auf der reellen Achse abzuschätzen:

$$\begin{aligned} &\int d\lambda e^{-i\lambda s} F(\lambda) [f(\bar{\theta}, \lambda) - f(\theta, \lambda)] \\ &= \int d\lambda e^{-i\lambda s} F(\lambda) [B(\bar{\theta}, \lambda) - B(\theta, \lambda)] + \int_{C_1+C_5} dz e^{-izs} F(z) [\tilde{f}(\bar{\theta}, z) - \tilde{f}(\theta, z)] \\ &+ \int_{C_2+C_3+C_4} dz e^{-izs} [\tilde{f}(\bar{\theta}, z) - \tilde{f}(\theta, z)] - \int_{C_0} dz e^{-izs} [\tilde{f}(\bar{\theta}, z) - \tilde{f}(\theta, z)], \end{aligned}$$

wobei wir $C := C_1 + C_2 + C_3 + C_4 + C_5$ gesetzt haben mit $C_1 := [E_n - \delta/2, E_n - \delta/4]$, $C_2 := [E_n - \delta/4, E_n - \delta/4 - ig^{2-\epsilon}/2]$, $C_3 := [E_n - \delta/4 - ig^{2-\epsilon}/2, E_n + \delta/4 - ig^{2-\epsilon}/2]$, $C_4 := [E_n + \delta/4 - ig^{2-\epsilon}/2, E_n + \delta/4]$ und $C_5 := [E_n + \delta/4, E_n + \delta/2]$. Die Kontour C_0 (siehe unten) liefert den Pol-Beitrag von $\tilde{f}(\theta, z)$. Die Holomorphie-Eigenschaften zur Rechtfertigung dieses Prozesses werden wir unten diskutieren. Man beachte, dass die Kontour C nicht einfach viel weiter nach unten verschoben werden kann, weil $Q_0^{(\theta)}(z)$ außerhalb von \mathcal{A} Singularitäten haben könnte.

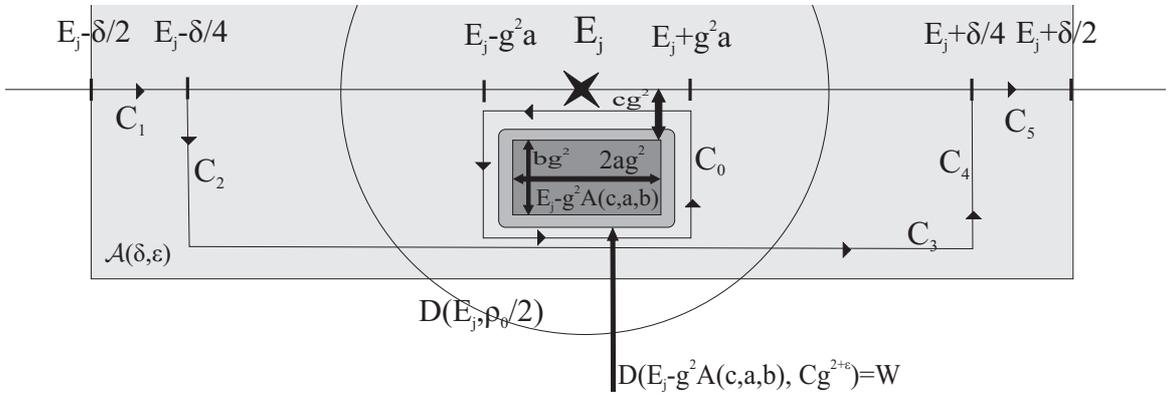


ABBILDUNG V.3. Die Integrationskontour für das Pauli-Fierz-Modell.

Schritt 3: Abschätzungen auf der reellen Achse. Wir unterteilen das Integrationsintervall $[E_n - \delta/2, E_n + \delta/2]$ in zwei Teile: Auf $[E_n - \delta/2, E_n + \delta/2] \setminus (E_n - \rho_0/2, E_n + \rho_0/2)$ benützen wir Lemma B.9 und Lemma V.11, um die Abschätzung $|B(\theta, \lambda)| \leq C \cdot \frac{g^{2+\epsilon}}{(\sin \vartheta)^2(|\lambda - E_n| - Cg^2/\sin \vartheta)^2}$ zu erhalten. Wegen

$$\begin{aligned} (\sin \vartheta)^{-2} \int_{\frac{g^{2-2\epsilon}}{2}}^{\infty} \frac{d\lambda}{(\lambda - Cg^2/\sin \vartheta)^2} &= (\sin \vartheta)^{-2} g^{-2} \int_{\frac{g^{-2\epsilon}}{2}}^{\infty} \frac{d\lambda}{(\lambda - C/\sin \vartheta)^2} \\ &= (\sin \vartheta)^{-2} g^{-2} \frac{1}{g^{-2\epsilon}/2 - C/\sin \vartheta} = \mathcal{O}(g^{-2+2\epsilon}), \end{aligned}$$

ist der Fehlerterm für dieses Gebiet von der Ordnung $g^{3\epsilon}$. Auf $(E_n - \rho_0/2, E_n + \rho_0/2)$ schätzen wir mit Hilfe von Lemma B.9 und Lemma V.10 ab: $|B(\theta, \lambda)| \leq C\nu^{-2} \cdot \frac{g^{2+\epsilon}}{(E_n - \lambda)^2 + c^2g^4}$. Wie man leicht sieht, ist $\int d\lambda \frac{g^{2+\epsilon}}{(E_n - \lambda)^2 + c^2g^4}$ von Ordnung g^ϵ , und dieselbe Abschätzung gilt für $B(\bar{\theta}, \lambda)$. Dies zeigt die Abschätzung auf der reellen Achse.

Schritt 4: Abschätzungen entlang der Kontour C: Wir schätzen das Integral $\int_C |e^{-isz}| |\tilde{f}(\bar{\theta}, z) - \tilde{f}(\theta, z)| |dz|$ ab. Wegen der Identität

$$(V.25) \quad \tilde{f}(\theta, z) = \frac{1}{E_n - z} \langle \phi_1(\bar{\theta}), \phi_2(\theta) \rangle + g^2 \langle \phi_1(\bar{\theta}), \frac{1}{E_n - z} Q_0^{(\theta)}(z) \frac{1}{E_n - z - g^2 Q_0^{(\theta)}(z)} \phi_2(\theta) \rangle$$

heben sich die Terme der niedrigsten Ordnung von $f(\theta, z)$ und $f(\bar{\theta}, z)$ auf, und es reicht zu zeigen, dass die Terme der höheren Ordnung mindestens die Ordnung g^ϵ haben. Weil $Q_0^{(\theta)}(z)$ wegen Lemma V.7 für $z \in \mathcal{A}$ gleichmäßig beschränkt ist, erhalten wir mit Korollar V.8 (siehe Abbildung V.2) die Abschätzung

$$\begin{aligned} g^2 \left| \langle \phi_1(\bar{\theta}), \frac{1}{E_n - (\lambda - ig^{2-\epsilon})} Q_0^{(\theta)}(\lambda - ig^{2-\epsilon}) \right. \\ \left. \times \frac{1}{E_n - (\lambda - ig^{2-\epsilon}) - g^2 Q_0^{(\theta)}(\lambda - ig^{2-\epsilon})} \phi_2(\theta) \rangle \right| \leq C \cdot \frac{g^2}{(E_n - \lambda)^2 + (g^{2-\epsilon})^2}. \end{aligned}$$

Daher ist leicht zu sehen, dass das Integral entlang C_3 über obigen Ausdruck von Ordnung g^ϵ ist. Das Integral über die verbleibende Kontour ist von Ordnung g^2 , da $\text{dist}(z, E_n)$ auf dieser Kontour unabhängig von g abgeschätzt werden kann. Das Integral über $\tilde{f}(\bar{\theta}, z)$ kann auf dieselbe Weise abgeschätzt werden.

Schritt 5: Abschätzungen an den Polterm. Da $Q_0^{(\theta)}(z)$ wegen Lemma V.7 in $z \in \mathcal{A}$ gleichmäßig beschränkt ist, hat die Funktion $\tilde{f}(\theta, z)$ keine Polstellen in $\mathcal{A} \setminus D(E_n, \rho_0/2)$. Aus Lemma V.10 folgt, dass $E_n - z - g^2 Q_0^{(\theta)}(z)$ für $z \in D(E_n, \rho_0/2) \setminus (E_n - g^2 A(c, a, b) + D(0, C_1 \cdot g^{2+\epsilon})) \subset D(E_n, \rho_0/2) \setminus [\text{NumRan}(E_n - g^2 Z(0)) + D(0, C_1 \cdot g^{2+\epsilon})]$ beschränkt invertierbar ist, d.h. alle Polstellen von $f(\theta, z)$ befinden sich innerhalb der Menge $W := E_n - g^2 A(c, a, b) + D(0, C_1 \cdot g^{2+\epsilon})$.

Wegen Lemma V.10 gilt für $z \in D(E_n, \rho_0/2) \setminus W$ die Abschätzung $\|(E_n - z - g^2 Q_0^{(\theta)}(z))^{-1}\| \leq C \text{dist}(z, \text{NumRan}(E_n - g^2 Z))^{-1}$ für ein $C > 0$. Um die Polterme abzuschätzen, wählen wir eine Kontour C_0 um W herum, so dass die Länge der Kontour und ihr Abstand zu W von Ordnung g^2 sind. Eine mögliche Wahl ist $C_0 = [E_n + g^2(-(a+c/2) - ic/2), E_n + g^2((a+c/2) - ic/2)] + [E_n + g^2((a+c/2) - ic/2), E_n +$

$g^2((a + c/2) - i(b + 3c/2)) + [E_n + g^2((a + c/2) - i(b + 3c/2)), E_n + g^2(-(a + c/2) - i(b + 3c/2))] + [E_n + g^2(-(a + c/2) - i(b + 3c/2)), E_n + g^2(-(a + c/2) - i(c/2))]$. Wir benützen jetzt die Entwicklung

$$\begin{aligned} \langle \phi_1(\bar{\theta}), (E_n - z - g^2 Q_0^{(\theta)}(z))^{-1} \phi_2(\theta) \rangle &= \langle \phi_1(\bar{\theta}), (E_n - z - g^2 Z(\theta))^{-1} \phi_2(\theta) \rangle \\ &+ g^2 \langle \phi_1(\bar{\theta}), (E_n - z - g^2 Q_0^{(\theta)}(z))^{-1} (Q_0^{(\theta)}(z) - Z(\theta)) (E_n - z - g^2 Z(\theta))^{-1} \phi_2(\theta) \rangle. \end{aligned}$$

Das Integral über den ersten Term liefert den behaupteten führenden Term, der zweite Term ist wegen Korollar B.11 und Lemma V.10 von Ordnung g^ϵ .

Mit denselben Überlegungen (wobei wir θ durch $\bar{\theta}$ ersetzen) sehen wir, dass die Funktion $\tilde{f}(\bar{\theta}, z)$ keine Polstellen in der unteren Halbebene hat. Folglich erhalten wir von dieser Funktion keinen Polbeitrag (siehe auch Bemerkung B.12). \square

BEMERKUNG V.13. Wir vergleichen hier unseren Beweis und unsere Abschätzung mit der Abschätzung, die Bach, Fröhlich und Sigal [13] erhalten haben:

Diese Autoren wählen einen Testzustand

$\psi_j := F(H_g) e^{-g^{-2} H_\tau} \phi_j \otimes \eta$, wobei η einen Photonenwolke beschreibt, und schätzen seine Überlebenswahrscheinlichkeit durch

$$|\langle \psi_j, e^{-isH_g} \psi_j \rangle| \leq B_\eta \left(C e^{-s(g^2 \Gamma_j - Cg^{2+\epsilon})} + C_L s^{-L} g^4 \right)$$

ab, wobei $B_\eta, C, C_L > 0$ Konstanten unbekannter Größe sind und $\Gamma_j := \inf \sigma(\text{Im } Z)$ als nicht-ausgeartet vorausgesetzt wird. Sie zeigen also, dass die Überlebenswahrscheinlichkeit kleiner als jedes $\delta > 0$ wird, wenn man $s \geq s_0$ für ein $s_0 = \mathcal{O}(g^{-2})$ wählt.

Wir wählen einen Testzustand $\psi_j := \phi_j \otimes \Omega$ und erhalten die Abschätzung

$$\langle \psi_1, e^{-isH_g} \psi_2 \rangle = \langle \phi_1, e^{-is(E_j - g^2 Z)} \phi_2 \rangle + b(g, s),$$

mit $|b(g, t)| \leq g^\epsilon$ und $0 < \epsilon < 1/3$. Diese Abschätzung zeigt, dass für Zeiten kleiner als $s_0 = \mathcal{O}(g^{-2} \ln g)$ der exponentielle Term dominiert und wir erhalten daher eine mehr oder weniger präzise Beschreibung der Überlebensamplitude für diese Zeiten. Man beachte, dass wir weder einen spektralen Cutoff in unserem Testzustand voraussetzen noch die Nicht-Ausgeartetheit von Γ_j .

Was die technische Seite unseres Ansatzes betrifft, verwenden wir die Analysis von Bach, Fröhlich und Sigal [12, 13], erweitern diese aber in verschiedene Richtungen, um eine untere Schranke zu erhalten.

Da die Matrix $Z(\theta)$ den Feshbach-Operator $\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z)$ nicht global auf \mathcal{A} mit einem Fehler kleiner als $\mathcal{O}(g^2)$ zu approximieren scheint (siehe die Bemerkung nach Lemma V.10), ersetzen wir $Z(\theta)$ durch die z -abhängige Approximation $Q^{(\theta)}(z)$, die in Gleichung (V.19) definiert wurde und in [12] als Zwischenobjekt auftaucht. Als Konsequenz müssen wir die Menge \mathcal{A} in zwei g -abhängige Gebiete aufteilen. In dem Gebiet nahe bei E_j benützen wir eine Variante der Abschätzungen an den numerischen Wertebereich, die von Bach, Fröhlich, und Sigal gezeigt wurde (vgl. Lemma V.10). Weg von E_j benützen wir eine andere Abschätzung an den numerischen Wertebereich (vgl. Lemma V.11).

Man beachte, dass die Wahl der Integrationskontour sorgfältig bedacht werden muss: Da der Operator $Q^{(\theta)}(z)$ für $z \notin \mathcal{A}$ Singularitäten haben kann, können wir

die Integrationskontour nicht nach außerhalb von \mathcal{A} verschieben. Andererseits erhielten wir Abschätzungen, die für $g \rightarrow 0$ divergieren, wenn wir die Kontour zu nahe an den numerischen Wertebereich von $\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z)$ bewegten. Wir verwenden daher folgende Strategie: Im Gegensatz zu [13] benützen wir die Identität $\langle \psi_1(\bar{\theta}), \frac{1}{H_g(\bar{\theta}) - \lambda} \psi_2(\theta) \rangle = \langle \psi_1(\bar{\theta}), \mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - \lambda)^{-1} \psi_2(\theta) \rangle$ bevor wir die Konturen verschieben. Dann trennen wir in Gleichung (V.24) den Term der führenden Ordnung $\tilde{f}(\theta, \lambda) := \langle \phi_1(\bar{\theta}), [E_j - \lambda - g^2 Q_0^{(\theta)}(\lambda)]^{-1} \phi_2(\theta) \rangle$ vom Term $\langle \psi_1(\bar{\theta}), \mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - \lambda)^{-1} \psi_2(\theta) \rangle$. Anstatt die Restterme $B(\theta, \lambda)$ und $B(\bar{\theta}, \lambda)$ in die Nähe der Singularitäten zu verschieben und sie durch $Ce^{-s(g^2 \Gamma_j - Cg^{2+\epsilon})}$ mit einem $C > 0$ unbekannter Größe von oben abzuschätzen, schätzen wir sie auf der reellen Achse ab und beschränken sie gleichmäßig in $s \geq 0$ nach oben durch Cg^ϵ .

Da $Q^{(\theta)}(z)$ die Photonenzahlsektoren invariant lässt, können wir die Integrationskontour für die Terme $\tilde{f}(\theta, \lambda)$ und $\tilde{f}(\bar{\theta}, \lambda)$ über die Singularitäten verschieben. Für $\tilde{f}(\theta, \lambda)$ erhalten wir dabei einen Polbeitrag, der für den exponentiellen Abfall sorgt.

Um $\tilde{f}(\theta, z)$ und $\tilde{f}(\bar{\theta}, z)$ auf der verschobenen Kontour abzuschätzen, extrahieren wir erneut einen führenden Term. Da die führenden Terme von $\tilde{f}(\theta, z)$ und $\tilde{f}(\bar{\theta}, z)$ identisch sind und mit entgegengesetzten Vorzeichen auftreten (siehe Gleichung (V.25)), heben sich diese Terme heraus, da wir im Gegensatz zu [13] für beide Terme dieselbe Integrationskontour gewählt haben.

V.4. Anwendung auf das Wasserstoffatom

In diesem Abschnitt diskutieren wir die Anwendbarkeit der Methode auf das Wasserstoff-Atom. Insbesondere zeigen wir, dass $\text{Im } Z$ strikt positiv ist, es sei denn es gilt $n = 2$. Wir werden die triviale Spinabhängigkeit von $Z = \tilde{Z}(0, 0)$ in diesem Abschnitt ignorieren.

V.4.1. Die Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms. Wir definieren die assoziierten Laguerre-Funktionen (siehe [24, Gleichung (3.5)]) für $\lambda, \mu \in \mathbb{N}_0$ mit $0 \leq \mu \leq \lambda$ durch

$$L_\lambda^\mu(r) := \left(\frac{d}{dr} \right)^\mu \left(e^r \left(\frac{d}{dr} \right)^\lambda (e^{-r} r^\lambda) \right)$$

und setzen (siehe [24, Gleichung (3.16)])

$$(V.26) \quad R_{n,l}(r) := -\frac{(n-l-1)!^{1/2}}{(n+l)!^{3/2} (2n)^{1/2}} (2/n)^{3/2} e^{-r/n} \left(\frac{2r}{n} \right)^l L_{n+l}^{2l+1}(2r/n).$$

Man beachte, dass es für die Indizes der assoziierten Laguerre-Funktionen verschiedene Indizes gibt.

Für $n \in \mathbb{N}$ und $l, m \in \mathbb{Z}$ mit $0 \leq l \leq n-1$ und $-l \leq m \leq l$ sind die normierten Eigenfunktionen zum Eigenwert E_n

$$(V.27) \quad u_{n,l,m}(r, \theta, \phi) := R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi),$$

wobei die $Y_{l,m}$ Kugelflächenfunktionen sind (siehe [24, Abschnitt 1]) und wir durch

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned}$$

Polarkoordinaten eingeführt haben mit $0 \leq \theta \leq \pi$ und $0 \leq \phi \leq 2\pi$. Man beachte, dass in diesem Abschnitt x , y und z die kartesischen Koordinaten des Elektrons bezeichnen. Man beachte des Weiteren, dass die Eigenwerte E_n n^2 -fach ausgeartet sind.

V.4.2. Auswahlregeln für Dipolübergänge. In diesem Unterabschnitt zitieren wir einige wichtige Ergebnisse aus [24]. Wir definieren

$$(V.28) \quad R_{n,l}^{n',l'} := \int_0^\infty dr r^3 R_{n',l'}(r) R_{n,l}(r).$$

Diese Integrale wurden von Gordon [64] (siehe auch [24, Abschnitt 63]) berechnet. Wir benötigen lediglich (siehe [24, Gleichung (63.4)])

$$(V.29) \quad |R_{2,1}^{n,0}| = \sqrt{\frac{2^{15} n^9 (n-2)^{2n-6}}{3(n+2)^{2n+6}}}.$$

Man findet für die Dipolmomente $(u_{n',l',m'}, zu_{n,l,m})$ (siehe [24, Gleichung (60.11)]) für alle $n, n' \in \mathbb{N}$ die Identität

$$(V.30) \quad (u_{n',l',m'}, zu_{n,l,m}) = 0 \quad \text{es sei denn } l' = l \pm 1 \text{ und } m' = m.$$

Ferner benötigen wir die Beziehung (siehe [24, Gleichung (60.7)])

$$(V.31) \quad (u_{n',0,0}, zu_{2,1,0}) = \sqrt{\frac{1}{3}} R_{2,1}^{n',0}.$$

Aus den Auswahlregeln in [24, Gleichung (60.11)] folgt sofort

$$(V.32) \quad (u_{n',l',m'}, xu_{n,l,m}) = (u_{n',l',m'}, yu_{n,l,m}) = 0,$$

es sei denn $l' = l \pm 1$ und $m' = m \pm 1$

V.4.3. Der Imaginärteil von Z . In diesem Unterabschnitt kommen wir zum eigentlichen Beweis dafür, dass die vorgestellte Methode auf das Wasserstoffatom anwendbar ist, sofern nicht $n = 2$ gilt.

SATZ V.14 ([79], Theorem B.1). *Es sei $n \in \mathbb{N}$ und*

$$\begin{aligned} \text{Im } Z = & \frac{2}{3} \sum_{n'=1}^{n-1} (E_n - E_{n'})^3 \kappa (E_n - E_{n'})^2 \\ & \times [P_{\text{el},n} x P_{\text{el},n'} x P_{\text{el},n} + P_{\text{el},n} y P_{\text{el},n'} y P_{\text{el},n} + P_{\text{el},n} z P_{\text{el},n'} z P_{\text{el},n}] \end{aligned}$$

für $n-1$ wie in Gleichung (V.18). Dann gilt für alle $l, m, l', m' \in \mathbb{N}_0$ mit $0 \leq l \leq n-1$, $-l \leq m \leq l$, $0 \leq l' \leq n-1$, und $-l' \leq m' \leq l'$

$$(u_{n,l,m}, \text{Im } Z u_{n,l,m}) = 0,$$

es sei denn $l = l'$ und $m = m'$, und für alle $l, m \in \mathbb{N}_0$ mit $0 \leq l \leq n-1$, $-l \leq m \leq l$

$$(u_{n,l,m}, \text{Im } Z u_{n,l,m}) > 0,$$

es sei denn $n = 2$. Insbesondere ist $\text{Im } Z$ positiv, es sei denn $n = 2$.

BEWEIS.

Schritt 1: Außerdiagonale Matrix-Elemente. Da $\text{Im } Z$ rotationsinvariant ist, ist es in der Basis $\{u_{n,l,m} | 0 \leq l \leq n-1, -l \leq m \leq l\}$ diagonal. Diese Behauptung lässt sich auch direkt durch eine längere Rechnung unter Verwendung der expliziten Formel für die Dipol-Matrixelemente in [24, Abschnitt 63] verifizieren. Man beachte, dass die Matrizes $P_{\text{el},n}xP_{\text{el},n'}xP_{\text{el},n}$, $P_{\text{el},n}yP_{\text{el},n'}yP_{\text{el},n}$ und $P_{\text{el},n}zP_{\text{el},n'}zP_{\text{el},n}$ einzeln nicht diagonal sind. Wir erwähnen, dass auch der Realteil in der Basis $\{u_{n,l,m} | 0 \leq l \leq n-1, -l \leq m \leq l\}$ diagonal ist.

Schritt 2: Diagonale Matrixelemente. Zunächst stellen wir fest, dass das Matrixelement

$$(u_{2,0,0}, [P_{\text{el},2}xP_{\text{el},1}xP_{\text{el},2} + P_{\text{el},2}yP_{\text{el},1}yP_{\text{el},2} + P_{\text{el},2}zP_{\text{el},1}zP_{\text{el},2}] u_{2,0,0})$$

wegen der Auswahlregeln (V.32) und (V.30) verschwindet. Es sei nun $n \geq 3$. Wir müssen zeigen, dass es ein $n' < n$ gibt, so dass für alle $\phi \in \text{Ran } P_{\text{el},n}$

$$\sum_{v=x,y,z} \|P_{\text{el},n'}p_v\phi\|^2 > 0$$

gilt. Da $\text{Im } Z$ in der Basis $\{u_{n,m,l} | l = 0 \dots n-1, m = -l, \dots, l\}$ diagonal ist, reicht es, die Ungleichung

$$\sum_{v=x,y,z} \|P_{\text{el},n'}p_vu_{n,l,m}\|^2 > 0$$

für alle $0 \leq l \leq n-1$ und $-l \leq m \leq l$ zu zeigen. Im Falle $l = 0, m = 0$ folgt aus den Gleichungen (V.31) und (V.29) dass der Übergang $(n, 0, 0) \rightarrow (2, 1, 0)$ ein erlaubter elektrischer Dipol-Übergang ist, denn es ist $z_{2,1,0}^{n,0,0} > 0$. Folglich gilt die Ungleichung $(u_{n,0,0}, \text{Im } Zu_{n,0,0}) > 0$.

Daher reicht es, den Fall $l > 0$ zu betrachten. Wir führen einen Widerspruchsbeweis. Angenommen, es sei $\sum_{v=x,y,z} \|P_{\text{el},n'}p_vu_{n,l,m}\|^2 = 0$ für alle $n' < n-1$ und gewisse l, m . Dann würde $v = x, y, z$

$$(p_vu_{n,l,m}, H_{\text{el}}p_vu_{n,l,m}) \geq E_n(p_vu_{n,l,m}, p_vu_{n,l,m})$$

folgen. Jedoch ist aus Gleichung (V.26) leicht zu sehen, dass für $l > 0$ $p_vu_{n,l,m} \in \text{Dom}(H_{\text{el}})$ gilt. Mittels partieller Integration und wegen $u_{n,l,m}(0) = 0$ zeigen wir die Gleichung

$$\sum_{v=x,y,z} (p_vu_{n,l,m}, H_{\text{el}}p_vu_{n,l,m}) = E_n \sum_{v=x,y,z} (p_vu_{n,l,m}, p_vu_{n,l,m}).$$

Aus dem Minimax-Prinzip folgt

$$H_{\text{el}}p_vu_{n,l,m} = E_n p_vu_{n,l,m}.$$

Jedoch gilt

$$E_n p_vu_{n,l,m} = H_{\text{el}}p_vu_{n,l,m} = E_n p_vu_{n,l,m} + [H_{\text{el}}, p_v]u_{n,l,m}$$

für $v = x, y, z$ und

$$[H_{\text{el}}, p_x] = -i \frac{x}{r^3}$$

mit $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, so dass wir einen Widerspruch erhalten. \square

V.4.4. Numerisches Beispiel. Wir geben hier explizite numerische Werte für die Matrix $\text{Im } Z$ im Fall $n = 3$, wobei wir die Abschneidefunktion κ identisch gleich 1 setzen. Mit Hilfe von Maple und der expliziten Form der Eigenfunktionen in Gleichung (V.27) berechnen wir die Matrizes $P_{\text{el},1}xP_{\text{el},3}$ und $P_{\text{el},2}xP_{\text{el},3}$ sowie die entsprechenden Matrizes für die Koordinaten y und z . Mit diesen Matrizes berechnen wir $\text{Im } Z$ gemäß Gleichung (V.18). Zahlenwerte für andere Hauptquantenzahlen ließen sich auf dieselbe Weise berechnen.

Die Matrix $\text{Im } Z$ (und auch Z) ist diagonal in der Basis $\{u_{3,l,m} | 0 \leq l \leq 2, -l \leq m \leq l\}$. Die Diagonalelemente hängen nur von l , aber nicht von m ab. Wir erhalten $(u_{3,0,0}, \text{Im } Z u_{3,0,0}) = \frac{384}{1953125}$, $(u_{3,1,m}, \text{Im } Z u_{3,1,m}) = \frac{738423}{125000000}$ für $-1 \leq m \leq 1$, und $(u_{3,2,m}, \text{Im } Z u_{3,2,m}) = \frac{98304}{48828125}$ für $-2 \leq m \leq 2$. Wir bemerken, dass die Eigenwerte von $2 \cdot (\alpha^5 m \mathbf{c}^2 / \hbar) \text{Im } Z$ genau die inversen Lebensdauern $\tau_{n,l,m}^{-1}$ der entsprechenden Eigenzustände des Wasserstoffatoms sind. Der zusätzliche Faktor zwei ist darauf zurückzuführen, dass Lebensdauern mit Hilfe der zugehörigen Überlebenswahrscheinlichkeiten und nicht mittels Wahrscheinlichkeitsamplituden definiert sind. Wenn wir $\alpha = 7.29735 \cdot 10^{-3}$, $m = 9.10939 \cdot 10^{-31}$ kg, $\mathbf{c} = 2.99792 \cdot 10^8$ m/s und $\hbar = 1.05457 \cdot 10^{-34}$ Js einsetzen, erhalten wir $\tau_{3,0,0} = 1.58303 \cdot 10^{-7}$ s, $\tau_{3,1,m} = 5.26860 \cdot 10^{-9}$ s für $-1 \leq m \leq 1$ und $\tau_{3,2,m} = 1.54593 \cdot 10^{-8}$ s für $-2 \leq m \leq 2$. Die experimentellen Werte für diese Lebensdauern sind nicht sehr präzise. Wir zitieren einen Wert von $\tau_{3,1,m} = (5.5 \pm 0.2) \times 10^{-9}$ s aus [33]. Bickel und Goodman [26] finden $\tau_{3,1,m} = (5.58 \pm 0.13) \times 10^{-9}$ s und Etherton et al. [49] erhalten $\tau_{3,1,m} = (5.41 \pm 0.18) \times 10^{-9}$ s. Die experimentellen Werte stimmen also im Wesentlichen mit der Theorie überein.

KAPITEL VI

Ein relativistisches Modell

In diesem Kapitel betrachten wir ein relativistisches Elektron im Feld eines Atomkerns. Die Quantisierung wird dabei bezüglich des äußeren Feldes gewählt. Auch für dieses Modell zeigen wir eine obere und untere Schranke an die Lebensdauer angeregter Zustände. Es stellt sich heraus, dass die Lebensdauer im relativistischen Modell in niedrigster Ordnung in der Feinstrukturkonstanten α identisch zur Lebensdauer im Pauli-Fierz-Modell ist. Relativistische Effekte spielen bei der Lebensdauer angeregter Zustände also eine untergeordnete Rolle.

Technisch betrachtet ist das relativistische Modell wesentlich schwieriger zu handhaben. Grund hierfür ist unter anderem die Feinstrukturaufspaltung der Eigenwerte. Zur Behandlung des relativistischen Modells werden wir auf die Ergebnisse aus Kapitel III zurückgreifen.

VI.1. Modell und Definitionen

Der Coulomb-Dirac-Operator mit Lichtgeschwindigkeit \mathbf{c} , Planck-Konstante \hbar , Elektronenmasse m , Elementarladung e , Kernladungszahl \mathfrak{Z} und Dielektrizitätskonstante ϵ_0 ist in SI-Einheiten

$$D' := -i\hbar\mathbf{c}\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2 - \frac{e^2\mathfrak{Z}}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\cdot|}.$$

Wir bezeichnen die positive Spektralprojektion dieses Operators mit $\Lambda'^{(+)}$. Wir schränken diesen Operator auf seinen positiven Spektralraum ein und koppeln ihn das quantisierte Strahlungsfeld $A'_{\kappa'}(x) := A'_{\kappa'}(x)_+ + A'_{\kappa'}(x)_-$, wobei $A'_{\kappa'}(x)_+$ und $A'_{\kappa'}(x)_-$ wie im nicht-relativistischen Fall durch (V.2) und (V.3) definiert sind.

Addieren wir noch den Operator H'_f für die kinetische Energie der Photonen (siehe Gleichung V.1), so erhalten wir den Operator (vgl. [35, B-V.1., Formel (35) bis (39), Seite 431])

$$H' := \Lambda'^{(+)}[\mathbf{c}\boldsymbol{\alpha} \cdot (-i\hbar\nabla - eA'_{\kappa'}(x)) + \beta m\mathbf{c}^2 - \frac{e^2\mathfrak{Z}}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\cdot|}]\Lambda'^{(+)} + H'_f,$$

wobei e die Elementarladung ist. Zwar könnte man den Operator auch ohne Einschränkung auf den positiven Spektralraum betrachten. In diesem Fall ist zumindest bekannt, dass selbstadjungierte Realisierungen existieren [3, Theorem 1.2]. Jedoch sind diese nicht explizit bekannt; insbesondere ist unklar, ob und ggf. auf welchem Definitionsbereich der Operator wesentlich selbstadjungiert ist. Darüber hinaus würde der Ausdruck für die inverse Lebensdauer (siehe Gleichung (VI.13)) ohne Ultraviolett-Cutoff divergieren, die Untersuchung dieses Operators im Hinblick auf die Lebensdauer angeregter Zustände nicht sinnvoll wäre. Es sei in diesem Zusammenhang jedoch bemerkt, dass für eine gewisse Klasse von Potentialen – die das Coulomb-Potential

nicht einschließt – bekannt ist, dass der nicht projizierte Operator auf einen geeigneten Definitionsbereich wesentlich selbstadjungiert ist (siehe Stockmeyer und Zenk [140] und Arai [3]).

Wie im nicht-relativistischen Fall setzen wir $a_0 := \alpha^{-1}(\frac{\hbar}{m\mathfrak{c}})$ (Bohrradius), $\zeta := a_0$ und $\xi^{-1} := \frac{\alpha}{a_0}$ und skalieren den Operator gemäß $x \rightarrow \zeta x$ und $k \rightarrow \xi^{-1}k$. Die entsprechende unitäre Abbildung bezeichnen wir mit U . Mit dieser Skalierung können wir erwarten, den Operator ähnlich wie im nicht-relativistischen Fall behandeln zu können. Wir müssen also die Ersetzungen

$$\begin{aligned}\hbar\nabla &\rightarrow \alpha m\mathfrak{c}\nabla \\ eA'_{\kappa'}(x) &\rightarrow \alpha^{5/2}m\mathfrak{c}A_{\kappa}(\alpha x) \\ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\cdot|} &\rightarrow \alpha^2 m\mathfrak{c}^2 \frac{1}{|\cdot|} \\ H'_f &\rightarrow \alpha^2 m\mathfrak{c}^2 H_f\end{aligned}$$

vornehmen und erhalten

$$(VI.1) \quad \tilde{H}'_{\alpha,3} := UH'U^* = \alpha^2 m\mathfrak{c}^2 \left[\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} [D_{\alpha^{-1},3} - \sqrt{\alpha}\boldsymbol{\alpha} \cdot A_{\kappa}(\alpha x)] \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} + H_f \right].$$

Hierbei ist $\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}$ die in Gleichung (II.3) definierte positive Spektralprojektion des Operators $D_{\alpha^{-1},3}$, wobei nach der Skalierung α^{-1} die Rolle der Lichtgeschwindigkeit übernimmt und 3 die Rolle der Kopplungskonstanten. H_f und $A_{\kappa}(x)$ sind durch dieselben Ausdrücke wie im nicht-relativistischen Fall (vgl. Gleichungen (V.5) bis (V.7)) gegeben.

Wir betrachten im Folgenden den Operator

$$(VI.2) \quad H_{\alpha} := \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} [D_{\alpha^{-1},3} - \alpha^{-2} - \sqrt{\alpha}\boldsymbol{\alpha} \cdot A_{\kappa}(\alpha x)] \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} + H_f$$

auf $\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \otimes \mathcal{F}$, wobei wir triviale Faktoren $\otimes \mathbf{1}_f$ oder $\mathbf{1}_{el} \otimes$ nicht mit anschreiben.

Um die Ergebnisse über den nicht-relativistischen Grenzfall aus Kapitel III.3 anwenden zu können, und um die Methoden zur Behandlung eines nicht-relativistischen Atoms aus Kapitel V mit möglichst geringen Änderungen übernehmen zu können, ziehen wir α^{-2} , also die Ruheenergie, vom Operator ab. Wie im nicht-relativistischen Fall definieren wir den Störungsparameter $g := \alpha^{3/2} > 0$ und den Störungsoperator

$$W^{(\alpha)} := \sqrt{\alpha} \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} \boldsymbol{\alpha} \cdot A_{\kappa}(\alpha x) \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)},$$

sowie den freien Operator

$$H_{\alpha,0} := \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} D_{\alpha^{-1},3} \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} + H_f - \alpha^{-2}$$

und den elektronischen Operator

$$H_{el}^{(\alpha)} := \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} [D_{\alpha^{-1},3} - \alpha^{-2}] \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}.$$

Wir werden immer $3 > 0$ annehmen.

Wir werden die Selbstadjungiertheit dieser Operatoren in Kapitel VI.2 beweisen. Man beachte, dass im Gegensatz zum nicht-relativistischen Fall auch der freie Operator von α abhängt. Wir unterdrücken die Abhängigkeit der Operatoren H_α , $H_{\alpha,0}$ und $H_{\text{el}}^{(\alpha)}$ von der Kernladungszahl \mathfrak{Z} , da wir diese als festen Parameter betrachten.

An dem Operator (VI.2) fällt zweierlei auf: Erstens ist der Vorfaktor vor dem Photonenfeld nur $\sqrt{\alpha}$ und nicht $\alpha^{3/2}$ wie im nicht-relativistischen Fall. Zweitens hängt der elektronische Operator $D_{\alpha,\mathfrak{Z}}$ im Gegensatz zum nicht-relativistischen Fall von der Feinstrukturkonstanten ab. Der Grenzwert $\alpha \rightarrow 0$ entspricht in dieser Skalierung dem nicht-relativistischen Grenzfall. Bei der Behandlung der Resonanzen für diesen Operator wird nun auch der Abstand der Eigenwerte mit α klein, was es erforderlich macht, die Abschätzungen an den Feshbach-Operator zu verbessern.

Trotzdem verwenden wir wie im nicht-relativistischen Fall den Störungsparameter $g = \alpha^{3/2}$. Zur Übersicht fügen wir eine Tabelle ein, die verschiedene Potenzen von α und g miteinander vergleicht:

$\sqrt{\alpha}$	$g^{1/3}$
α	$g^{2/3}$
$\alpha^{3/2}$	g
α^2	$g^{4/3}$

Wir definieren nun die (komplexe) Dilatation dieser Operatoren. Auf dieselbe Weise wie im nicht-relativistischen Fall definieren wir auf $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \otimes \mathcal{F}$ für reelle θ eine unitäre Dilatation $\mathcal{U}(\theta)$. Wir erhalten auf diese Weise den Operator

$$H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) := \mathcal{U}_{\text{el}}(\theta) H_{\text{el}}^{(\alpha)} \mathcal{U}_{\text{el}}(\theta^{-1}) = \Lambda_{\alpha^{-1},\mathfrak{Z}}^{(+)}(\theta) [D_{\alpha^{-1},\mathfrak{Z}}(\theta) - \alpha^{-2}] \Lambda_{\alpha^{-1},\mathfrak{Z}}^{(+)}(\theta)$$

auf $\Lambda_{\alpha^{-1},\mathfrak{Z}}^{(+)}(\theta) L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$, der auf $\text{Dom}(H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta)) = \Lambda_{\alpha^{-1},\mathfrak{Z}}^{(+)}(\theta) H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ selbstadjungiert ist, sowie die Operatoren

$$H_\alpha(\theta) := \Lambda_{\alpha^{-1},\mathfrak{Z}}^{(+)}(\theta) [D_{\alpha^{-1},\mathfrak{Z}} - \alpha^{-2} - \sqrt{\alpha} \boldsymbol{\alpha} \cdot A_\kappa^{(\theta)}(\alpha x)] \Lambda_{\alpha^{-1},\mathfrak{Z}}^{(+)}(\theta) + e^{-\theta} H_f$$

$$W^{(\alpha)}(\theta) := \sqrt{\alpha} \Lambda_{\alpha^{-1},\mathfrak{Z}}^{(+)}(\theta) [\boldsymbol{\alpha} \cdot A_\kappa^{(\theta)}(\alpha x)] \Lambda_{\alpha^{-1},\mathfrak{Z}}^{(+)}(\theta)$$

$$H_{\alpha,0}(\theta) := \Lambda_{\alpha^{-1},\mathfrak{Z}}^{(+)}(\theta) D_{\alpha^{-1},\mathfrak{Z}}(\theta) \Lambda_{\alpha^{-1},\mathfrak{Z}}^{(+)}(\theta) + e^{-\theta} H_f - \alpha^{-2}$$

auf $\Lambda_{\alpha^{-1},\mathfrak{Z}}^{(+)}(\theta) L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \otimes \mathcal{F}$. Hierbei ist $A_\kappa^{(\theta)}(x) := A_\kappa^{(\theta)}(x)_+ + A_\kappa^{(\theta)}(x)_-$, wobei

$$A_\kappa^{(\theta)}(x)_+ := \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk G_x^{(\bar{\theta})}(k, \mu)^* a_\mu^*(k)$$

und

$$A_\kappa^{(\theta)}(x)_- := \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk G_x^{(\theta)}(k, \mu) a_\mu(k)$$

gilt mit

$$G_x^{(\theta)}(k, \mu) := \frac{e^{-\theta} \kappa(e^{-\theta} |k|)}{\sqrt{4\pi^2 |k|}} e^{ik \cdot x} \epsilon_\mu(k).$$

Wir werden in Kapitel VI.2 zeigen, dass diese Operatoren eine holomorphe Fortsetzung für gewisse komplexe θ zulassen.

Für später definieren wir außerdem

$$(VI.3) \quad W_{1,0}^{(\alpha)}(\theta) := \sqrt{\alpha} \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) [\boldsymbol{\alpha} \cdot A_{\kappa}^{(\theta)}(\alpha x)_+] \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta)$$

$$(VI.4) \quad W_{0,1}^{(\alpha)} := \sqrt{\alpha} \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) [\boldsymbol{\alpha} \cdot A_{\kappa}^{(\theta)}(\alpha x)_-] \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta)$$

$$(VI.5) \quad w_{0,1}(k, \mu; \theta) := \sqrt{\alpha} \boldsymbol{\alpha} \cdot G_{\alpha x}^{(\theta)}(k, \mu)$$

$$(VI.6) \quad w_{1,0}(k, \mu; \theta) := w_{0,1}(k, \mu; \bar{\theta})^*.$$

Mit den Bezeichnungen aus Kapitel III.2.3 definieren wir die Projektionen

$$\begin{aligned} P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) &:= P_{n,l}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta) & P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} &:= P_{n,l}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0) \\ P_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta) &:= P_n(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta) & P_{\text{el},n}^{(\alpha)} &:= P_n(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0) \\ \bar{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta) &:= \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) - P_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta) & \bar{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)} &:= \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} - P_{\text{el},n}^{(\alpha)} \\ \bar{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) &:= P_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta) - P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) & \bar{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} &:= P_{\text{el},n}^{(\alpha)} - P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \\ \underline{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) &:= \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) - P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) & \underline{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} &:= \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} - P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \end{aligned}$$

als Operatoren auf $\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta)L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ bzw. $\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$. Ferner benötigen wir für ein $\eta > 0$ wie in Kapitel III.2.5 die Projektionen

$$(VI.7) \quad P_{\text{disc}}(\alpha; \theta) := P_{\text{disc},\tilde{n}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta) = \sum_{1 \leq n' \leq \tilde{n}} P_{n'}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta)$$

und

$$(VI.8) \quad \bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta) := \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) - P_{\text{disc}}(\alpha; \theta)$$

ebenfalls als Operatoren auf $\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta)L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$. η wird dabei so gewählt, dass $\tilde{n} > n$ gilt. Des Weiteren setzen wir

$$\begin{aligned} \delta_{n,l,\pm}(\alpha) &:= \begin{cases} |E_{n,l}(\alpha) - E_{n,l\pm 1}(\alpha)|/2 & 1 < l < n \\ |E_{n,l}(\alpha) - E_{n,l+1}(\alpha)|/2 & l = 1 \\ |E_{n,l}(\alpha) - E_{n,l-1}(\alpha)|/2 & l = n \end{cases} \\ \delta_{n,l}(\alpha) &:= \min\{\delta_{n,l,+}(\alpha), \delta_{n,l,-}(\alpha)\} \\ \delta_{n,\pm} &:= |E_n - E_{n\pm 1}|/2 \\ \delta_n &:= \min\{\delta_{n,+}, \delta_{n,-}\}, \end{aligned}$$

wobei wir (vgl. Formel (II.8)) für $n \in \mathbb{N}$ und für $1 \leq l \leq n$

$$\begin{aligned} E_n &:= E_{n,l}(\infty, \mathfrak{Z}) \\ E_{n,l}(\alpha) &:= E_{n,l}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}) \end{aligned}$$

definieren. Wir bemerken, dass $\delta_{n,l}(\alpha) = \delta_{n,l,\pm}(\alpha)$ gilt für $l = 1$ oder $l = n$. Die Abhängigkeit dieser Größen von α werden wir stellenweise unterdrücken, um die Notation zu verkürzen.

Wegen Gleichung (II.6) gilt für alle $\alpha < \alpha_0$ mit einem hinreichend kleinen $\alpha_0 > 0$ die Ungleichung

$$(VI.9) \quad c_1 \alpha^2 \leq \delta_{n,l,\pm}(\alpha) \leq c_2 \alpha^2$$

mit zwei Konstanten $0 < c_1 < c_2$ unabhängig von α und l .

Als relativistisches Analogon zu den Operatoren (V.10) und (V.11) definieren wir

$$(VI.10) \quad Z_{n,l,\pm}^{od}(\alpha) := \lim_{\epsilon \downarrow 0} \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk P_{el,n,l}^{(\alpha)} w_{0,1}(k, \mu; 0) \\ \times \underline{P}_{el,n,l}^{(\alpha)} \left[\underline{P}_{el,n,l}^{(\alpha)} H_{el}^{(\alpha)} - E_{n,l}(\alpha) + |k| \pm i\epsilon \right]^{-1} \underline{P}_{el,n,l}^{(\alpha)} w_{1,0}(k, \mu; 0) P_{el,n,l}^{(\alpha)}$$

und

$$(VI.11) \quad Z_{n,l}^d(\alpha) := \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} \frac{dk}{|k|} P_{el,n,l}^{(\alpha)} w_{0,1}(k, \mu; 0) P_{el,n,l}^{(\alpha)} w_{1,0}(k, \mu; 0) P_{el,n,l}^{(\alpha)}$$

sowie

$$(VI.12) \quad Z_{n,l,\pm}(\alpha) := Z_{n,l}^d(\alpha) + Z_{n,l,\pm}^{od}(\alpha)$$

als Operatoren auf $\text{Ran } P_{el,n,l}^{(\alpha)}$. Außerdem definieren wir θ -abhängige Versionen der Operatoren $Z_{n,l,\pm}(\alpha)$ (vgl. Formel (V.15)). Wir setzen für $\text{Im } \theta \neq 0$

$$Z_{n,l}(\alpha; \theta) := \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk P_{el,n,l}^{(\alpha)}(\theta) w_{0,1}(k, \mu; \theta) \\ \times \underline{P}_{el,n,l}^{(\alpha)}(\theta) \left[\underline{P}_{el,n,l}^{(\alpha)}(\theta) H_{el}^{(\alpha)}(\theta) - E_{n,l}(\alpha) + e^{-\theta}|k| \right]^{-1} \underline{P}_{el,n,l}^{(\alpha)}(\theta) w_{1,0}(k, \mu; \theta) P_{el,n,l}^{(\alpha)}(\theta) \\ + \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} \frac{dk}{e^{-\theta}|k|} P_{el,n,l}^{(\alpha)}(\theta) w_{0,1}(k, \mu; \theta) P_{el,n,l}^{(\alpha)}(\theta) w_{1,0}(k, \mu; \theta) P_{el,n,l}^{(\alpha)}(\theta).$$

Es gilt

$$Z_{n,l}(\alpha; \theta) = \mathcal{U}_{el}(\theta) Z_{n,l,-}(\alpha) \mathcal{U}_{el}(\theta)^{-1}$$

für $\text{Im } \theta > 0$ und

$$Z_{n,l}(\alpha; \theta) = \mathcal{U}_{el}(\theta) Z_{n,l,+}(\alpha) \mathcal{U}_{el}(\theta)^{-1}$$

für $\text{Im } \theta < 0$. Man beachte, dass $\mathcal{U}_{el}(\theta)$ eingeschränkt auf $\text{Ran } P_{el,n,l}^{(\alpha)}$ eine Ähnlichkeitstransformation ist (Lemma III.27).

Es ist leicht zu sehen, dass der Imaginärteil von $Z_{n,l,\pm}(\alpha)$ gegeben ist durch (vgl. Gleichung (V.17) in Bemerkung V.5 für das Pauli-Fierz-Modell)

$$\text{Im } Z_{n,l,\pm}(\alpha) = \mp \pi \sum_{\substack{n',l': \\ E_{n',l'}(\alpha) < E_{n,l}(\alpha)}} \sum_{\mu=1,2} \int_{|\omega|=1} d\omega (E_{n',l'}(\alpha) - E_{n,l}(\alpha))^2 \\ \times P_{el,n,l}^{(\alpha)} w_{0,1}((E_{n,l}(\alpha) - E_{n',l'}(\alpha))\omega, \mu; 0) P_{el,n',l'}^{(\alpha)} \\ \times w_{1,0}((E_{n,l}(\alpha) - E_{n',l'}(\alpha))\omega, \mu; 0) P_{el,n,l}^{(\alpha)}.$$

Es wird sich zeigen, dass die Lebensdauer in niedrigster Ordnung in der Feinstrukturkonstanten α durch denselben Ausdruck gegeben ist wie im nicht-relativistischen Fall. Wir definieren daher (vgl. Gleichung (V.18) im Pauli-Fierz-Modell)

$$(VI.13) \quad Z_{n,l,\text{im}} = g^2 \frac{2}{3} \sum_{\substack{1 \leq n' < n \\ 1 \leq l \leq n}} (-E_{n'} + E_n)^3 \\ \times \kappa (|-E_{n'} + E_n|)^2 P_{el,n,l}^{(0)} x P_{el,n',l'}^{(0)} x P_{el,n,l}^{(0)}$$

und

$$(VI.14) \quad Y_{n,l,\pm}(\alpha) := \mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0)^{-1} \text{Re } Z_{n,l}(\alpha) \mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0) \mp i Z_{n,l,\text{im}}$$

als Operatoren auf $\text{Ran } P_{\text{el},n,l}^{(0)}$, wobei

$$\text{Ran } P_{\text{el},n,l}^{(0)} := \mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0)^{-1} P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0).$$

Zur Abkürzung setzen wir

$$Z_{n,l}(\alpha) := Z_{n,l,-}(\alpha), \quad Y_{n,l}(\alpha) := Y_{n,l,-}(\alpha).$$

Man beachte, dass im Gegensatz zum Pauli-Fierz-Modell die Kopplungskonstante g in den Definitionen der Objekte $Z_{n,l}(\alpha)$, $Y_{n,l}(\alpha)$ usw. enthalten ist. Aus Gleichung (VI.13) sehen wir, dass Übergänge zwischen den Feinstrukturkomponenten einer Hauptquantenzahl in niedrigster Ordnung in α keine Rolle spielen.

Man beachte, dass wir die Abhängigkeit von α lediglich aus dem Imaginärteil entfernen, da eine Diskussion des Realteils, der die Lamb-Verschiebung [100, 23] liefert (siehe auch Bemerkung VI.3), ohne Ultraviolett-Renormierung nicht sinnvoll ist. Die Lamb-Verschiebung ist im Übrigen auch für die experimentelle Messung der mittleren Lebensdauer mit der so genannten „beam-foil“-Methode [33, 49, 25, 26] unerheblich.

Wir können nun den Hauptsatz dieses Kapitels formulieren. Wir fixieren dazu ein $n > 2$. Da man $Z_{n,l,\text{im}}$ aus der entsprechenden Matrix im nicht-relativistischen Fall durch Einschränkung der zugehörigen quadratischen Form auf $\text{Ran } P_{\text{el},n,l}^{(0)}$ erhält, sehen wir sofort, dass dann $Z_{n,l,\text{im}}$ für alle $1 \leq l \leq n$ strikt positiv ist (vgl. Kapitel V.4). In der Tat werden wir im Beweis den Feshbach-Operator und die Matrizes $Z_{n,l,\pm}(\alpha)$ und $Y_{n,l,\pm}(\alpha)$ für *alle* Feinstrukturkomponenten zur betrachteten Hauptquantenzahl benötigen und nicht nur für diejenige Feinstrukturkomponente, an deren Lebensdauer wir interessiert sind.

SATZ VI.1. *Es sei $n > 2$ und $\phi(\alpha)$ ein normierter Eigenvektor von $H_{\text{el}}^{(\alpha)}$ mit Eigenwert $E_{n,l}(\alpha)$, $\psi(\alpha) := \phi(\alpha) \otimes \Omega$ und $\phi(0) := \mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0)^{-1} \phi(\alpha)$. Dann gibt es ein $C > 0$, so dass für alle $\alpha > 0$ klein genug und alle $s \geq 0$*

$$\langle \psi(\alpha), e^{-isH_\alpha} \psi(\alpha) \rangle = \langle \phi(0), e^{-is(E_{n,l}(\alpha) - Y_{n,l}(\alpha))} \phi(0) \rangle + b(g, s)$$

gilt, wobei $|b(g, s)| \leq C\sqrt{\alpha}$.

Wir werden Satz VI.1 in Kapitel VI.6 beweisen.

BEMERKUNG VI.2. Wenn wir die Definition (VI.14) von $Y_{n,l}(\alpha)$ mit der Formel (V.18) im nicht-relativistischen Fall vergleichen, sehen wir, dass die Lebensdauer eines angeregten Zustandes in dem relativistischen Modell dieselbe ist, wie im Pauli-Fierz-Modell. Relativistische Effekte spielen also beim Zerfall angeregter Zustände durch elektrische Dipolübergänge eine untergeordnete Rolle. Jedoch scheint es beim Zerfall des metastabilen $2s$ -Zustandes des Wasserstoffs einen kleinen relativistischen Beitrag zu geben (siehe Breit und Teller [29]).

BEMERKUNG VI.3. Dass im Operator (VI.2) der Fall kleiner Feinstrukturkonstanten α zu einem nicht-relativistischen Grenzfall führt, ist technischer Natur. Man beachte, dass im Operator (VI.1) die Lichtgeschwindigkeit \mathfrak{c} nicht nur in der Feinstrukturkonstanten $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar\mathfrak{c}}$ auftritt. Insofern ist „ α klein“ nicht vollständig äquivalent zu „ \mathfrak{c} groß“, auch wenn die oben verwendete Transformation U dazu verwendet werden kann, um aus der Kenntnis bestimmter Eigenschaften in dem einen Grenzfall Aussagen über den jeweils anderen zu gewinnen. Physikalisch gesehen sollte der von uns betrachtete Fall kleiner α als der Fall kleiner Elementarladungen e – ebenso wie im Pauli-Fierz-Modell – interpretiert werden.

Cohen-Tannoudji et. al [35, Kapitel V-V.2, Seite 432 ff.] vertreten die Ansicht, dass das Pauli-Fierz-Modell der nicht-relativistische Grenzfall eines kovarianten relativistischen Modells ist. Arai [4] hat dies für ein Elektron unter der zusätzlichen Annahme eines Cutoffs in der Feldenergie und im geraden Teil des äußeren Potentials bewiesen. Der Fall des Coulomb-Dirac-Operators ohne zusätzliche Annahmen scheint noch offen zu sein. Man beachte, dass im Operator (VI.1) die in der Definition (V.2) bzw. (V.3) von $A'_{\kappa'}(x)$ sowie der Definition (V.1) von H'_f enthaltenen Faktoren \mathfrak{c} mit herauskaliert wurden, während [4, 35] diesen Faktor nicht berücksichtigen. Die Vorgehensweise von Cohen-Tannoudji et. al und Arai ist durchaus üblich; auch Thaller (siehe [141, Remark 2 in Kapitel 6.1.1]) absorbiert bei der Diskussion des nicht-relativistischen Grenzfalls einen Faktor \mathfrak{c} im (klassischen) Vektorpotential. Mit anderen Worten betrachten Arai, Cohen-Tannoudji et al. und Thaller einen nicht-relativistischen Grenzfall bezüglich des elektronischen Anteils des Operators. Alle im Zusammenhang mit dem quantisierten oder nicht quantisierten Strahlungsfeld stehenden Faktoren \mathfrak{c} werden nicht in die Betrachtung des nicht-relativistischen Grenzfalls eingeschlossen. Insofern würde die Betrachtung des Falls großer Lichtgeschwindigkeit \mathfrak{c} im Operator (VI.1) nicht mit dem nicht-relativistischen Grenzfall im Sinne von Arai, Cohen-Tannoudji oder Thaller übereinstimmen.

Die vorliegende Arbeit zeigt, dass das Pauli-Fierz-Modell durchaus in der Lage ist, gewisse Aspekte – wie die Lebensdauer eines angeregten Zustandes – einer relativistischen Theorie richtig wiederzugeben. Da jedoch die Lamb-Verschiebung – also die Verschiebung der atomaren Spektrallinien durch die Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld – wesentlich kleiner ist [100] als die Feinstrukturaufspaltung, ist andererseits nicht zu erwarten, dass das Pauli-Fierz-Modell die experimentell beobachteten Spektrallinien korrekt vorhersagen kann. Nichtsdestoweniger stellt sich die Frage, inwieweit eine nicht-relativistische Theorie wie das Pauli-Fierz-Modell Vorhersagen über die Lamb-Verschiebung treffen kann.

Die Lamb-Verschiebung wurde in der physikalischen Literatur ausführlich diskutiert. Lamb und Retherford erhielten für die Aufspaltung zwischen dem $2s_{1/2}$ -Zustand und dem $2p_{1/2}$ -Zustand einen experimentellen Wert von zunächst 1000 MHz [100, 101] und wenig später [102] einen Wert von 1062 ± 5 MHz.

Bethe [23] erhielt aus einer nicht-relativistischen Theorie in Dipol-Näherung für den $2s$ -Zustand des Wasserstoffatoms einen Wert von 1040 MHz, der gut mit dem experimentellen übereinstimmt, indem er ad hoc einen Cutoff in Höhe der Ruheenergie des Elektrons einführte.

Au und Feinberg [6] erhielten – ebenfalls in einer nicht-relativistischen Rechnung – *ohne* Verwendung der Dipolnäherung, dass die Energiedifferenz ohne Renormierung endlich ist. Je nach verwendeter Methode fanden sie einen numerischen Wert von 950.5 MHz oder 996.6 MHz, was nicht besonders gut mit dem Experiment übereinstimmt (vgl. auch [5], wo die numerischen Werte nochmals geringfügig korrigiert wurden). Grotch [72] fand unter Berücksichtigung des Zeeman-Terms einen Wert von 1030.9 MHz (siehe jedoch auch das Erratum [71] zur Frage der Massenrenormierung).

Kroll und Lamb [98] fanden mit einer relativistischen Rechnung 1052 MHz, French und Weisskopf [57] erhielten ebenfalls mit einer relativistischen Rechnung 1051 MHz. Für eine detailliertere Diskussion der relativistischen und nicht-relativistischen Quantenelektrodynamik einschließlich der Lamb-Verschiebung verweisen wir auf [114].

Der Beitrag der Vakuumpolarisation zur Lamb-Verschiebung wurde von Hainzl und Siedentop [75] ohne Verwendung störungstheoretischer Methoden behandelt. Eine mathematisch rigorose und nicht störungstheoretische Behandlung des photonischen Anteils der Lamb-Verschiebung scheint insbesondere für relativistische Modelle noch auszustehen.

VI.2. Selbstadjungiertheit und Dilatationsanalytizität

Bevor wir in den folgenden Kapiteln den Operator H_α im Detail untersuchen können, müssen wir zunächst seine Selbstadjungiertheit beweisen und untersuchen, in welchen Sinne die Operatoren $H_\alpha(\theta)$ eine holomorphe Familie sind.

SATZ VI.4. *Es sei $0 < \alpha\mathfrak{J} < \sqrt{3}/2$. Dann gilt: Der Operator*

$$H_\alpha : \mathcal{D} \subset (\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)) \otimes \text{Dom}(H_f) \rightarrow (\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)) \otimes \mathcal{F}$$

ist auf $\mathcal{D} := \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \hat{\otimes} \text{Dom}(H_f)$ wesentlich selbstadjungiert, wobei $\hat{\otimes}$ das algebraische Tensorprodukt bezeichnet.

BEWEIS. Wegen [141, Theorem 4.4] ist $H_{\text{el}}^{(\alpha)} + \alpha^{-2}$ auf dem Definitionsbereich $\text{Dom}(H_{\text{el}}^{(\alpha)}) = \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ selbstadjungiert und positiv. Da H_f auf einem geeigneten Definitionsbereich $\text{Dom}(H_f)$ selbstadjungiert und positiv ist, folgt aus [122, Theorem VIII.33], dass $H_{\alpha,0} + \alpha^{-2}$ auf dem (algebraischen) Tensorprodukt $\mathcal{D} = \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \hat{\otimes} \text{Dom}(H_f)$ wesentlich selbstadjungiert und positiv ist. Es gilt für alle $\psi \in \mathcal{D}$ und alle $\epsilon > 0$ mit einem $C > 0$ (siehe z.B. [13, Beweis von Lemma 1.1])

$$\begin{aligned} \|W^{(\alpha)}\psi\| &\leq C\sqrt{\alpha}\|(H_f + 1)^{1/2}\psi\| \leq C\sqrt{\alpha}(\|\psi\| + \sqrt{\|\psi\|\|H_f\psi\|}) \\ &\leq C\sqrt{\alpha}\left[\left(1 + \frac{1}{2\epsilon}\right)\|\psi\| + \frac{\epsilon}{2}\|H_f\psi\|\right] \leq C\sqrt{\alpha}\left[\left(1 + \frac{1}{2\epsilon}\right)\|\psi\| + \frac{\epsilon}{2}\|(H_{\alpha,0} + \alpha^{-2})\psi\|\right]. \end{aligned}$$

Folglich ist $W^{(\alpha)}$ infinitesimal $(H_{\alpha,0} + \alpha^{-2})$ -beschränkt und somit $H_\alpha + \alpha^{-2}$ (und damit auch H_α) auf $\text{Dom}(H_{\alpha,0})$ wesentlich selbstadjungiert. \square

Wir bezeichnen die in Satz VI.4 definierten selbstadjungierten Operatoren wieder mit H_α bzw. $H_{\alpha,0}$.

Wir wenden uns nun den Operatoren $H_\alpha(\theta)$ und $H_{\alpha,0}(\theta)$ auf dem Definitionsbereich $\text{Dom}(H_\alpha(\theta)) = \text{Dom}(H_{\alpha,0}(\theta)) = \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta)H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \hat{\otimes} \text{Dom}(H_f)$ zu. Im folgenden Satz zeigen wir, dass die Familien von Operatoren

$$(VI.15) \quad U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta)H_\alpha(\theta)U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta)^{-1}, \\ U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta)H_{\alpha,0}(\theta)U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta)^{-1}$$

definiert im Hilbert-Raum $\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \otimes \mathcal{F}$ mit Definitionsbereich $U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta)\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta)H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \hat{\otimes} \text{Dom}(H_f)$, holomorphe Familien vom Typ (B) auf geeigneten Definitionsbereichen bestimmen. Wir schreiben auch für den Operator $U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta) \otimes \mathbf{1}_f$ kurz $U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta)$.

SATZ VI.5. *Es sei $\theta \in S_{\pi/4}$, $2\alpha\mathfrak{Z}C(\theta) < 1$, $C_{\text{DL}}|\theta| < q$ und $C_{\text{DLS}}|\theta| < q$ für ein $0 < q < 1$. Dann gibt es ein $\theta_0 > 0$ unabhängig von $0 < \alpha \leq 1$, so dass für alle $|\theta| \leq \theta_0$ die Operatoren (VI.15) holomorphe Familien von Operatoren $\tilde{H}_\alpha(\theta)$ bzw. $\tilde{H}_{\alpha,0}(\theta)$ vom Typ (B) auf einem geeigneten Definitionsbereich $\text{Dom}(\tilde{H}_\alpha(\theta)) = \text{Dom}(\tilde{H}_{\alpha,0}(\theta))$ definieren. Diese Operatoren sind m -sektoriell.*

BEWEIS. Zunächst ist der Ausdruck

$$q_{\alpha^{-1},0}(\psi) := \langle \psi, (D_{\alpha^{-1},3} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes H_f)\psi \rangle$$

für $\psi \in \mathcal{D}$ eine positive abschließbare quadratische Form, deren Abschluss $\tilde{q}_{\alpha^{-1},0}$ einen selbstadjungierten Operator definiert, der mit dem in Satz VI.4 definierten Operator $H_{\alpha,0}$ übereinstimmt. Es gilt $\text{Dom}(\tilde{q}_{\alpha^{-1},0}) = \text{Dom}((H_{\alpha,0} + \alpha^{-2})^{1/2})$. Für $\psi \in \text{Dom}(\tilde{q}_{\alpha^{-1},0})$ gilt insbesondere

$$\begin{aligned} \||D_{\alpha^{-1},3}|^{1/2}\psi\| &= \|(\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}D_{\alpha^{-1},3}\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)})^{1/2}\psi\| \\ &\leq \|(\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}D_{\alpha^{-1},3}\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes H_f)^{1/2}\psi\| < \infty, \end{aligned}$$

und auf dieselbe Weise sehen wir $\|(H_f + 1)^{1/2}\psi\| < \infty$.

Für $\psi \in \text{Dom}(\tilde{q}_{\alpha^{-1},0})$ finden wir daher

$$(VI.16) \quad \begin{aligned} &\langle \psi, U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta)D_{\alpha^{-1},3}(\theta)U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta)^{-1}\psi \rangle \\ &= \langle |D_{\alpha^{-1},3}|^{1/2}\psi, |D_{\alpha^{-1},3}|^{-1/2}|D_{\alpha^{-1},0}|^{1/2} \\ &\quad \times |D_{\alpha^{-1},0}|^{-1/2}U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta)D_{\alpha^{-1},3}(\theta)U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta)^{-1}|D_{\alpha^{-1},0}|^{-1/2} \\ &\quad \times |D_{\alpha^{-1},0}|^{1/2}|D_{\alpha^{-1},3}|^{-1/2}|D_{\alpha^{-1},3}|^{1/2}\psi \rangle. \end{aligned}$$

Wegen Lemma III.14 und Lemma III.12 gilt somit

$$|\langle \psi, U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta)D_{\alpha^{-1},3}(\theta)U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta)^{-1}\psi \rangle - \langle \psi, D_{\alpha^{-1},3}\psi \rangle| \leq C|\theta|\langle \psi, D_{\alpha^{-1},3}\psi \rangle$$

mit einem $C > 0$ unabhängig von α und θ . Außerdem gilt

$$|e^{-\theta}\langle \psi, H_f\psi \rangle - \langle \psi, H_f\psi \rangle| \leq B|\theta|\langle \psi, H_f\psi \rangle$$

mit $B := e^{\pi/4}$.

Wegen $\|W^{(\alpha)}(\theta)(H_f + 1)^{-1/2}\| \leq \sqrt{\alpha}C_1$ mit einem $C_1 > 0$ unabhängig von θ und α (siehe z.B. [13, Beweis von Lemma 1.1]) erhalten wir für alle $\epsilon > 0$

$$\begin{aligned}
\text{(VI.17)} \quad & |\langle \psi, U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta) W^{(\alpha)}(\theta) U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta)^{-1} \psi \rangle| \\
& = |\langle \psi, U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta) W^{(\alpha)}(\theta) (H_f + 1)^{-1/2} U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta)^{-1} (H_f + 1)^{1/2} \psi \rangle| \\
& \leq \sqrt{\alpha} C_1 (1 + C_{\text{DL}} |\theta|)^2 [(1/\epsilon^2 + \epsilon^2) \|\psi\|^2 + \epsilon^2 \langle \psi, H_f \psi \rangle].
\end{aligned}$$

Folglich ist die für $\psi \in \text{Dom}(\tilde{q}_{\alpha^{-1},0})$ definierte quadratische Form

$$p_{\alpha^{-1},\theta}(\psi) := \langle \psi, (H_\alpha + \alpha^{-2}) \psi \rangle$$

für hinreichend kleine $|\theta|$ wohldefiniert. Wählen wir $|\theta|$ so klein, dass $(C + B)|\theta| < 1$ gilt, und dann in (VI.17) $\epsilon > 0$ (in Abhängigkeit von θ) klein genug, so sehen wir, dass die quadratische Form $p_{\alpha^{-1},\theta} - \tilde{q}_{\alpha,0}$ relativ $\tilde{q}_{\alpha,0}$ -beschränkt ist mit Formschranke kleiner 1.

Wegen [97, Theorem VI-1.33] ist die quadratische Form $p_{\alpha^{-1},\theta}$ abgeschlossen mit $\text{Dom}(p_{\alpha^{-1},\theta}) = \text{Dom}(\tilde{q}_{\alpha^{-1},0})$ und sektoriell. Außerdem gilt

$$\begin{aligned}
& |D_{\alpha^{-1},0}|^{-1/2} U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta) D_{\alpha^{-1},3}(\theta) U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta)^{-1} |D_{\alpha^{-1},0}|^{-1/2} \\
& = |D_{\alpha^{-1},0}|^{-1/2} U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta) |D_{\alpha^{-1},0}|^{1/2} |D_{\alpha^{-1},0}|^{-1/2} D_{\alpha^{-1},3}(\theta) |D_{\alpha^{-1},0}|^{-1/2} \\
& \quad \times |D_{\alpha^{-1},0}|^{1/2} U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta)^{-1} |D_{\alpha^{-1},0}|^{-1/2}.
\end{aligned}$$

Wegen Gleichung (VI.16) und Satz III.13 c) hängt $\langle \psi, U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta) D_{\alpha^{-1},3}(\theta) \times U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta)^{-1} \psi \rangle$ für alle $\psi \in \text{Dom}(p_{\alpha^{-1},\theta})$ holomorph von θ ab. Es ist leicht zu sehen, dass

$$(H_f + 1)^{-1/2} U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta) W^{(\alpha)}(\theta) U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta)^{-1} (H_f + 1)^{-1/2}$$

beschränkt und holomorph ist, woraus folgt, dass

$$\langle \psi, U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta) W^{(\alpha)}(\theta) U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta)^{-1} \psi \rangle$$

holomorph von θ abhängt. Folglich hängt $p_{\alpha^{-1},\theta}(\psi)$ für alle $\psi \in \text{Dom}(p_{\alpha^{-1},\theta}) = \text{Dom}(\tilde{q}_{\alpha^{-1},0})$ holomorph von θ ab. Die durch diese Familie von quadratischen Formen definierte Familie von m-sektoriellen Operatoren ist somit eine holomorphe Familie vom Typ (B) (siehe [97, Kapitel VII-4.2]). Der Beweis für den Operator ohne Wechselwirkung verläuft analog. Wegen $\|W^{(\alpha)}(\theta)(H_f + 1)^{-1/2}\| \leq \sqrt{\alpha} C_1$ (siehe oben) ist die Wechselwirkung zum freien Operator infinitesimal (Operator)-beschränkt, woraus die Gleichheit der Definitionsbereiche folgt. \square

BEMERKUNG VI.6. Der obige Beweis zeigt auch, dass für hinreichend kleine $|\theta|$ die Operatoren $U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta) D_{\alpha^{-1},3}(\theta) U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}; \theta)^{-1} \Big|_{\text{Ran } \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}}$ auf dem Raum

$\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)} L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ sektoriell sind. Insbesondere sind die Voraussetzungen des Ichinose-Lemmas (siehe [124, Corollary 2 auf Seite 183] oder [91]) erfüllt, so dass

$$\begin{aligned}
\sigma(D_{\alpha^{-1},3}(\theta) \Big|_{\text{Ran } \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}}(\theta) \otimes \mathbf{1}_f + e^{-\theta} \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f) & = \\
& = \sigma(D_{\alpha^{-1},3}(\theta) \Big|_{\text{Ran } \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}}(\theta)) + e^{-\theta} \sigma(H_f)
\end{aligned}$$

gilt. Wir bemerken, dass das Ichinose-Lemma auch noch unter etwas allgemeineren Voraussetzungen gilt, jedoch auch Gegenbeispiele existieren, wenn diese Voraussetzungen nicht erfüllt sind (siehe Herbst [84, 83]).

Wir werden im Folgenden die Operatoren $U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta)^{-1} \tilde{H}_\alpha(\theta) U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta)$ und $U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta)^{-1} \tilde{H}_{\alpha,0}(\theta) U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta)$ auf den jeweiligen Definitionsbereichen $U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta)^{-1} \text{Dom}(\tilde{H}_\alpha(\theta))$ bzw. $U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta)^{-1} \text{Dom}(\tilde{H}_{\alpha,0}(\theta))$ betrachten und diese Operatoren wieder mit $H_\alpha(\theta)$ bzw. $H_{\alpha,0}(\theta)$ bezeichnen.

VI.3. Technische Lemmata

In diesem Abschnitt formulieren und beweisen wir alle technischen Aussagen, die wir im folgenden Abschnitt benötigen werden, um die Existenz des Feshbach-Operators sicherzustellen und um ihn durch geeignete andere Operatoren approximieren zu können.

Auf Grund der Dilatationsanalytizität können wir uns in den folgenden Betrachtungen auf $\theta = i\vartheta$ mit $0 < \vartheta < \theta_0$ beschränken. Wir wählen dabei θ_0 so klein, dass sowohl die Aussagen von Satz VI.5 als auch die Aussagen in Anhang B.1 Gültigkeit haben. Des Weiteren wählen wir für dieses θ_0 ein $\alpha_0 > 0$ so klein, dass die Aussagen aus Kapitel III.3 über den „nicht-relativistischen Grenzfall“ des Operators $D_{\alpha^{-1},3}(\theta)$ und Ungleichung (VI.9) gelten. Insbesondere sind alle vorkommenden Projektionen gleichmäßig in α und θ beschränkt.

Wir wählen $\rho, \sigma > 0$ und definieren die Mengen (siehe Abbildung VI.1)

$$\mathcal{A}_{n,l}^{\leq}(\alpha, \sigma) := [E_{n,l}(\alpha) - \delta_{n,l,-}(\alpha), E_{n,l}(\alpha) + \delta_{n,l,+}(\alpha)] + i[-\sigma, \infty), \quad 1 \leq l \leq n$$

und

$$\mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma) := \begin{cases} [E_{n,l}(\alpha) - \delta_{n,l,-}(\alpha), E_{n,l}(\alpha) + \delta_{n,l,+}(\alpha)] + i[-\sigma, \infty) & 1 < l < n \\ [E_n - \delta_{n,-}, E_{n,l}(\alpha) + \delta_{n,l,+}(\alpha)] + i[-\sigma, \infty) & l = 1 \\ [E_n - \delta_{n,l,-}(\alpha), E_n + \delta_{n,+}] + i[-\sigma, \infty) & l = n \end{cases}$$

sowie die Projektionen

$$P_{n,l}(\theta) := P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \otimes \chi_{H_f \leq \rho}, \quad \bar{P}_{n,l}(\theta) := \mathbf{1} - P_{n,l}(\theta)$$

und für $R > 0$

$$\bar{P}_{n,l}(\theta; R) := P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \chi_{H_f + R > \rho} + \underline{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{1}_f$$

als Operatoren auf $\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \otimes \mathcal{F}$. Man beachte, dass für $1 < l < n$ die Identität $\mathcal{A}_{n,l}^{\leq}(\alpha, \sigma) = \mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma)$ gilt. Des Weiteren definieren wir analog zu [13]

$$B_\theta(\rho) := \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) [H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) - E_{n,l}(\alpha) + e^{-\theta}(H_f + \rho)] \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta)$$

als Operator auf $\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \otimes \mathcal{F}$ mit Definitionsbereich

$$\text{Dom}(B_\theta(\rho)) = U_{\text{DL}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; \theta)^{-1} \text{Dom}(\tilde{H}_{\alpha,0}(\theta)).$$

Der Operator ist dicht definiert und abgeschlossen (vgl. Satz VI.5 und die darauf folgenden Bemerkungen). Folglich ist auch $B_\theta(\rho)^*$ dicht definiert und es gilt $B_\theta(\rho)^{**} = B_\theta(\rho)$. Man beachte, dass die Adjungierte im Sinne von $\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \otimes \mathcal{F}$ zu verstehen ist. Insbesondere ist $B_\theta(\rho)^* \neq B_{\bar{\theta}}(\rho)$. Wie im Pauli-Fierz-Modell ist $B_\theta(\rho)$ lediglich ein Hilfsobjekt, das in verschiedenen Resolventenentwicklungen eine Menge Kombinatorik erspart (vgl. Kapitel B.2). Man könnte alle Aussagen im Prinzip auch ohne Verwendung von $B_\theta(\rho)$ beweisen. Wir weisen darauf hin, dass alle Normen, Skalarprodukte und Adjungierten in diesem und den folgenden beiden Abschnitten im Sinne von $\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4)$ oder $\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \otimes \mathcal{F}$ zu verstehen sind.

Über ρ und σ werden wir später verfügen; wir werden ρ und σ als geeignete Funktionen der Kopplungskonstanten g wählen. Zunächst jedoch setzen wir nur voraus, dass σ und ρ nicht-negativ und durch eine Konstante nach oben beschränkt sind.

In den Beweisen in diesem und den folgenden Abschnitten bezeichnet C grundsätzlich eine generische, positive Konstante, die von α und ggf. von z unabhängig ist, jedoch eventuell von ϑ abhängt.

In den folgenden Lemmata beweisen wir zunächst einige Abschätzungen an die Resolvente des freien Operators $H_{\alpha,0}$ sowie des elektronischen Operators $H_{\text{el}}^{(\alpha)}$. Die Lemmata verallgemeinern und verfeinern entsprechende Aussagen und deren Beweise aus [13]. Dabei müssen wegen der Feinstrukturaufspaltung und der fehlenden Potenz von α in der Wechselwirkung eine Reihe zusätzlicher Schwierigkeiten überwunden werden.

LEMMA VI.7. *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$. Dann gelten die folgenden Aussagen:*

- a) *Es gibt ein $C > 0$, so dass für alle $\alpha \leq \alpha_0$, alle $\sigma \leq \frac{\delta_{n,l}(\alpha) \sin \vartheta}{2 \cos \vartheta}$, alle $R > 0$ und alle $z \in \mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma)$ gilt:*

$$(VI.18) \quad \left\| \left[\overline{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{1}_f(H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) + e^{-\theta}(H_f + R) - z) \overline{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{1}_f \right]^{-1} \overline{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{1}_f \right\| \leq \frac{C}{\delta_{n,l}(\alpha) \sin \vartheta}$$

- b) *Es gibt ein $C > 0$, so dass für alle $\rho > 0$, alle $\sigma \leq \frac{\rho \sin \vartheta}{2}$, alle $R \geq \rho$ und alle $z \in \mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma)$ gilt:*

$$(VI.19) \quad \left\| \left[\overline{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{1}_f(H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) + e^{-\theta}(H_f + R) - z) \overline{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{1}_f \right]^{-1} \overline{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{1}_f \right\| \leq \frac{C}{R \sin \vartheta}$$

- c) *Es gibt ein $C > 0$, so dass für alle $\alpha \leq \alpha_0$, alle $\sigma \leq \frac{\delta_n \sin \vartheta}{2 \cos \vartheta}$, alle $R > 0$ und alle $z \in \mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma)$ gilt:*

$$(VI.20) \quad \left\| \left[\overline{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{1}_f(H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) + e^{-\theta}(H_f + R) - z) \overline{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{1}_f \right]^{-1} \overline{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{1}_f \right\| \leq \frac{C}{\delta_n \sin \vartheta}$$

BEWEIS.

- a) Wir splitten die Projektion (und die Resolvente) gemäß

$$\overline{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) = \sum_{\substack{1 \leq l' \leq n \\ l' \neq l}} P_{\text{el},n,l'}^{(\alpha)}(\theta)$$

und verwenden diejenige Darstellung (Spektralsatz), in der H_f die Multiplikation mit der Variablen r ist. Um die Notation zu verkürzen, unterdrücken wir die Abhängigkeit der Eigenwerte $E_{n,l'}(\alpha)$ von α . Wir bemerken, dass für $E_{n,l'} < E_{n,l}$

$$(VI.21) \quad |E_{n,l'} - z + e^{-\theta}(r + R)| \geq \text{Im}(e^\theta(z - E_{n,l'})) \geq -(\cos \vartheta)\sigma + \sin \vartheta(\text{Re } z - E_{n,l'}) \geq \frac{\sin \vartheta \delta_{n,l}(\alpha)}{2}$$

und für $E_{n,l'} > E_{n,l}$

$$(VI.22) \quad |E_{n,l'} - z + e^{-\theta}(r + R)| \geq \text{Re}(E_{n,l'} - z + e^{-\theta}(r + R)) \geq \delta_{n,l}(\alpha)$$

gilt, was wegen Korollar III.28 die Behauptung zeigt. Falls $l = 1$ bzw. $l = n$, entfallen die Abschätzungen (VI.21) bzw. (VI.22). Wir haben in der ersten Abschätzung verwendet, dass $(\cos \vartheta)\sigma \leq \frac{\sin \vartheta \delta_{n,l}(\alpha)}{2}$ gilt.

b) Wir schätzen ab

$$\operatorname{Im}(-E_{n,l'} + z - e^{-\theta}(r + R)) \geq -\sigma + \sin \vartheta(r + R) \geq \frac{\sin \vartheta R}{2},$$

wobei wir verwendet haben, dass $\sigma \leq \frac{\sin \vartheta R}{2}$ gilt.

c) Wir splitten gemäß Gleichung (VI.7) die Projektion

$$\bar{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)} = \bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta) + \sum_{\substack{1 \leq n' \leq \bar{n} \\ n' \neq n}} P_{\text{el},n'}^{(\alpha)}(\theta)$$

und erhalten analog zum Beweis von Aussage a)

$$\left| \frac{1}{E_{n,l'} - z + e^{-\theta}(r + R)} \right| \leq \frac{C}{\delta_n \sin \vartheta}.$$

sowie mit Korollar III.21

$$\begin{aligned} & \left\| \left[\bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta) \otimes \mathbf{1}_f(H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) + e^{-\theta}(H_f + R) - z) \bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta) \otimes \mathbf{1}_f \right]^{-1} \bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta) \otimes \mathbf{1}_f \right\| \\ &= \sup_{r>0} \left\| \left[\bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta) \otimes \mathbf{1}_f(H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) + e^{-\theta}(r + R) - z) \bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta) \otimes \mathbf{1}_f \right]^{-1} \bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta) \otimes \mathbf{1}_f \right\| \\ & \leq \sup_{r>0} \frac{C}{-\eta - (\operatorname{Re} z - (r + R))} \leq \frac{C}{\delta_n}. \end{aligned}$$

□

LEMMA VI.8. *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$. Dann gelten die folgenden Aussagen:*

a) *Es gibt ein $C > 0$, so dass für alle $\alpha \leq \alpha_0$, alle $R > 0$, alle $\sigma \leq \min\left\{\frac{\delta_{n,l}(\alpha) \sin \vartheta}{2 \cos \vartheta}, \frac{\delta_n \sin \vartheta}{2 \cos \vartheta}, 1/2\rho \sin \vartheta\right\}$ und alle $z \in \mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma)$ gilt:*

$$(VI.23) \quad \left\| \left[\bar{P}_{n,l}(\theta; R)(H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) + e^{-\theta}(H_f + R) - z) \bar{P}_{n,l}(\theta; R) \right]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta; R) \right\| \leq \frac{C}{\min\{\delta_n, \delta_{n,l}(\alpha), \rho\} \sin \vartheta}$$

b) *Es gibt ein $C > 0$, so dass für alle $\alpha \leq \alpha_0$, alle $\sigma \leq \min\left\{\frac{\delta_{n,l}(\alpha) \sin \vartheta}{2 \cos \vartheta}, \frac{\delta_n \sin \vartheta}{2 \cos \vartheta}, 1/2\rho \sin \vartheta\right\}$ und alle $z \in \mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma)$ gilt:*

$$(VI.24) \quad \left\| \left[\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z) \bar{P}_{n,l}(\theta) \right]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) B_\theta(\rho) \right\| \leq \frac{C}{\sin \vartheta} \left(1 + \frac{\rho}{\min\{\delta_{n,l}(\alpha), \delta_n\}} \right)$$

BEWEIS.

a) Wir splitten die Projektion

$$\bar{P}_{n,l}(\theta; R) = \bar{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{1}_f + \bar{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{1}_f + P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \otimes \chi_{H_f + R \geq \rho}.$$

Für $r + R \geq \rho$ schätzen wir wie folgt ab:

$$\operatorname{Im}(-E_{n,l} + z - e^{-\theta}(r + R)) \geq -\sigma + \sin \vartheta(r + R) \geq \frac{\sin \vartheta \rho}{2}$$

Hierbei haben wir verwendet, dass $\sigma \leq 1/2\rho \sin \vartheta$ und $r + R \geq \rho$ gilt. Zusammen mit den Gleichungen (VI.18) und (VI.20) in Lemma VI.7 zeigt das die Behauptung.

b) Wie im Beweis von a) splitten wir die Projektion

$$\bar{P}_{n,l}(\theta) = \bar{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{1}_f + \bar{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{1}_f + P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \otimes \chi_{H_f \geq \rho}.$$

Wir beginnen mit

$$\begin{aligned} & \left\| \left[P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \chi_{H_f \geq \rho}(H_{\alpha,0}(\theta) - z) \right]^{-1} P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \chi_{H_f \geq \rho} B_\theta(\rho) \right\| \\ &= \sup_{r \geq \rho} \left| \frac{e^{-\theta}(r + \rho)}{E_{n,l} - z + e^{-\theta}r} \right| \| P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \| \leq \sup_{r \geq \rho} \frac{2(r + \rho)}{\sin \vartheta r} \| P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \| \\ & \leq \frac{4}{\sin \vartheta} \| P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \|, \end{aligned}$$

wobei wir die Ungleichung

$$(VI.25) \quad \text{Im}(-E_{n,l} + z - e^{-\theta}r) \geq -\sigma + \sin \vartheta r \geq \frac{\sin \vartheta r}{2}$$

benutzt haben, die aus $\sigma \leq \frac{\sin \vartheta \rho}{2}$ und $\rho \leq r$ folgt.

Unter Verwendung der Gleichungen (VI.21) und (VI.22) aus dem Beweis von Lemma VI.7 sowie von (VI.25) erhalten wir mit einem $C > 0$ unabhängig von α

$$\begin{aligned} & \left| \frac{E_{n,l'} - E_{n,l} + e^{-\theta}(r + \rho)}{E_{n,l'} - z + e^{-\theta}r} \right| \leq \left| \frac{E_{n,l'} - E_{n,l} + e^{-\theta}\rho}{E_{n,l'} - z + e^{-\theta}r} \right| + \left| \frac{e^{-\theta}r}{E_{n,l'} - z + e^{-\theta}r} \right| \\ & \leq C \frac{2(\alpha^2 + \rho)}{\sin \vartheta \delta_{n,l}(\alpha)} + \begin{cases} \frac{2\rho}{\sin \vartheta \delta_{n,l}(\alpha)}, & r \leq \rho \\ \frac{2r}{\sin \vartheta r}, & r > \rho \end{cases} \\ & \leq C \frac{4}{\sin \vartheta} \left(1 + \frac{\rho}{\delta_{n,l}(\alpha)} \right). \end{aligned}$$

Analog erhalten wir für $n' \neq n$

$$\left| \frac{E_{n',l'} - E_{n,l} + e^{-\theta}(r + \rho)}{E_{n',l'} - z + e^{-\theta}r} \right| \leq C \frac{4}{\sin \vartheta} \left(1 + \frac{\rho}{\delta_n} \right).$$

Schließlich gilt

$$\begin{aligned} & \left\| \left[\bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z) \right]^{-1} \bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta) B_\theta(\rho) \right\| \\ &= \left\| \left[\bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z) \right]^{-1} \bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta) \left[(H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) - z + e^{-\theta}(H_f + \rho_0)) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + z - E_{n,l} - e^{-\theta}\rho_0 \right] \right\| \\ & \leq \| \bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta) \| + \sup_{r \geq 0} \left\| \frac{z - E_{n,l} - e^{-\theta}\rho}{\bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta)(H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) - z + e^{-\theta}(r + \rho_0))} \bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta) \right\| \\ & \leq \| \bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta) \| + \sup_{r \geq 0} \frac{\max\{\delta_{n,-}, \delta_{n,+}\} + \rho}{\text{Re}(-\eta - z) + \cos \vartheta r} \leq \frac{C}{\delta_n}, \end{aligned}$$

wobei wir Korollar III.21 benutzt haben. \square

Teil b) des vorangegangenen Lemmas sowie die folgenden Lemmata sind bereits Vorbereitungen für den Beweis von relativen Schranken an die Wechselwirkung.

KOROLLAR VI.9. *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$. Dann gibt es ein $C > 0$, so dass für alle $\alpha \leq \alpha_0$, alle $\sigma \leq \min\{\frac{\delta_{n,l}(\alpha)\sin\vartheta}{2\cos\vartheta}, \frac{\delta_n\sin\vartheta}{2\cos\vartheta}, 1/2\rho\sin\vartheta\}$ und alle $z \in \mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma)$ gilt:*

$$\| |B_\theta(\rho)|^{1/2} [\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) |B_\theta(\rho)^*|^{1/2} \| \leq \frac{C}{\sin\vartheta}$$

BEWEIS. Wir berechnen

$$\begin{aligned} & \left\| |B_\theta(\rho)| [\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) \right\| \\ &= \left\| B_\theta(\rho) [\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) \right\| \\ &= \left\| [\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) B_\theta(\rho) \right\| \\ &= \left\| B_\theta(\rho)^* ([\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta))^* \right\| \\ &= \left\| |B_\theta(\rho)^*| ([\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta))^* \right\| \\ &= \left\| [\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) |B_\theta(\rho)^*| \right\|. \end{aligned}$$

Die Behauptung folgt nun durch komplexe Interpolation [123, Kapitel IX.4, Proposition 9] aus Lemma VI.8 b). \square

LEMMA VI.10. *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$. Dann gibt es ein $C > 0$, so dass für alle $0 < \alpha < \alpha_0$ und alle $\rho > 0$ die folgenden Aussagen gelten:*

a)

$$(VI.26) \quad \left\| \bar{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta) B_\theta(\rho)^{-1} \right\| \leq \frac{C}{\sin\vartheta}$$

b)

$$(VI.27) \quad \|B_\theta(\rho)^{-1}\| \leq \frac{C}{\sin\vartheta} \left(1 + \frac{1}{\rho}\right)$$

c)

$$(VI.28) \quad \|H_f B_\theta(\rho)^{-1}\| \leq \frac{C}{\sin\vartheta}$$

BEWEIS.

a) Unter Verwendung von Korollar III.21 schätzen wir ab

$$\begin{aligned} & \|\bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta) B_\theta(\rho)^{-1}\| \\ &= \sup_{r \geq 0} \left\| [\bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta)(H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) - E_{n,l} + e^{-\theta}(r + \rho))]^{-1} \bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta) \right\| \\ &\leq \sup_{r \geq 0} \frac{C}{-\eta - E_{n,l} + \cos\vartheta(r + \rho)} \leq \frac{C}{\delta_n} \end{aligned}$$

und bemerken, dass analog zu den Formeln (VI.21) und (VI.22) für $n' < n$

$$(VI.29) \quad |E_{n',l'} - E_{n,l} + e^{-\theta}(r + \rho)| \geq \text{Im}(e^\theta(z - E_{n,l})) \\ \geq -(\cos\vartheta)\sigma + \sin\vartheta(E_{n,l} - E_{n',l'}) \geq \sin\vartheta\delta_n$$

und für $n' > n$

$$(VI.30) \quad |E_{n',l'} - E_{n,l} + e^{-\theta}(r + \rho)| \geq \text{Re}(E_{n',l'} - E_{n,l} + e^{-\theta}(r + \rho)) \geq \delta_n$$

gilt, was die Behauptung zeigt.

b) Wegen Teil a) reicht es, die Abschätzung auf $\text{Ran } P_{\text{el},n}^{(\alpha)}$ zu zeigen. Wir finden für alle $1 \leq n' \leq \tilde{n}$ und alle $1 \leq l \leq n'$, also insbesondere für $n' = n$,

$$(VI.31) \quad |E_{n',l}(\alpha) - E_{n,l}(\alpha) + e^{-\theta}(r + \rho)| \geq \sin \vartheta(r + \rho) \geq \rho \sin \vartheta,$$

was die Behauptung zeigt.

c) Unter Verwendung von Formel (VI.31) erhalten wir für alle $1 \leq n' \leq \tilde{n}$ und alle $1 \leq l \leq n'$

$$\frac{r}{|E_{n',l}(\alpha) - E_{n,l}(\alpha) + e^{-\theta}(r + \rho)|} \leq \frac{r}{\sin \vartheta(r + \rho)} \leq \frac{1}{\sin \vartheta},$$

was die Behauptung auf $\text{Ran } P_{\text{disc}}(\alpha; \theta)$ zeigt. Auf $\text{Ran } \bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta)$ gilt wegen Korollar III.21

$$\begin{aligned} & \|H_f B_\theta(\rho)^{-1} \bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta)\| \\ &= \sup_{r \geq 0} \left\| r [\bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta) (H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) - E_{n,l} + e^{-\theta}(r + \rho))]^{-1} \bar{P}_{\text{disc}}(\alpha; \theta) \right\| \\ &\leq C \sup_{r \geq 0} \frac{r}{\eta - E_{n,l} + \cos \vartheta(r + \rho)} \leq C \frac{1}{\cos \vartheta}. \end{aligned}$$

Man beachte außerdem $|\sin \vartheta| < \cos \vartheta$ für $|\vartheta| < \pi/4$. \square

KOROLLAR VI.11. *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$. Dann gibt es ein $C > 0$, so dass für alle $0 < \alpha < \alpha_0$ und alle $\rho > 0$ die folgenden Abschätzungen gelten:*

a)

$$\begin{aligned} \|\bar{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta) |B_\theta(\rho)|^{-1/2}\| &\leq \frac{C}{\sqrt{\sin \vartheta}} \\ \||B_\theta(\rho)^*|^{-1/2} \bar{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta)\| &\leq \frac{C}{\sqrt{\sin \vartheta}} \end{aligned}$$

b)

$$\begin{aligned} \||B_\theta(\rho)|^{-1/2}\| &\leq \frac{C}{\sqrt{\sin \vartheta}} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{\rho}}\right) \\ \||B_\theta(\rho)^*|^{-1/2}\| &\leq \frac{C}{\sqrt{\sin \vartheta}} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{\rho}}\right) \end{aligned}$$

c)

$$\begin{aligned} \|H_f^{1/2} |B_\theta(\rho)|^{-1/2}\| &\leq \frac{C}{\sqrt{\sin \vartheta}} \\ \|H_f^{1/2} |B_\theta(\rho)^*|^{-1/2}\| &\leq \frac{C}{\sqrt{\sin \vartheta}} \end{aligned}$$

BEWEIS.

a) Wir finden

$$\begin{aligned} & \|\bar{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta) |B_\theta(\rho)|^{-1/2}\|^2 = \||B_\theta(\rho)|^{-1/2} \bar{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta)^*\|^2 \\ &= \|\bar{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta) |B_\theta(\rho)|^{-1} \bar{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta)^*\| \\ &\leq \|\bar{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta)\| \|(B_\theta(\rho)^*)^{-1} \bar{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta)^*\| = \|\bar{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta)\| \|\bar{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta) B_\theta(\rho)^{-1}\| \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} & \| |B_\theta(\rho)^*|^{-1/2} \overline{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta) \|^2 = \| \overline{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta)^* |B_\theta(\rho)^*|^{-1} \overline{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta) \|^2 \\ & \leq \| \overline{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta)^* \| \| |B_\theta(\rho)^*|^{-1} \overline{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta) \|^2. \end{aligned}$$

Die Behauptung folgt nun aus Lemma VI.10.

- b) Dies folgt unmittelbar aus dem Spektralsatz für selbstadjungierte Operatoren.
- c) Aus Formel (VI.28) in Lemma VI.10 folgt

$$\| H_f \psi \| \leq \frac{C}{\min\{\sin \vartheta, \cos \vartheta\}} \| B_\theta(\rho) \psi \|$$

für alle $\psi \in \text{Dom}(B_\theta(\rho))$. Indem wir die Wurzel aus dieser Operator-Ungleichung ziehen, erhalten wir die Behauptung. Die zweite Ungleichung folgt analog unter Verwendung der Identität

$$\| H_f B_\theta(\rho)^{-1} \| = \| [B_\theta(\rho)^*]^{-1} H_f \| = \| H_f [B_\theta(\rho)^*]^{-1} \|. \quad \square$$

In den letzten beiden Lemmata in diesem Abschnitt beweisen wir nun relative Schranken an die Wechselwirkung. Wie im nicht-relativistischen Fall verwenden wir dabei den Operator $B_\theta(\rho)$ als Hilfsobjekt. Für die Notwendigkeit dieser Konstruktion siehe die Bemerkung nach Lemma B.6. Man beachte, dass hier die zusätzliche Schwierigkeit auftritt, dass der Faktor vor der relativistischen Wechselwirkung nur $\sqrt{\alpha}$ ist. Um diese Schwierigkeit zu umgehen, benützen wir die Aussagen über den nicht-relativistischen Grenzfall des Dirac-Operators aus Kapitel III.3.2. Treten nämlich Erwartungswerte der α -Matrix mit mindestens einem Bindungszustand des Dirac-Operators auf, so gewinnen wir aus diesem Erwartungswert einen zusätzlichen Faktor α . Andererseits divergiert auf Spektralräumen „weg“ von der betrachteten Hauptquantenzahl die Resolvente nicht für $\rho \rightarrow 0$, so dass wir auf diese Weise den fehlenden Faktor wieder wett machen.

LEMMA VI.12. *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$. Dann gibt es ein $C > 0$, so dass für alle $0 < \alpha < \alpha_0$ und alle $\rho > 0$ die Abschätzung*

$$\| |B_\theta(\rho)^*|^{-1/2} W^{(\alpha)}(\theta) |B_\theta(\rho)|^{-1/2} \| \leq \frac{C}{\sin \vartheta} \sqrt{\alpha} \left[1 + \alpha \left(1 + \frac{1}{\rho^{1/2}} \right) \right]$$

gilt.

BEWEIS. Wir splitten die Projektion gemäß $\Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) = P_1(\theta) + P_2(\theta)$, wobei

$$\begin{aligned} P_1(\theta) &= P_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \mathbf{1}_f \\ P_2(\theta) &= \overline{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \mathbf{1}_f. \end{aligned}$$

Da die Abschätzung mit $A_\kappa^{(\theta)}(\alpha x)_+$ analog verläuft, beschränken wir uns auf den Fall mit $A_\kappa^{(\theta)}(\alpha x)_-$. Wir finden für $\psi, \psi' \in \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^4) \otimes \mathcal{F}$ und $i, j \in \{1, 2\}$

$$\begin{aligned} \text{(VI.32)} \quad & \left| \langle \psi', |B_\theta(\rho)^*|^{-1/2} P_i(\theta) \alpha \cdot A_\kappa^{(\theta)}(\alpha x)_- P_j(\theta) |B_\theta(\rho)|^{-1/2} \psi \rangle \right| \\ & \leq \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} \frac{dk |\kappa(e^{-\theta}|k|)|}{\sqrt{4\pi^2|k|}} \left| \langle \psi', |B_\theta(\rho)^*|^{-1/2} \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times P_i(\theta) \boldsymbol{\alpha} \cdot \varepsilon_\mu(k) e^{i\alpha k \cdot x} a_\mu(k) P_j(\theta) |B_\theta(\rho)|^{-1/2} \psi \rangle \Big| \\
& \leq \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} \frac{dk |\kappa(e^{-\theta}|k|)|}{\sqrt{4\pi^2|k|}} \| |P_i(\theta)^* |B_\theta(\rho)^*|^{-1/2} \psi' \| \\
& \quad \times \| |P_i(\theta) \boldsymbol{\alpha} \cdot \varepsilon_\mu(k) e^{i\alpha k \cdot x} P_j(\theta) \| \| |a_\mu(k) P_j(\theta) |B_\theta(\rho)|^{-1/2} \psi \| .
\end{aligned}$$

Wir müssen nun zwei Fälle unterscheiden:

Fall 1: $i = j = 2$. Mit Korollar VI.11 a) erhalten wir

$$\| |B_\theta(\rho)^*|^{-1/2} P_i(\theta) \| \leq C.$$

Außerdem gilt

$$\| |P_i(\theta) \boldsymbol{\alpha} \cdot \varepsilon_\mu(k) e^{i\alpha k \cdot x} P_j(\theta) \| \leq C.$$

Die rechte Seite von Formel (VI.32) lässt sich dann abschätzen durch

$$\begin{aligned}
\text{(VI.33)} \quad & C \|\psi'\| \sqrt{\sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} \frac{dk |\kappa(e^{-\theta}|k|)|^2}{|k|^2}} \\
& \times \sqrt{\sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk |k| \| |a_\mu(k) P_j(\theta) |B_\theta(\rho)|^{-1/2} \psi \|^2} \\
& \leq C \|\psi'\| \| \psi \| \| H_f^{1/2} |B_\theta(\rho)|^{-1/2} \| \leq \frac{C}{\sqrt{\sin \vartheta}} \|\psi'\| \| \psi \|
\end{aligned}$$

mit einem generischen $C > 0$, wobei wir im letzten Schritt Korollar VI.11 c) verwendet haben.

Fall 2: Alle anderen Kombinationen von i und j . Aus Lemma III.29 oder Satz III.32 erhalten wir die Abschätzung

$$\| |P_i(\theta) \boldsymbol{\alpha} \cdot \varepsilon_\mu(k) e^{i\alpha k \cdot x} P_j(\theta) \| \leq C \alpha (1 + \alpha |k|),$$

und aus Korollar VI.11 a) und b)

$$\| |B_\theta(\rho)^*|^{-1} P_i(\theta) \| \leq \frac{C}{\sqrt{\sin \vartheta}} \left(1 + \frac{1}{\rho^{1/2}} \right).$$

Die rechte Seite von Formel (VI.32) lässt sich in diesem Fall abschätzen durch

$$\begin{aligned}
\text{(VI.34)} \quad & \alpha \frac{C}{\sqrt{\sin \vartheta}} \left(1 + \frac{1}{\rho^{1/2}} \right) \|\psi'\| \sqrt{\sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} \frac{dk |\kappa(e^{-\theta}|k|)|^2 (1 + \alpha |k|)^2}{|k|^2}} \\
& \times \sqrt{\sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk |k| \| |a_\mu(k) P_j(\theta) |B_\theta(\rho)|^{-1/2} \psi \|^2} \leq \alpha \frac{C}{\sin \vartheta} \left(1 + \frac{1}{\rho^{1/2}} \right) \|\psi'\| \| \psi \|
\end{aligned}$$

mit einem generischen $C > 0$. □

LEMMA VI.13. *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$. Dann gibt es ein $C > 0$, so dass für alle $0 < \alpha < \alpha_0$ und alle $\rho > 0$ die folgenden Abschätzungen gelten:*

a)

$$\begin{aligned}
\text{(VI.35)} \quad & \left\| |B_\theta(\rho)^*|^{-1/2} W_{1,0}^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l}(\theta) \right\| \leq \frac{C}{\sqrt{\sin \vartheta}} g \\
& \left\| P_{n,l}(\theta) W_{0,1}^{(\alpha)}(\theta) |B_\theta(\rho)|^{-1/2} \right\| \leq \frac{C}{\sqrt{\sin \vartheta}} g
\end{aligned}$$

b)

$$(VI.36) \quad \begin{aligned} \left\| |B_\theta(\rho)^*|^{-1/2} W_{0,1}^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l}(\theta) \right\| &\leq \frac{C}{\sqrt{\sin \vartheta}} g \rho^{1/2} \\ \left\| P_{n,l}(\theta) W_{1,0}^{(\alpha)}(\theta) |B_\theta(\rho)|^{-1/2} \right\| &\leq \frac{C}{\sqrt{\sin \vartheta}} g \rho^{1/2} \end{aligned}$$

c)

$$(VI.37) \quad \begin{aligned} \left\| W_{0,1}^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l}(\theta) \right\| &\leq C g \rho \\ \left\| P_{n,l}(\theta) W_{1,0}^{(\alpha)}(\theta) \right\| &\leq C g \rho \end{aligned}$$

BEWEIS. Wir beginnen mit

$$\begin{aligned} \left\| |B_\theta(\rho)^*|^{-1/2} W_{0,1}^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l}(\theta) \right\| \\ \leq \sqrt{\alpha} \left\| |B_\theta(\rho)^*|^{-1/2} \right\| \left\| \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) \boldsymbol{\alpha} \cdot A_\kappa^{(\theta)}(\alpha x) - P_{n,l}(\theta) \right\| \end{aligned}$$

und finden mit Satz III.32 ähnlich wie in [12, Lemma IV.9.]

$$(VI.38) \quad \begin{aligned} &\left| \left\langle \psi', \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) \boldsymbol{\alpha} \cdot A_\kappa^{(\theta)}(\alpha x) - P_{n,l}(\theta) \psi \right\rangle \right| \\ &\leq \sum_{\mu=1}^2 \int_{k \in \mathbb{R}^3} \frac{dk |\kappa(e^{-\theta}|k|)|}{\sqrt{4\pi^2|k|}} \left| \left\langle \psi', \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) \boldsymbol{\alpha} \cdot \varepsilon_\mu(k) e^{i\alpha k \cdot x} P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} a_\mu(k) \chi_{H_f \leq \rho} \psi \right\rangle \right| \\ &\leq C \alpha \sqrt{\sum_{\mu=1}^2 \int_{|k| \leq \rho} dk \frac{|\kappa(e^{-\theta}|k|)|^2 (1 + \alpha|k|)^2}{|k|^2}} \sqrt{\sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} |k| |a_\mu(k) \chi_{H_f \leq \rho} \psi|^2} \\ &\leq \alpha \rho \|\psi\| \|\psi'\|. \end{aligned}$$

Für $\|P_{n,l}(\theta) W_{1,0}^{(\alpha)}(\theta) |B_\theta(\rho)|^{-1/2}\|$ zeigt man eine ähnliche Abschätzung, so dass man mit Korollar VI.11 b) die Behauptung in b) erhält.

Formel (VI.38) und eine analoge Rechnung für $W_{1,0}^{(\alpha)}(\theta)$ beweisen außerdem die Behauptung in c).

Um a) zu beweisen, schätzen wir ähnlich wie in Formel (VI.38)

$$\begin{aligned} |\langle \psi', P_{n,l}(\theta) W_{0,1}^{(\alpha)}(\theta) |B_\theta(\rho)|^{-1/2} \psi \rangle| \\ \leq C \sqrt{\alpha} \alpha \|\psi'\| \|H_f^{1/2} |B_\theta(\rho)|^{-1/2}\| \|\psi\| \leq \frac{C}{\sqrt{\sin \theta}} g \|\psi'\| \|\psi\| \end{aligned}$$

ab. Die Abschätzung an $\| |B_\theta(\rho)^*|^{-1/2} W_{1,0}^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l}(\theta) \|$ folgt analog. \square

VI.4. Existenz und Approximation des Feshbach-Operators

Wir setzen nun $\rho_0 = g^{4/3} = \alpha^2$ und $\sigma_0 = g^{5/3} = \alpha^{5/2}$ und wenden die Abschätzungen aus Kapitel VI.3 für $\rho = \rho_0$ und $\sigma = \sigma_0$ an.

Wir definieren den Feshbach-Operator

$$(VI.39) \quad \begin{aligned} \mathcal{F}_{P_{n,l}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - z) &:= P_{n,l}(\theta)(H_\alpha(\theta) - z)P_{n,l}(\theta) \\ &- P_{n,l}(\theta)W^{(\alpha)}(\theta)\bar{P}_{n,l}(\theta)[\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_\alpha(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1}\bar{P}_{n,l}(\theta)W^{(\alpha)}(\theta)P_{n,l}(\theta) \end{aligned}$$

als Operator auf $\text{Ran } P_{n,l}(\theta)$. Man beachte, dass wir den Feshbach-Operator für *jede* Feinstrukturkomponente zu der betrachteten Hauptquantenzahl benötigen werden, also für alle $1 \leq l \leq n$.

Wir folgen der Strategie aus [13], wobei jedoch wie im vorhergehenden Abschnitt zusätzliche Schwierigkeiten überwunden werden müssen. Im folgenden Lemma, das Lemma B.7 auf den relativistischen Fall verallgemeinert, zeigen wir zunächst die Existenz der Inversen $[\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_\alpha(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1}$.

LEMMA VI.14. *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$. Dann gibt es ein $C > 0$, so dass für alle hinreichend kleinen $\alpha > 0$ gilt: Der Operator $\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_\alpha(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)$ ist für alle $z \in \mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma_0)$ invertierbar auf $\text{Ran } \bar{P}_{n,l}(\theta)$, und es gilt*

$$\|[\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_\alpha(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1}\bar{P}_{n,l}(\theta)\| \leq \frac{C}{\sin^2 \vartheta \rho_0}.$$

BEWEIS. Die Behauptung folgt ähnlich wie im Beweis von Lemma V.11 aus der Reihenentwicklung

$$\begin{aligned} & \left\| [\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_\alpha(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1}\bar{P}_{n,l}(\theta) \right\| \\ &= \left\| \sum_{n=0}^{\infty} [\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1}\bar{P}_{n,l}(\theta) \right. \\ & \quad \times \left. \left[-W^{(\alpha)}(\theta) [\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1}\bar{P}_{n,l}(\theta) \right]^n \right\| \\ &= \left\| \sum_{n=0}^{\infty} |B_\theta(\rho_0)|^{-1/2} \right. \\ & \quad \times |B_\theta(\rho_0)|^{+1/2} [\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1}\bar{P}_{n,l}(\theta) |B_\theta(\rho_0)^*|^{1/2} \\ & \quad \times \left[-|B_\theta(\rho_0)^*|^{-1/2} W^{(\alpha)}(\theta) |B_\theta(\rho_0)|^{-1/2} \right. \\ & \quad \times |B_\theta(\rho_0)|^{+1/2} [\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1}\bar{P}_{n,l}(\theta) |B_\theta(\rho_0)^*|^{1/2} \left. \right]^n \\ & \quad \times |B_\theta(\rho_0)^*|^{-1/2} \left. \right\| \\ &\leq \left\| |B_\theta(\rho_0)|^{-1/2} \right\| \left\| |B_\theta(\rho_0)^*|^{-1/2} \right\| \\ & \quad \times \left\| |B_\theta(\rho_0)|^{+1/2} [\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1}\bar{P}_{n,l}(\theta) |B_\theta(\rho_0)^*|^{1/2} \right\| \\ & \quad \times \sum_{n=0}^{\infty} \left[\left\| |B_\theta(\rho_0)^*|^{-1/2} W^{(\alpha)}(\theta) |B_\theta(\rho_0)|^{-1/2} \right\| \right. \\ & \quad \times \left. \left\| |B_\theta(\rho_0)|^{+1/2} [\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1}\bar{P}_{n,l}(\theta) |B_\theta(\rho_0)^*|^{1/2} \right\| \right]^n \\ &\leq \frac{C}{\sin^2 \vartheta \sqrt{\rho_0} \sqrt{\rho_0}} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{C}{\sin^2 \vartheta} \sqrt{\alpha} \left(1 + \alpha \left(1 + \frac{1}{\sqrt{\rho_0}} \right) \right) \right]^n \\ &\leq \frac{C}{\sin^2 \vartheta \rho_0} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{C}{\sin^2 \vartheta} \sqrt{\alpha} \right)^n \end{aligned}$$

mit einem generischen $C > 0$ unabhängig von z und α . Hierbei wurden Korollar VI.11 b), Korollar VI.9 und Lemma VI.12 benützt. \square

Wir können uns nun der Existenz des Feshbach-Operators zuwenden und Lemma B.8 verallgemeinern.

LEMMA VI.15. *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$ klein genug. Dann gibt es ein $C > 0$, so dass für alle hinreichend kleinen $\alpha > 0$ und alle $z \in \mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma_0)$ die folgenden Abschätzungen gelten:*

a)

$$(VI.40) \quad \left\| P_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) [\bar{P}_{n,l}(\theta) (H_\alpha(\theta) - z) \bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) \right\| \leq g \frac{C}{\sin^2 \vartheta \sqrt{\rho_0}}.$$

$$(VI.41) \quad \left\| [\bar{P}_{n,l}(\theta) (H_\alpha(\theta) - z) \bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l}(\theta) \right\| \leq g \frac{C}{\sin^2 \vartheta \sqrt{\rho_0}}.$$

b) *Für alle $1 \leq l, l', l'' \leq n$ gilt*

$$(VI.42) \quad \left\| P_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l}(\theta) [\bar{P}_{n,l}(\theta) (H_\alpha(\theta) - z) \bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \right. \\ \left. \times \bar{P}_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l''}(\theta) \right\| \leq \frac{C}{(\sin \vartheta)^2} g^2$$

c) *Der Feshbach-Operator, definiert in Gleichung (VI.39), existiert für alle $z \in \mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma_0)$ und erfüllt die Gleichung*

$$(VI.43) \quad (H_\alpha(\theta) - z)^{-1} = \\ = \left[P_{n,l}(\theta) - \bar{P}_{n,l}(\theta) (\bar{P}_{n,l}(\theta) H_\alpha(\theta) \bar{P}_{n,l}(\theta) - z)^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l}(\theta) \right] \\ \times [\mathcal{F}_{P_{n,l}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - z)]^{-1} \\ \times \left[P_{n,l}(\theta) - P_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l}(\theta) (\bar{P}_{n,l}(\theta) H_\alpha(\theta) \bar{P}_{n,l}(\theta) - z)^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) \right] \\ + \bar{P}_{n,l}(\theta) (\bar{P}_{n,l}(\theta) H_\alpha(\theta) \bar{P}_{n,l}(\theta) - z)^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta),$$

wobei die linke Seite genau dann existiert, wenn die rechte Seite existiert.

BEWEIS.

a) Wir erhalten wie im Beweis von Lemma VI.14 die Abschätzung

$$\left\| P_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l}(\theta) [\bar{P}_{n,l}(\theta) (H_\alpha(\theta) - z) \bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) \right\| \\ \leq \left\| P_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) |B_\theta(\rho)|^{-1/2} \right\| \\ \times \left\| |B_\theta(\rho)|^{+1/2} [\bar{P}_{n,l}(\theta) (H_{\alpha,0}(\theta) - z) \bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) |B_\theta(\rho)^*|^{1/2} \right\| \\ \times \sum_{n=0}^{\infty} \left[\left\| |B_\theta(\rho)^*|^{-1/2} W^{(\alpha)}(\theta) |B_\theta(\rho)|^{-1/2} \right\| \right. \\ \left. \times \left\| |B_\theta(\rho)|^{+1/2} [\bar{P}_{n,l}(\theta) (H_{\alpha,0}(\theta) - z) \bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) |B_\theta(\rho)^*|^{1/2} \right\| \right]^n \\ \times \left\| |B_\theta(\rho)^*|^{-1/2} \right\| \\ \leq g \frac{C}{\sin^2 \vartheta \sqrt{\rho_0}} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{C}{\sin^2 \vartheta} \sqrt{\alpha} \right)^n,$$

wobei wir zusätzlich Lemma VI.13 a) und b) benützt haben. Die andere Abschätzung folgt analog.

b) Die Behauptung folgt ähnlich wie in a).

c) Dies folgt wegen Lemma VI.14 und Teil a) aus [12, Theorem IV.1]. \square

Nachdem nun die Existenz des Feshbach-Operators sichergestellt ist, können wir den Feshbach-Operator durch geeignete Operatoren approximieren. Dies hat unter anderem das Ziel, den numerischen Wertebereich des Feshbach-Operators kontrollieren zu können und so Informationen über seine Invertierbarkeit zu gewinnen.

Für $z \in \mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma_0)$ definieren wir analog zu Gleichung (V.19) im Pauli-Fierz-Modell den Operator

$$Q_{n,l}^{(\alpha)}(z; \theta) := \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk P_{n,l}(\theta) [w_{0,1}(k, \mu; \theta) \otimes \mathbf{1}_f] \\ \times \left[\frac{\bar{P}_{n,l}(\theta; |k|)}{H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) + e^{-i\vartheta}(H_f + |k|) - z} \right] [w_{1,0}(k, \mu; \theta) \otimes \mathbf{1}_f] P_{n,l}(\theta)$$

als Operator auf $\text{Ran } P_{n,l}(\theta)$ und die folgenden Restterme:

$\text{Rem}_0 :=$

$$= P_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) (\theta) \bar{P}_{n,l}(\theta) [\bar{P}_{n,l}(\theta) (H_{\alpha}(\theta) - z) \bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l}(\theta) \\ - P_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l}(\theta) [\bar{P}_{n,l}(\theta) (H_{\alpha,0}(\theta) - z) \bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l}(\theta)$$

$\text{Rem}_1 :=$

$$= P_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l}(\theta) [\bar{P}_{n,l}(\theta) (H_{\alpha,0}(\theta) - z) \bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l}(\theta) \\ - P_{n,l}(\theta) W_{0,1}^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l}(\theta) [\bar{P}_{n,l}(\theta) (H_{\alpha,0}(\theta) - z) \bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) W_{1,0}^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l}(\theta)$$

$\text{Rem}_2 :=$

$$= P_{n,l}(\theta) W_{0,1}^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l}(\theta) [\bar{P}_{n,l}(\theta) (H_{\alpha,0}(\theta) - z) \bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) W_{1,0}^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l}(\theta) \\ - Q_{n,l}^{(\alpha)}(z; \theta)$$

$$\text{Rem}_3 := P_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l}(\theta)$$

Zunächst verallgemeinern wir Lemma B.9:

LEMMA VI.16. *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$. Dann gibt es ein $C > 0$, so dass für alle hinreichend kleinen $\alpha > 0$ und alle $z \in \mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma_0)$ gilt*

$$\|[\mathcal{F}_{P_{n,l}(\theta)}(H_{\alpha}(\theta) - z) - (H_{\text{el}}^{(\alpha)} - z + e^{-\theta} H_f - Q_{n,l}^{(\alpha)}(z; \theta)) P_{n,l}(\theta)]\| \leq \frac{C}{\sin^4 \vartheta} g^2 \sqrt{\alpha}.$$

BEWEIS. Wir beginnen mit der Abschätzung an Rem_0 :

$$\|\text{Rem}_0\| \leq \sum_{n=1}^{\infty} \left\| P_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) |B_{\theta}(\rho_0)|^{-1/2} \right. \\ \left. \times |B_{\theta}(\rho_0)|^{+1/2} [\bar{P}_{n,l}(\theta) (H_{\alpha,0}(\theta) - z) \bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) |B_{\theta}(\rho_0)^*|^{1/2} \right\|$$

$$\begin{aligned}
& \times \left[-|B_\theta(\rho_0)^*|^{-1/2}W^{(\alpha)}(\theta)|B_\theta(\rho_0)|^{-1/2} \right. \\
& \times |B_\theta(\rho_0)|^{+1/2}[\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1}\bar{P}_{n,l}(\theta)|B_\theta(\rho_0)^*|^{1/2} \left. \right]^n \\
& \times |B_\theta(\rho_0)^*|^{-1/2}W^{(\alpha)}(\theta)P_{n,l}(\theta) \Big\| \\
& \leq \|P_{n,l}(\theta)W^{(\alpha)}(\theta)|B_\theta(\rho_0)|^{-1/2}\| \| |B_\theta(\rho_0)^*|^{-1/2}W^{(\alpha)}(\theta)P_{n,l}(\theta) \| \\
& \times \left\| |B_\theta(\rho_0)|^{+1/2}[\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1}\bar{P}_{n,l}(\theta)|B_\theta(\rho_0)^*|^{1/2} \right\| \\
& \times \sum_{n=1}^{\infty} \left[\| |B_\theta(\rho_0)^*|^{-1/2}W^{(\alpha)}(\theta)|B_\theta(\rho_0)|^{-1/2} \| \right. \\
& \times \left. \left\| |B_\theta(\rho_0)|^{+1/2}[\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1}\bar{P}_{n,l}(\theta)|B_\theta(\rho_0)^*|^{1/2} \right\| \right]^n \\
& \leq \frac{C}{\sin^2 \vartheta} g^2 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{C}{\sin^2 \vartheta} \sqrt{\alpha} \right)^n \leq \frac{C}{\sin^4 \vartheta} g^2 \sqrt{\alpha}
\end{aligned}$$

Wir haben hierbei Lemma VI.13 a) und b), Lemma VI.12 und Korollar VI.9 verwendet. Für Rem_1 erhalten wir

$$\begin{aligned}
\|\text{Rem}_1\| & \leq \left\| |B_\theta(\rho_0)|^{+1/2}[\bar{P}_{n,l}(\theta)(H_{\alpha,0}(\theta) - z)\bar{P}_{n,l}(\theta)]^{-1}\bar{P}_{n,l}(\theta)|B_\theta(\rho_0)^*|^{1/2} \right\| \\
& \times \left(\|P_{n,l}(\theta)W_{1,0}^{(\alpha)}(\theta)|B_\theta(\rho_0)|^{-1/2}\| \| |B_\theta(\rho_0)^*|^{-1/2}W_{1,0}^{(\alpha)}(\theta)P_{n,l}(\theta) \| \right. \\
& + \|P_{n,l}(\theta)W_{1,0}^{(\alpha)}(\theta)|B_\theta(\rho_0)|^{-1/2}\| \| |B_\theta(\rho_0)^*|^{-1/2}W_{0,1}^{(\alpha)}(\theta)P_{n,l}(\theta) \| \\
& \left. + \|P_{n,l}(\theta)W_{0,1}^{(\alpha)}(\theta)|B_\theta(\rho_0)|^{-1/2}\| \| |B_\theta(\rho_0)^*|^{-1/2}W_{0,1}^{(\alpha)}(\theta)P_{n,l}(\theta) \| \right) \\
& \leq \frac{C}{\sin^2 \vartheta} g^2 \rho_0^{1/2} = \frac{C}{\sin^2 \vartheta} g^2 \alpha
\end{aligned}$$

nach Korollar VI.9 sowie Lemma VI.13 a) und b).

Für Rem_2 verwenden wir die Pull-Through-Formel [12, Lemma IV.8]: Es gilt

$$\begin{aligned}
\text{Rem}_2 & = \alpha \sum_{\mu, \mu'=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk \int_{k' \in \mathbb{R}^3} dk' P_{n,l}(\theta) \boldsymbol{\alpha} \cdot G_{\alpha x}^{(\theta)}(k, \mu) a_{\mu'}^*(k') \\
& \times \frac{P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{1}_f + P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \otimes \chi_{H_f + |k| + |k'| \geq \rho_0}}{H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) + e^{-\theta}(H_f + |k| + |k'|) - z} \boldsymbol{\alpha} \cdot G_{\alpha x}^{(\theta)}(k', \mu') a_{\mu}(k) P_{n,l}(\theta).
\end{aligned}$$

Unter Verwendung von Lemma VI.8 (für die Resolvente) und Satz III.32 (für die Erwartungswerte der Dirac-Matrix) erhalten wir

$$\begin{aligned}
|\langle \psi, \text{Rem}_2 \psi' \rangle| & \leq C \alpha \sum_{\mu, \mu'=1}^2 \int_{|k| \leq \rho_0} dk \int_{|k'| \leq \rho_0} dk' \frac{|\kappa(e^{-\theta}|k|)|}{\sqrt{|k|}} \frac{|\kappa(e^{-\theta}|k'|)|}{\sqrt{|k'|}} \\
& \times \|P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \boldsymbol{\alpha} \cdot \epsilon_{\mu}(k) e^{i\alpha x \cdot k} \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta)\| \| \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) \boldsymbol{\alpha} \cdot \epsilon_{\mu}(k') e^{-i\alpha x \cdot k'} P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \| \\
& \times \left\| \frac{P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \mathbf{1}_f + P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \chi_{H_f + |k| + |k'| \geq \rho_0}}{H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) + e^{-\theta}(H_f + |k| + |k'|) - z} \right\| \\
& \times \|a_{\mu}(k) \chi_{H_f \leq \rho_0} \psi\| \|a_{\mu'}(k') \chi_{H_f \leq \rho_0} \psi\|
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\leq \frac{Cg^2}{\sin \vartheta \rho_0} \sum_{\mu, \mu'=1}^2 \int_{|k| \leq \rho_0} dk \frac{|\kappa(e^{-\theta}|k|)|(1 + \alpha|k|)}{\sqrt{|k|}\sqrt{|k|}} \sqrt{|k|} \|a_\mu(k) \chi_{H_f \leq \rho_0} \psi\| \\
&\quad \times \int_{|k'| \leq \rho_0} dk' \frac{|\kappa(e^{-\theta}|k'|)|(1 + \alpha|k'|)}{\sqrt{|k'}|\sqrt{|k'|}} \sqrt{|k'|} \|a_{\mu'}(k') \chi_{H_f \leq \rho_0} \psi'\| \\
&\leq \frac{Cg^2}{\sin \vartheta \rho_0} \left(\int_{|k| \leq \rho_0} dk \frac{1}{|k|^2} \right) \|H_f^{1/2} \chi_{H_f \leq \rho_0} \psi'\| \|H_f^{1/2} \chi_{H_f \leq \rho_0} \psi\| \\
&\leq \frac{Cg^2}{\sin \vartheta \rho_0} \rho_0^2 \|\psi'\| \|\psi\| = \frac{C}{\sin \vartheta} g^2 \alpha^2 \|\psi'\| \|\psi\|
\end{aligned}$$

mit einem generischen $C > 0$.

Schließlich betrachten wir $\text{Rem}_3 := P_{n,l}(\theta)W^{(\alpha)}(\theta)P_{n,l}(\theta)$. Wir zeigen nur die Abschätzung mit $A_\kappa^{(\theta)}(\alpha x)_-$. Die Abschätzung mit $A_\kappa(\alpha x)_+$ verläuft analog. Es gilt mit Lemma III.29

$$\begin{aligned}
&\sqrt{\alpha} |\langle \psi', P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \chi_{H_f \leq \rho_0} \boldsymbol{\alpha} \cdot A_\kappa^{(\theta)}(\alpha x)_- P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \chi_{H_f \leq \rho_0} \psi \rangle| \\
&\leq \sqrt{\alpha} \sum_{\mu, \mu'=1}^2 \int_{|k| \leq \rho_0} dk \frac{|\kappa(e^{-\theta}|k|)|}{\sqrt{|k|}} \\
&\quad \times \|P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \boldsymbol{\alpha} \cdot \epsilon_\mu(k) e^{i\alpha x \cdot k} P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta)\| \|\psi'\| \|a_\mu(k) \chi_{H_f \leq \rho_0} \psi\| \\
&\leq Cg \sqrt{\int_{|k| \leq \rho_0} dk \frac{1}{|k|^2}} \|\psi'\| \|H_f^{1/2} \chi_{H_f \leq \rho_0} \psi\| \leq Cg\rho_0 \|\psi'\| \|\psi\| = C\sqrt{\alpha} g^2 \|\psi'\| \|\psi\|.
\end{aligned}$$

□

Man beachte, dass das folgende Lemma VI.17 nur für $z \in \mathcal{A}_{n,l}^<(\alpha, \sigma_0)$ gilt, im Gegensatz zu Lemma VI.16. Es verallgemeinert Lemma B.10.

LEMMA VI.17. *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$. Dann gibt es ein $C > 0$, sodass für alle hinreichend kleinen $\alpha > 0$ und alle $z \in \mathcal{A}_{n,l}^<(\alpha, \sigma_0)$ die Abschätzung*

$$\left\| Q_{n,l}^{(\alpha)}(z; \theta) - Z_{n,l}(\alpha; \theta) \right\| \leq \frac{C}{\sin^2 \vartheta} g^2 \alpha$$

gilt.

BEWEIS. Wir splitten $Q_{n,l}^{(\alpha)}(z; \theta) - Z_{n,l}(\alpha; \theta) = \text{Rem}_{4a} + \text{Rem}_{4b}$ mit

$$\begin{aligned}
\text{Rem}_{4a} &:= \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk P_{n,l}(\theta) [w_{0,1}(k, \mu; \theta) \otimes \mathbf{1}_f] \\
&\quad \times \left[\frac{P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \chi_{H_f + |k| \geq \rho_0}}{H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) + e^{-\theta}(H_f + |k|) - z} \right] [w_{1,0}(k, \mu; \theta) \otimes \mathbf{1}_f] P_{n,l}(\theta) \\
&\quad - \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} \frac{dk}{e^{-\theta}|k|} P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) w_{0,1}(k, \mu; \theta) P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) w_{1,0}(k, \mu; \theta) P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
\text{Rem}_{4b} &:= \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk P_{n,l}(\theta) [w_{0,1}(k, \mu; \theta) \otimes \mathbf{1}_f] \\
&\quad \times \left[\frac{P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \mathbf{1}_f}{H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) + e^{-\theta}(H_f + |k|) - z} \right] [w_{1,0}(k, \mu; \theta) \otimes \mathbf{1}_f] P_{n,l}(\theta) \\
&\quad - \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \otimes \chi_{H_f \leq \rho_0} w_{0,1}(k, \mu; \theta) \\
&\quad \times \left[\frac{P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta)}{H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) - E_{n,l} + e^{-\theta}|k|} \right] w_{1,0}(k, \mu; \theta) P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \chi_{H_f \leq \rho_0}.
\end{aligned}$$

Wir beginnen mit der Abschätzung an Rem_{4a} : Wie in Beweis von Lemma VI.8 a) zeigt man für $\rho_0 \leq r + |k|$ die Ungleichungen

$$(VI.44) \quad |E_{n,l}(\alpha) + e^{-\theta}(r + |k|) - z| \geq -\sigma_0 + \sin \vartheta (r + |k|) \geq \frac{|k| \sin \vartheta}{2}$$

und

$$(VI.45) \quad |E_{n,l}(\alpha) + e^{-\theta}(r + |k|) - z| \geq -\sigma_0 + \sin \vartheta (r + |k|) \geq \frac{\rho_0 \sin \vartheta}{2},$$

denn es gilt $\sigma_0 \leq \frac{\rho_0 \sin \vartheta}{2} \leq \frac{(r+|k|) \sin \vartheta}{2}$ für hinreichend kleine $\alpha > 0$.

Wie im Beweis von Lemma VI.12 erhält man unter Verwendung von Lemma III.29 die Ungleichung

$$(VI.46) \quad \|P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) w_{0,1}(k, \mu; \theta) P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta)\| \leq Cg \frac{|\kappa(e^{-\theta}|k|)|}{\sqrt{|k|}}.$$

Damit erhalten wir schließlich nach einer kleinen Umformung von Rem_{4a}

$$\begin{aligned}
\|\text{Rem}_{4a}\| &= \left\| \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk P_{n,l}(\theta) [w_{0,1}(k, \mu; \theta) \otimes \mathbf{1}_f] P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \right. \\
&\quad \times \left[\frac{(e^{-\theta}H_f + E_{n,l}(\alpha) - z) \chi_{H_f+|k| \geq \rho_0} \chi_{H_f \leq \rho_0}}{(E_{n,l}(\alpha) + e^{-\theta}(H_f + |k|) - z) e^{-\theta}|k|} \right] \\
&\quad \times P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) [w_{1,0}(k, \mu; \theta) \otimes \mathbf{1}_f] P_{n,l}(\theta) \\
&\quad - \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) w_{0,1}(k, \mu; \theta) P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \\
&\quad \times \left. \frac{\chi_{H_f \leq \rho_0} \chi_{H_f+|k| \leq \rho_0}}{e^{-\theta}|k|} w_{1,0}(k, \mu; \theta) P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \right\| \\
&\leq \frac{C}{\sin \vartheta} g^2 (\alpha^2 + \rho_0) \left(\frac{1}{\rho_0} \int_{|k| \leq \rho_0} dk \frac{|\kappa(e^{-\theta}|k|)|^2}{|k|^2} + \int_{|k| \geq \rho_0} dk \frac{|\kappa(e^{-\theta}|k|)|^2}{|k|^3} \right) \\
&\quad + g^2 \int_{|k| \leq \rho_0} dk \frac{|\kappa(e^{-\theta}|k|)|^2}{|k|^2} \\
&\leq \frac{C}{\sin \vartheta} g^2 (\alpha^2 \frac{\rho_0}{\rho_0} + \alpha^2 \ln \rho_0^{-1} + \rho_0) \leq \frac{C}{\sin \vartheta} g^2 \alpha.
\end{aligned}$$

Hierbei haben wir im ersten Summanden die Integration in die Bereiche $|k| \leq \rho_0$ und $|k| > \rho_0$ aufgeteilt. Im ersten Bereich verwenden wir Ungleichung (VI.45), im zweiten Bereich Ungleichung (VI.44).

Die Abschätzung an Rem_{4b} ist schwieriger. Wir splitten die Projektion $\underline{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} = \overline{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)} + \overline{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}$ und erhalten sowohl für $P = \overline{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}$ als auch für $P = \overline{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}$

$$\begin{aligned}
& \left\| \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \chi_{H_f \leq \rho_0} [w_{0,1}(k, \mu; \theta) \otimes \mathbf{1}_f] \right. \\
& \quad \times \left[\frac{P \otimes \mathbf{1}_f}{H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) + e^{-\theta}(H_f + |k|) - z} \right] [w_{1,0}(k, \mu; \theta) \otimes \mathbf{1}_f] P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \chi_{H_f \leq \rho_0} \\
& - \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \chi_{H_f \leq \rho_0} w_{0,1}(k, \mu; \theta) \\
& \quad \times \left[\frac{P \otimes \mathbf{1}_f}{H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) - E_{n,l} + e^{-\theta}|k|} \right] w_{1,0}(k, \mu; \theta) P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \chi_{H_f \leq \rho_0} \left\| \right. \\
& \leq \alpha \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk \frac{|\kappa(e^{-\theta}|k|)|^2}{|k|} \\
& \quad \times \left\| P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_\mu(k) e^{i\boldsymbol{\alpha}x \cdot k} \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) \right\| \left\| \Lambda_{\alpha^{-1},3}^{(+)}(\theta) \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_\mu(k') e^{-i\boldsymbol{\alpha}x \cdot k'} P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \right\| \\
& \quad \times \left[\left\| \frac{P \otimes \mathbf{1}_f}{H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) + e^{-\theta}(H_f + |k|) - z} \right\| \left\| \frac{P}{H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) - E_{n,l} + e^{-\theta}|k|} \right\| \right. \\
& \quad \left. \times (|E_{n,l} - z| + \|H_f \chi_{H_f \leq \rho_0}\|) \right] \\
& \leq C g^2 \alpha^2 \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk \frac{|\kappa(e^{-\theta}|k|)|^2 (1 + \alpha|k|)^2}{|k|} \\
& \quad \times \left\| \frac{P \otimes \mathbf{1}_f}{H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) + e^{-\theta}(H_f + |k|) - z} \right\| \left\| \frac{P}{H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) - E_{n,l} + e^{-\theta}|k|} \right\|.
\end{aligned}$$

Dabei haben wir Satz III.32 verwendet. Wir stellen fest, dass alle Abschätzungen an $\left\| \frac{P \otimes \mathbf{1}_f}{H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) + e^{-\theta}(H_f + |k|) - z} \right\|$ aus Lemma VI.7 auch für $\left\| [P H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) - E_{n,l} + e^{-\theta}|k|]^{-1} P \right\|$ gelten, denn der Operator unter der Norm im zweiten Ausdruck ist die Projektion des Operators im ersten Ausdruck auf den Vakuumsektor mit $z = E_{n,l}$.

Fall 1: $P = \overline{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}$. Wir teilen die Integration in die Bereiche $B_1 := \{k \in \mathbb{R}^3 \mid |k| \leq \rho_0\}$ und $B_2 := \{k \in \mathbb{R}^3 \mid |k| > \rho_0\}$ auf. Mit Formel (VI.18) in Lemma VI.7 a) kann das Integral über B_1 durch

$$\frac{C}{\sin^2 \vartheta} g^2 \alpha^2 \frac{1}{\delta_{n,l}(\alpha)^2} \int_{k \in B_1} dk \frac{1}{|k|} \leq \frac{C}{\sin^2 \vartheta} g^2 \alpha^{-2} \rho_0^2 = \frac{C}{\sin^2 \vartheta} g^2 \alpha^2$$

abgeschätzt werden. Mit Formel (VI.19) in Lemma VI.7 b) schätzen wir das Integral über B_2 durch

$$\frac{C}{\sin^2 \vartheta} g^2 \alpha^2 \int_{k \in B_2} dk \frac{|\kappa(e^{-\theta}|k|)|^2 (1 + \alpha|k|)^2}{|k|^3} \leq \frac{C}{\sin^2 \vartheta} g^2 \alpha^2 \ln \rho_0^{-1}$$

ab.

Fall 2: $P = \overline{P}_{\text{el},n}^{(\alpha)}$. Wir schätzen die Resolventen mit Lemma VI.7 c) ab und erhalten als Abschätzung für das Integral

$$\frac{C}{\delta_n^2 \sin^2 \vartheta} g^2 \alpha^2 \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk \frac{|\kappa(e^{-\theta}|k|)|^2 (1 + \alpha|k|)^2}{|k|} \leq \frac{C}{\delta_n^2 \sin^2 \vartheta} g^2 \alpha^2 = \frac{C}{\delta_n^2 \sin^2 \vartheta} g^2 \alpha^2.$$

□

Das folgende Lemma verallgemeinert schließlich Korollar B.11, jedoch mit dem Unterschied, dass wir im relativistischen Fall die α -Abhängigkeit des Realteils nicht entfernen.

LEMMA VI.18. *Es gibt eine Konstante $C > 0$, sodass für alle hinreichend kleinen $\alpha > 0$ die Abschätzung*

$$\|\mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0)^{-1} Z_{n,l,\pm}(\alpha) \mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0) - Y_{n,l,\pm}(\alpha)\| \leq C g^2 \alpha$$

gilt.

BEWEIS. Wir beschränken uns auf den Fall mit Minuszeichen. Der andere Fall wird analog bewiesen. Es reicht zu zeigen, dass

$$\|\mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0)^{-1} \text{Im } Z_{n,l,-}(\alpha) \mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0) - Z_{n,l,\text{im}}\| \leq C g^2 \alpha$$

gilt. Wegen $[x, H_{\text{el}}^{(\alpha)}] = i \alpha^{-1} \alpha$ und $|e^{i \alpha k \cdot x} - 1| \leq \alpha |k| |x|$ erhalten wir mit Lemma III.29 und Lemma III.31

$$\begin{aligned} & \|\text{Im } Z_{n,l,-}(\alpha) - g^2 \pi \sum_{\substack{n',l': \\ E_{n',l'}(\alpha) < E_{n,l}(\alpha)}} \sum_{\mu=1,2} \int_{|\omega|=1} d\omega (E_{n',l'}(\alpha) - E_{n,l}(\alpha)) \\ & \times \frac{\kappa(|E_{n',l'}(\alpha) - E_{n,l}(\alpha)|)^2}{4\pi^2} P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \epsilon_{\mu}(\omega) \cdot x P_{\text{el},n',l'}^{(\alpha)} \epsilon_{\mu}(\omega) \cdot x P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}\| \leq g^2 \alpha. \end{aligned}$$

Das Integral über ω und die Summe über die Polarisationen lassen sich wie im nicht-relativistischen Fall ausführen (siehe Bemerkung V.5). Wenn wir zusätzlich $|E_{n',l'}(\alpha) - E_{n,l}(\alpha)| \leq C \alpha^2$ berücksichtigen, erhalten wir

$$\begin{aligned} & \|\text{Im } Z_{n,l,-}(\alpha) - g^2 \frac{2}{3} \sum_{n',l': n' < n} (E_{n',l'}(\alpha) - E_{n,l}(\alpha)) \\ & \times \frac{\kappa(|E_{n',l'}(\alpha) - E_{n,l}(\alpha)|)^2}{4\pi^2} P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} x P_{\text{el},n',l'}^{(\alpha)} x P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}\| \leq g^2 \alpha. \end{aligned}$$

Aus Lemma III.22 folgt

$$\mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0)^{-1} P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} = P_{\text{el},n,l}^{(0)} \mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0).$$

Mit Lemma III.19, Gleichung (III.77) in Lemma III.22 und Lemma III.30 sowie Gleichung (II.6) folgt die Behauptung. Man beachte dabei, dass κ eine analytische Fortsetzung besitzt. □

VI.5. Abschätzungen an den numerischen Wertebereich

Die Abschätzungen aus Kapitel VI.4 ermöglichen es, den numerischen Wertebereich des Feshbach-Operators zu kontrollieren, insbesondere können wir Abschätzungen an die Norm seiner Inversen erhalten. Da jedoch $\operatorname{Re} Z_{n,l,\pm}(\alpha)$ im Gegensatz zum nicht-relativistischen Modell von α abhängt, müssen wir zunächst noch zeigen, dass $Z_{n,l,\pm}(\alpha)$ von Ordnung g^2 ist:

LEMMA VI.19. *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$. Dann gilt:*

a) *Es gibt ein $C > 0$, so dass für alle hinreichend kleinen $\alpha > 0$ die Abschätzung*

$$\|Z_{n,l,\pm}(\alpha)\| \leq Cg^2$$

gilt.

b) *Es gibt ein $c > 0$, so dass für alle hinreichend kleinen $\alpha > 0$ die Abschätzungen*

$$\operatorname{Im} Z_{n,l,-}(\alpha) \geq cg^2 + \mathcal{O}(g^2\alpha)$$

$$\operatorname{Im} Z_{n,l,+}(\alpha) \leq -cg^2 + \mathcal{O}(g^2\alpha)$$

gelten.

BEWEIS.

b) folgt unmittelbar aus Lemma VI.18, denn wegen Satz V.14 gibt es ein $c > 0$, so dass die Ungleichungen $\operatorname{Im} Y_{n,l,-}(\alpha) \geq cg^2$ bzw. $\operatorname{Im} Y_{n,l,+}(\alpha) \leq -cg^2$ gelten (vgl. die Definition (VI.14) von $\operatorname{Im} Y_{n,l,\pm}(\alpha)$ sowie die Bemerkung vor Satz VI.1).

a) Wie in den Abschätzungen für Rem_{4a} im Beweis von Lemma VI.17 folgt

$$\left\| \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} \frac{dk}{e^{-\theta}|k|} P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) w_{0,1}(k, \mu; \theta) P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) w_{1,0}(k, \mu; \theta) P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)} \right\| \leq Cg^2.$$

Außerdem erhalten wir

$$\begin{aligned} & \left\| \sum_{\mu=1,2} \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \chi_{H_f \leq \rho_0} w_{0,1}(k, \mu; \theta) \right. \\ & \quad \times \underline{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) [\underline{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) H_{\text{el}}^{(\alpha)}(\theta) - E_{n,l} + e^{-\theta}|k|]^{-1} \\ & \quad \left. \times \underline{P}_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) w_{1,0}(k, \mu; \theta) P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \chi_{H_f \leq \rho_0} \right\| \leq Cg^2. \end{aligned}$$

Um dies zu sehen, gehen wir genauso vor, wie in der Abschätzung an Rem_{4b} im Beweis von Lemma VI.17: Im Fall 1 können wir das Integral über B_1 abschätzen durch

$$\frac{C}{\sin \vartheta} g^2 \frac{1}{\delta_{n,l}(\alpha)} \int_{k \in B_1} dk \frac{|\kappa(e^{-\theta}|k|)|^2 (1 + \alpha|k|)^2}{|k|} \leq \frac{C}{\sin \vartheta} g^2 \alpha^{-2} \rho_0^2 = \frac{C}{\sin^2 \vartheta} g^2 \alpha^2$$

und das Integral über B_2 durch

$$\frac{C}{\sin \vartheta} g^2 \int_{k \in B_2} dk \frac{|\kappa(e^{-\theta}|k|)|^2 (1 + \alpha|k|)^2}{|k|^2} \leq \frac{C}{\sin \vartheta} g^2.$$

Im Fall 2 erhalten wir die Abschätzung

$$\frac{C}{\delta_n \sin \vartheta} g^2 \int_{k \in \mathbb{R}^3} dk \frac{|\kappa(e^{-\theta}|k|)|^2 (1 + \alpha|k|)^2}{|k|} \leq \frac{C}{\delta_n \sin \vartheta} g^2.$$

Lemma III.27 liefert die Behauptung. \square

Aus diesem Lemma folgt insbesondere, dass der numerische Wertebereich von $Z_{n,l,\pm}(\alpha)$ in einem Ball um 0 mit Radius $\mathcal{O}(g^2)$ enthalten ist. Insbesondere gilt dies für den Realteil $\operatorname{Re} Z_{n,l,\pm}(\alpha) = \operatorname{Re} Y_{n,l,\pm}(\alpha)$. Wie im nicht-relativistischen Fall gibt es also Konstanten $a, b > 0$, so dass $\operatorname{NumRan} Y_{n,l,\pm}(\alpha) \subset g^2 A(c, a, b)$ mit $A(c, a, b) := ic + [-a, a] + i[0, b]$ gilt. Wie im nicht-relativistischen Fall setzen wir $\nu := \min\{\vartheta, \arctan(c/(2a))\}$. Da wir nur an $n \leq \tilde{n}$ interessiert sind, können wir die Menge $A(c, a, b)$ und den Winkel ν unabhängig von n und l wählen.

Damit können wir die Inverse des Feshbach-Operators $\mathcal{F}_{P_{n,l}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - z)$ für $z \in \mathcal{A}_{n,l}^<(\alpha, \sigma_0)$ analog zum nicht-relativistischen Fall (siehe Lemma V.10) wie folgt kontrollieren (siehe Abbildung VI.1):

LEMMA VI.20. *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$ und $0 < g \ll \vartheta$ klein genug. Dann gelten die folgenden Aussagen*

- a) *Es gibt Konstanten $C_1, C_2 > 0$, sodass $\mathcal{F}_{P_{n,l}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - z)$ für alle $z \in \mathcal{A}_{n,l}^<(\alpha, \sigma_0) \setminus D(\operatorname{NumRan}(E_{n,l}(\alpha) - Y_{n,l}(\alpha) \otimes \mathbf{1}_f + e^{-\theta} \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f)|_{\operatorname{Ran} P_{\text{el},n,l}^{(0)}}), C_1 \cdot g^2 \sqrt{\alpha}$ beschränkt invertierbar ist, und für $\lambda \in [E_{n,l}(\alpha) - \delta_{n,l,-}(\alpha), E_{n,l}(\alpha) + \delta_{n,l,+}(\alpha)]$ gilt die Abschätzung*

$$(VI.47) \quad \|\mathcal{F}_{P_{n,l}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - \lambda)^{-1}\| \leq \frac{C_2}{\sin \nu \sqrt{(E_{n,l}(\alpha) - \lambda)^2 + cg^4}}.$$

- b) *Es gibt Konstanten $C_1, C_2 > 0$, sodass für alle $z \in \mathbb{C} \setminus D(\operatorname{NumRan}(E_{n,l}(\alpha) - Y_{n,l}(\alpha))|_{\operatorname{Ran} P_{\text{el},n,l}^{(0)}}), C_1 \cdot g^2 \alpha$ der auf $\operatorname{Ran} P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta)$ definierte Operator $(E_{n,l}(\alpha) - z - Z_{n,l}(\alpha; \theta))|_{\operatorname{Ran} P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta)}$ beschränkt invertierbar ist und die Abschätzung*

$$(VI.48) \quad \begin{aligned} & \|[(E_{n,l}(\alpha) - z - Z_{n,l}(\alpha; \theta))|_{\operatorname{Ran} P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(\theta)}]^{-1}\| \\ & \leq \frac{C}{\operatorname{dist}(z, \operatorname{NumRan}(E_{n,l}(\alpha) - Y_{n,l}(\alpha))|_{\operatorname{Ran} P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}(0)})} \end{aligned}$$

erfüllt, und insbesondere auch die Abschätzung (VI.47).

BEWEIS. Dies beweist man unter Verwendung der Lemmata VI.16, VI.17 und VI.18 genau wie im Beweis von Lemma V.10 im nicht-relativistischen Fall. \square

Im Fall $l = 1$ oder $l = n$ ist die Menge $\mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma_0)$ eine echte Obermenge von $\mathcal{A}_{n,l}^<(\alpha, \sigma_0)$, so dass wir in diesem Fall ein relativistisches Analogon von Lemma V.11 brauchen.

LEMMA VI.21. *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$ und $0 < g \ll \vartheta$ klein genug und $l = 1$ oder $l = n$. Dann gilt: Der Feshbach-Operator $\mathcal{F}_{P_{n,l}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - z)$ ist für alle $z \in \mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma_0) \setminus \mathcal{A}_{n,l}^<(\alpha, \sigma_0)$ beschränkt invertierbar und es gibt ein $C > 0$, sodass für $\lambda \in [E_n - \delta_{n,-}, E_{n,1}(\alpha) - \delta_{n,1,-}(\alpha)]$ bzw. $\lambda \in [E_{n,n}(\alpha) + \delta_{n,n,+}(\alpha), E_n + \delta_{n,+}]$ die Abschätzung*

$$\|\mathcal{F}_{P_{n,l}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - \lambda)^{-1}\| \leq \frac{C}{\sin \vartheta |\lambda - E_{n,l}(\alpha)| - Cg^2}$$

mit $l = 1$ bzw. $l = n$ erfüllt ist. Dieselbe Abschätzung gilt für $[E_{n,l}(\alpha) - \lambda - Q_{n,l}^{(\alpha)}(\lambda; \theta)]^{-1}$.

BEWEIS. Dies folgt analog zum nicht-relativistischen Fall (siehe den Beweis von Lemma V.11) aus Lemma VI.15 b). Für die Behauptung über $[E_{n,l}(\alpha) - \lambda - Q_{n,l}^{(\alpha)}(\lambda; \theta)]^{-1}$ beachte man zusätzlich Lemma VI.16 bzw. den Beweis davon. \square

KOROLLAR VI.22. *Es sei $0 < \vartheta < \theta_0$ und $0 < g \ll \vartheta$ klein genug. Dann gilt für alle $1 \leq l \leq n$:*

$$\begin{aligned} & \sigma(H_\alpha(\theta)) \cap \mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma_0) \\ & \subset D(\text{NumRan}(E_{n,l}(\alpha) - Y_{n,l}(\alpha) \otimes \mathbf{1}_f + e^{-\theta} \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f)|_{\text{Ran } P_{\text{el},n,l}^{(0)}}, C_1 \cdot g^2 \sqrt{\alpha}), \end{aligned}$$

wobei C_1 in Lemma VI.20 definiert wurde. Insbesondere gilt $[E_n - \delta_{n,-}, E_n + \delta_{n,+}] \subset \rho(H_\alpha(\theta))$.

BEWEIS. Dies folgt wegen Lemma VI.15 c) unmittelbar aus Lemma VI.20 und Lemma VI.21. \square

BEMERKUNG VI.23. Die Abschätzungen in den Kapiteln VI.3 und VI.4 gelten wie im nicht-relativistischen Fall (vgl. Bemerkung B.12) analog auch für $-\theta_0 < \vartheta < 0$, wenn man die Mengen $\mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma_0)$ und $\mathcal{A}_{n,l}^<(\alpha, \sigma_0)$ an der reellen Achse spiegelt und für die Lokalisierung des numerischen Wertebereichs $Y_{n,l}(\alpha) = Y_{n,l,-}(\alpha)$ durch $Y_{n,l,+}(\alpha)$ ersetzt.

VI.6. Lebensdauer angeregter Zustände

Nun sind wir schließlich in der Lage, Satz VI.1 zu beweisen. Die Vorgehensweise ist grundsätzlich ähnlich wie im Pauli-Fierz-Modell. Durch die Feinstrukturaufspaltung der Eigenwerte ergeben sich jedoch einige Unterschiede: Da ein spektraler Cutoff nur um die betrachtete Feinstrukturkomponente herum wie α^2 gegen Null ginge, wäre er aus physikalischer Sicht wenig sinnvoll und ließe sich auch nicht mit einem Fehler einführen, der mit α gegen Null geht. Wir führen daher einen spektralen Cutoff um alle Feinstrukturkomponenten der betrachteten Hauptquantenzahl herum ein, was dazu führt, dass wir auch Integrale in der Umgebung der anderen Feinstrukturkomponenten abschätzen müssen. Es stellt sich jedoch heraus, dass diese von höherer Ordnung in α sind, so dass wir nur bei der Feinstrukturkomponente einen exponentiell abfallenden Beitrag erhalten, zu der der Testzustand $\psi(\alpha)$ gehört.

BEWEIS VON SATZ VI.1.

Schritt 1: Wie im nicht-relativistischen Fall führen wir einen spektralen Cutoff ein. Dazu wählen wir eine Funktion $F \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ mit $F(x) = 0$ für $|x| \geq 1$ und $F(x) = 1$ für $|x| \leq 1/2$ und definieren eine Abschneidefunktion $F_\alpha(x) := F(\delta_n^{-1}(x - E_n))$. Wie im nicht relativistischen Fall (siehe Schritt 1 im Beweis von Satz V.1) zeigt man

$$|\langle \psi(\alpha), e^{-isH_\alpha} F(H_\alpha) \psi(\alpha) \rangle - \langle \psi(\alpha), e^{-isH_\alpha} \psi(\alpha) \rangle| \leq C\sqrt{\alpha}$$

gleichmäßig in $s \geq 0$.

Schritt 2: Analog zum Beweis für das Pauli-Fierz-Modell schreiben wir

$$\begin{aligned} \langle \psi(\alpha), e^{-isH_\alpha} F(H_\alpha) \psi(\alpha) \rangle &= -\frac{1}{2\pi i} \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int d\lambda e^{-i\lambda s} F(\lambda) [f(0, \lambda - i\epsilon) - f(0, \lambda + i\epsilon)] \\ &= -\frac{1}{2\pi i} \int d\lambda e^{-i\lambda s} F(\lambda) [f(\bar{\theta}, \lambda) - f(\theta, \lambda)], \end{aligned}$$

wobei $f(\theta, \lambda) := \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), \frac{1}{H_\alpha(\theta) - \lambda} \psi(\alpha; \theta) \rangle$ mit $\psi(\alpha; \theta) := \phi_i(\alpha; \theta) \otimes \Omega$ und $\phi(\alpha; \theta) := \mathcal{U}_{\text{el}}(\theta) \phi(\alpha)$. Hierbei wählen wir $\text{Im } \theta > 0$. Wir haben dabei im ersten Schritt den Satz von Stone [122, Theorem VII.13] benützt. Im zweiten Schritt haben wir die Dilatationsanalytizität von $H_\alpha(\theta)$ benützt (siehe Satz VI.5) sowie die Tatsache, dass $H_\alpha(\theta)$ kein Spektrum im Intervall $[E_n - \delta_{n,-}, E_n + \delta_{n,+}/2]$ hat (siehe Korollar VI.22). Wir teilen nun die Integration in verschiedene Intervalle auf:

$$\begin{aligned} &-\frac{1}{2\pi i} \int d\lambda e^{-i\lambda s} F(\lambda) [f(\bar{\theta}, \lambda) - f(\theta, \lambda)] \\ &= -\frac{1}{2\pi i} \left\{ \sum_{l'=1}^n \int_{E_{n,l'}(\alpha) - \delta_{n,l',-}(\alpha)}^{E_{n,l'}(\alpha) + \delta_{n,l',+}(\alpha)} d\lambda e^{-i\lambda s} [f(\bar{\theta}, \lambda) - f(\theta, \lambda)] \right. \\ &\quad + \int_{E_n - \delta_{n,-}}^{E_{n,1}(\alpha) - \delta_{n,1,-}(\alpha)} d\lambda e^{-i\lambda s} F(\lambda) [f(\bar{\theta}, \lambda) - f(\theta, \lambda)] \\ &\quad \left. + \int_{E_{n,n}(\alpha) + \delta_{n,n,+}(\alpha)}^{E_n + \delta_{n,+}} d\lambda e^{-i\lambda s} F(\lambda) [f(\bar{\theta}, \lambda) - f(\theta, \lambda)] \right\} \end{aligned}$$

Hierbei haben wir verwendet, dass $F(\lambda) = 1$ ist für $\lambda \in [E_{n,1}(\alpha) - \delta_{n,1,-}(\alpha), E_{n,n}(\alpha) + \delta_{n,n,+}(\alpha)] \subset [E_n - \delta_n/2, E_n + \delta_n/2]$.

Schritt 3: Für $\lambda \in [E_{n,l}(\alpha) - \delta_{n,l,-}(\alpha), E_{n,l}(\alpha) + \delta_{n,l,+}(\alpha)]$ beobachten wir, dass wie im nicht-relativistischen Fall wegen Gleichung (VI.43) in Lemma VI.15

$$\langle \psi_1(\alpha; \bar{\theta}), \frac{1}{H_g(\theta) - \lambda} \psi_2(\alpha; \theta) \rangle = \langle \psi_1(\alpha; \bar{\theta}), \mathcal{F}_{P_{n,l}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - \lambda)^{-1} \psi_2(\alpha; \theta) \rangle$$

gilt und erhalten unter Verwendung der zweiten Resolventengleichung

$$\begin{aligned}
f(\theta, \lambda) &= \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), \mathcal{F}_{P_{n,l}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - \lambda)^{-1} \psi(\alpha; \theta) \rangle \\
&= \langle \phi(\alpha; \bar{\theta}), [E_{n,l}(\alpha) - \lambda - Z_{n,l}(\alpha; \theta)]^{-1} \phi(\alpha; \theta) \rangle \\
&\quad - \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), [E_{n,l}(\alpha) - \lambda - Z_{n,l}(\alpha; \theta)]^{-1} \\
&\quad \times [\mathcal{F}_{P_{n,l}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - \lambda) - (E_{n,l}(\alpha) - \lambda + e^{-\theta} \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f - Z_{n,l}(\alpha; \theta)) P_{n,l}(\theta)] \\
&\quad \times \mathcal{F}_{P_{n,l}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - \lambda)^{-1} \psi(\alpha; \theta) \rangle =: \hat{f}(\theta, \lambda) + B_1(\theta, \lambda),
\end{aligned}$$

wobei $\hat{f}(\theta, \lambda)$ der erste Term in der Summe ist. Unter erneuter Verwendung der zweiten Resolventengleichung und unter Ausnützung der Dilatationsanalytizität erhalten wir

$$\begin{aligned}
\hat{f}(\theta, \lambda) &= \langle \phi(\alpha), [E_{n,l}(\alpha) - \lambda - Z_{n,l,-}(\alpha)]^{-1} \phi(\alpha) \rangle \\
&= \langle \phi(0), [E_{n,l}(\alpha) - \lambda - \mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0)^{-1} Z_{n,l,-}(\alpha) \mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0)]^{-1} \phi(0) \rangle \\
&= \langle \phi(0), [E_{n,l}(\alpha) - \lambda - Y_{n,l,-}(\alpha)]^{-1} \phi(0) \rangle \\
&\quad - \langle \phi(0), [E_{n,l}(\alpha) - \lambda - Y_{n,l,-}(\alpha)]^{-1} \\
&\quad \times [\mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0)^{-1} Z_{n,l,-}(\alpha) \mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0) - Y_{n,l,-}(\alpha)] \\
&\quad \times [E_{n,l}(\alpha) - \lambda - \mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0)^{-1} Z_{n,l,-}(\alpha) \mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0)]^{-1} \phi(0) \rangle \\
&=: \tilde{f}_-(\lambda) + B_{2,-}(\lambda),
\end{aligned}$$

wobei $\tilde{f}_-(\lambda)$ der erste Term in der Summe ist. Wir setzen $B(\theta, \lambda) := B_1(\theta, \lambda) + B_{2,-}(\lambda)$. Entsprechend erhalten wir

$$\begin{aligned}
\hat{f}(\bar{\theta}, \lambda) &= \langle \phi(\alpha), [E_{n,l}(\alpha) - \lambda - Z_{n,l,+}(\alpha)]^{-1} \phi(\alpha) \rangle \\
&= \langle \phi(0), [E_{n,l}(\alpha) - \lambda - Y_{n,l,+}(\alpha)]^{-1} \phi(0) \rangle \\
&\quad - \langle \phi(0), [E_{n,l}(\alpha) - \lambda - Y_{n,l,+}(\alpha)]^{-1} \\
&\quad \times [\mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0)^{-1} Z_{n,l,+}(\alpha) \mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0) - Y_{n,l,+}(\alpha)] \\
&\quad \times [E_{n,l}(\alpha) - \lambda - \mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0)^{-1} Z_{n,l,+}(\alpha) \mathcal{U}_{\text{NR}}(\alpha^{-1}, \mathfrak{Z}; 0)]^{-1} \phi(0) \rangle \\
&=: \tilde{f}_+(\lambda) + B_{2,+}(\lambda),
\end{aligned}$$

wobei $\tilde{f}_+(\lambda)$ der erste Term in der Summe ist. Wir setzen $B(\bar{\theta}, \lambda) := B_1(\bar{\theta}, \lambda) + B_{2,+}(\lambda)$.

Wie im nicht-relativistischen Fall verschieben wir für die Terme $\tilde{f}_\pm(\lambda)$ die Kontour und schätzen die Terme $B(\theta, \lambda)$ und $B(\bar{\theta}, \lambda)$ auf der reellen Achse ab. Es gilt

$$\begin{aligned}
&\int d\lambda e^{-i\lambda s} [f(\bar{\theta}, \lambda) - f(\theta, \lambda)] \\
&= \int d\lambda e^{-i\lambda s} [B(\bar{\theta}, \lambda) - B(\theta, \lambda)] + \int_{C_1+C_5} dz e^{-izs} [\tilde{f}_+(z) - \tilde{f}_-(z)] \\
&\quad + \int_{C_2+C_3+C_4} dz e^{-izs} [\tilde{f}_+(z) - \tilde{f}_-(z)] - \int_{C_0} dz e^{-izs} [\tilde{f}_+(z) - \tilde{f}_-(z)],
\end{aligned}$$

wobei wir $C := C_1 + C_2 + C_3 + C_4 + C_5$ setzen mit $C_1 := [E_{n,l}(\alpha) - \delta_{n,l,-}(\alpha), E_{n,l}(\alpha) - \delta_{n,l,-}(\alpha)/2]$, $C_2 := [E_{n,l}(\alpha) - \delta_{n,l,-}(\alpha)/2, E_{n,l}(\alpha) - \delta_{n,l,-}(\alpha)/2 - i\delta_{n,l}(\alpha)]$, $C_3 := [E_{n,l}(\alpha) - \delta_{n,l,-}(\alpha)/2 - i\delta_{n,l}(\alpha), E_{n,l}(\alpha) + \delta_{n,l,+}(\alpha)/2 - i\delta_{n,l}(\alpha)]$, $C_4 := [E_{n,l}(\alpha) + \delta_{n,l,+}(\alpha)/2 - i\delta_{n,l}(\alpha), E_{n,l}(\alpha) + \delta_{n,l,+}(\alpha)/2]$ und $C_5 := [E_{n,l}(\alpha) + \delta_{n,l,+}(\alpha)/2, E_{n,l}(\alpha) + \delta_{n,l,+}(\alpha)]$. Man beachte, dass diese Kontour teilweise *außerhalb* von $\mathcal{A}_{n,l}(\alpha, \sigma_0)$ verläuft, was zulässig ist, da wir hier im Gegensatz zum Pauli-Fierz-Modell keine Integrale betrachten, die $Q_{n,l}^{(\alpha)}(z; \theta)$ enthalten. C_0 ist eine geeignete Kontour, um einen Pol-Beitrag von $\tilde{f}(\theta, z)$ zu erhalten. Wir wählen hierzu dieselbe Kontour wie im Beweis des Pauli-Fierz-Modells, nämlich $C_0 = [E_{n,l}(\alpha) + g^2(-(a+c/2) - ic/2), E_{n,l}(\alpha) + g^2((a+c/2) - ic/2)] + [E_{n,l}(\alpha) + g^2((a+c/2) - ic/2), E_{n,l}(\alpha) + g^2((a+c/2) - i(b+3c/2))] + [E_{n,l}(\alpha) + g^2((a+c/2) - i(b+3c/2)), E_{n,l}(\alpha) + g^2(-(a+c/2) - i(b+3c/2))] + [E_{n,l}(\alpha) + g^2(-(a+c/2) - i(b+3c/2)), E_{n,l}(\alpha) + g^2(-(a+c/2) - i(c/2))]$.

Abschätzungen auf der reellen Achse: Wir zeigen die Abschätzung an $B_1(\theta, \lambda)$. Mit Lemma VI.16, Lemma VI.17 und Lemma VI.20 erhalten wir $|B_1(\theta, \lambda)| \leq C\nu^{-2} \cdot \frac{g^2\sqrt{\alpha}}{(E_{n,l}(\alpha) - \lambda)^2 + c^2g^4}$. Es ist leicht zu sehen, dass $\int d\lambda \frac{g^2\sqrt{\alpha}}{(E_{n,l}(\alpha) - \lambda)^2 + c^2g^4}$ von Ordnung $\mathcal{O}(\sqrt{\alpha})$ ist. Dieselben Abschätzungen gelten für $B_1(\bar{\theta}, \lambda)$. Die Abschätzung an $B_{2,\pm}(\lambda)$ verläuft analog unter Verwendung von Lemma VI.18 und Lemma VI.20.

Abschätzungen entlang der Kontour C : Wir schätzen das Integral

$$\int_C |e^{-isz}||\tilde{f}_+(z) - \tilde{f}_-(z)||dz|$$

ab: Man beachte, dass

$$\begin{aligned} \tilde{f}_-(z) &= \frac{1}{E_{n,l}(\alpha) - z} \langle \phi(0), \phi(0) \rangle \\ &+ \langle \phi(0), \frac{1}{E_{n,l}(\alpha) - z} Y_{n,l,-}(\alpha) \frac{1}{E_{n,l}(\alpha) - z - Y_{n,l,-}(\alpha)} \phi(0) \rangle \end{aligned}$$

gilt. Folglich heben sich die führenden Terme von $\tilde{f}_-(z)$ und $\tilde{f}_+(z)$ gegenseitig auf, und es reicht zu zeigen, dass die verbleibenden Terme mindestens von Ordnung $\sqrt{\alpha}$ sind. Aus Gleichung (VI.14) und Lemma VI.19 folgt

$$\|Y_{n,l,\pm}(\alpha)\| \leq Cg^2.$$

Wir können daher z.B. abschätzen

$$\begin{aligned} &|\langle \phi(0), \frac{1}{E_{n,l}(\alpha) - (\lambda - i\delta_{n,l}(\alpha))} Y_{n,l,-}(\alpha) \\ &\quad \times \frac{1}{E_{n,l}(\alpha) - (\lambda - i\delta_{n,l}(\alpha)) - Y_{n,l,-}(\alpha)} \phi(0) \rangle| \leq C \cdot \frac{g^2}{(E_{n,l}(\alpha) - \lambda)^2 + \delta_{n,l}(\alpha)^2}. \end{aligned}$$

Da die Kontour C_3 die Länge $\mathcal{O}(\alpha^2)$ hat, können wir das Integral über obigen Ausdruck durch $C\alpha$ nach oben abschätzen. Entlang der Konturen C_1 , C_2 , C_4 und C_5 gelten ähnliche Abschätzungen. Das Integral $\tilde{f}_+(z)$ lässt sich genauso abschätzen wie das Integral über $\tilde{f}_-(z)$.

Pol-Term: Das Integral entlang C_0 über $f_-(z)$ liefert den behaupteten Term, das Integral über $f_+(z)$ ist null.

Schritt 4: Für $\lambda \in [E_{n,l'}(\alpha) - \delta_{n,l',-}(\alpha), E_{n,l'}(\alpha) + \delta_{n,l',+}(\alpha)]$ mit $l' \neq l$ beobachten wir, dass wegen $\phi(\alpha) \in \text{Ran } P_{\text{el},n,l}^{(\alpha)}$

$$\bar{P}_{n,l'}(\theta)\psi(\alpha; \theta) = (P_{\text{el},n,l'}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \chi_{H_{\text{f}} \geq \rho_0} + \underline{P}_{\text{el},n,l'}^{(\alpha)}(\theta) \otimes \mathbf{1}_{\text{f}})\psi(\alpha; \theta) = \psi(\alpha; \theta)$$

und $P_{n,l'}(\theta)\psi(\alpha; \theta) = 0$ gilt, woraus wegen Gleichung (VI.43) in Lemma VI.15 die Beziehung

$$\begin{aligned} f(\theta, \lambda) &= \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), \bar{P}_{n,l'}(\theta) (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \bar{P}_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l'}(\theta) \\ &\quad \times [\mathcal{F}_{P_{n,l'}(\theta)}(H_{\alpha}(\theta) - \lambda)]^{-1} \\ &\quad \times P_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l}(\theta) (\bar{P}_{n,l}(\theta) H_{\alpha}(\theta) \bar{P}_{n,l}(\theta) - \lambda)^{-1} \bar{P}_{n,l}(\theta) \psi(\alpha; \theta) \rangle \\ &\quad + \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), \bar{P}_{n,l'}(\theta) (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \bar{P}_{n,l'}(\theta) \psi(\alpha; \theta) \rangle \\ &=: f_1(\theta, \lambda) + f_2(\theta, \lambda) \end{aligned}$$

folgt, wobei $f_1(\theta, \lambda)$ der erste Summand ist. Mittels der zweiten Resolventengleichung erhalten wir

$$f_1(\theta, \lambda) = f_{1,a}(\theta, \lambda) + f_{1,b}(\theta, \lambda) + f_{1,c}(\theta, \lambda)$$

mit

$$\begin{aligned} f_{1,a}(\theta, \lambda) &:= \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), \bar{P}_{n,l'}(\theta) (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha,0}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \\ &\quad \times \bar{P}_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l'}(\theta) \mathcal{F}_{P_{n,l'}(\theta)}(H_{\alpha}(\theta) - \lambda)^{-1} P_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) \\ &\quad \times (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha,0}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \bar{P}_{n,l'}(\theta) \psi(\alpha; \theta) \rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f_{1,b}(\theta, \lambda) &:= -\langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), \bar{P}_{n,l'}(\theta) (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha,0}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \\ &\quad \times \bar{P}_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \\ &\quad \times \bar{P}_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l'}(\theta) [\mathcal{F}_{P_{n,l'}(\theta)}(H_{\alpha}(\theta) - \lambda)]^{-1} P_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) \\ &\quad \times (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha,0}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \bar{P}_{n,l'}(\theta) \psi(\alpha; \theta) \rangle \\ &\quad - \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), \bar{P}_{n,l'}(\theta) (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha,0}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \\ &\quad \times \bar{P}_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l'}(\theta) [\mathcal{F}_{P_{n,l'}(\theta)}(H_{\alpha}(\theta) - \lambda)]^{-1} P_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) \\ &\quad \times (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \bar{P}_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) \\ &\quad \times (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha,0}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \bar{P}_{n,l'}(\theta) \psi(\alpha; \theta) \rangle \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} f_{1,c}(\theta, \lambda) &:= \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), \bar{P}_{n,l'}(\theta) (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha,0}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \\ &\quad \times \bar{P}_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha} \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \\ &\quad \times \bar{P}_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l'}(\theta) [\mathcal{F}_{P_{n,l'}(\theta)}(H_{\alpha}(\theta) - \lambda)]^{-1} P_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) \\ &\quad \times (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \bar{P}_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) \\ &\quad \times (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha,0}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \bar{P}_{n,l'}(\theta) \psi(\alpha; \theta) \rangle. \end{aligned}$$

Wir finden

$$f_{1,a}(\theta, \lambda) = \frac{1}{(E_{n,l}(\alpha) - \lambda)^2} \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), W_{0,1}^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l'}(\theta) \rangle \\ \times \mathcal{F}_{P_{n,l'}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - \lambda)^{-1} P_{n,l'}(\theta) W_{1,0}^{(\alpha)}(\theta) \psi(\alpha; \theta).$$

Lemma VI.13 c) und Lemma VI.20 a) implizieren

$$|f_{1,a}(\theta, \lambda)| \leq \frac{1}{|E_{n,l}(\alpha) - \lambda|^2} \frac{g^2 \rho_0^2}{g^2},$$

woraus

$$\int_{E_{n,l'}(\alpha) - \delta_{n,l',-}(\alpha)}^{E_{n,l'}(\alpha) + \delta_{n,l',+}(\alpha)} d\lambda |f_{1,a}(\theta, \lambda)| \leq \frac{\rho_0^2}{\alpha^2} = \mathcal{O}(\alpha^2)$$

folgt. Für die Abschätzung an $f_{1,b}(\theta, \lambda)$ reicht es, den ersten Summanden zu betrachten, da die Abschätzung an den zweiten Summanden analog verläuft. Der erste Summand lässt sich abschätzen durch

$$\frac{1}{|E_{n,l}(\alpha) - \lambda|^2} |\langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), \\ \times P_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_\alpha(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \bar{P}_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l'}(\theta) \\ \times [\mathcal{F}_{P_{n,l'}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - \lambda)]^{-1} P_{n,l'}(\theta) W_{1,0}^{(\alpha)}(\theta) \psi(\alpha; \theta) \rangle| \\ \leq \frac{C}{|E_{n,l}(\alpha) - \lambda|^2} \frac{g^2 g \rho_0}{g^2},$$

wobei wir im letzten Schritt Lemma VI.13 c), Lemma VI.20 a) und Lemma VI.15 b) verwendet haben. Es folgt

$$\int_{E_{n,l'}(\alpha) - \delta_{n,l',-}(\alpha)}^{E_{n,l'}(\alpha) + \delta_{n,l',+}(\alpha)} d\lambda |f_{1,b}(\theta, \lambda)| \leq C \frac{g \rho_0}{\alpha^2} = \mathcal{O}(g) = \mathcal{O}(\alpha^{3/2}).$$

Schließlich erhalten wir wiederum mit Lemma VI.20 a) und Lemma VI.15 b)

$$|f_{1,c}(\theta, \lambda)| = \frac{1}{|E_{n,l}(\alpha) - \lambda|^2} |\langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), P_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) \\ \times (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_\alpha(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \bar{P}_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l'}(\theta) \\ \times [\mathcal{F}_{P_{n,l'}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - \lambda)]^{-1} \\ \times P_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) \\ \times (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_\alpha \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \bar{P}_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l}(\theta) \psi(\alpha; \theta) \rangle| \\ \leq C \frac{1}{|E_{n,l}(\alpha) - \lambda|^2} \frac{g^4}{g^2},$$

und Integration liefert

$$\int_{E_{n,l'}(\alpha) - \delta_{n,l',-}(\alpha)}^{E_{n,l'}(\alpha) + \delta_{n,l',+}(\alpha)} d\lambda |f_{1,c}(\theta, \lambda)| \leq C \frac{g^2}{\alpha^2} = \mathcal{O}(\alpha).$$

Nun müssen wir noch den Term $f_2(\theta, \lambda)$ behandeln. Mittels der zweiten Resolventengleichung erhalten wir

$$f_2(\theta, \lambda) = f_{2,a}(\theta, \lambda) + f_{2,b}(\theta, \lambda) + f_{3,c}(\theta, \lambda),$$

mit

$$\begin{aligned} f_{2,a}(\theta, \lambda) &:= \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), \bar{P}_{n,l'}(\theta) (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha,0}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \bar{P}_{n,l'}(\theta) \psi(\alpha; \theta) \rangle, \\ f_{2,b}(\theta, \lambda) &:= - \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), \bar{P}_{n,l'}(\theta) (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha,0}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \\ &\quad \times \bar{P}_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) \\ &\quad \times (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha,0}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \bar{P}_{n,l'}(\theta) \psi(\alpha; \theta) \rangle \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} f_{2,c}(\theta, \lambda) &:= \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), \bar{P}_{n,l'}(\theta) (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha,0}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \\ &\quad \times \bar{P}_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \\ &\quad \times \bar{P}_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha,0}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \bar{P}_{n,l'}(\theta) \psi(\alpha; \theta) \rangle. \end{aligned}$$

Wir finden unter Ausnützung der Dilatationsanalytizität

$$f_{2,a}(\theta, \lambda) = \frac{1}{E_{n,l}(\alpha) - \lambda} \langle \psi(\alpha; 0), \psi(\alpha; 0) \rangle,$$

woraus $f_{2,a}(\bar{\theta}, \lambda) - f_{2,a}(\theta, \lambda) = 0$ folgt. Des Weiteren gilt

$$f_{2,b}(\theta, \lambda) = - \frac{1}{(E_{n,l}(\alpha) - \lambda)^2} \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), W^{(\alpha)}(\theta) \psi(\alpha; \theta) \rangle = 0$$

und

$$\begin{aligned} |f_{2,c}(\theta, \lambda)| &= \frac{1}{|E_{n,l}(\alpha) - \lambda|^2} |\langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), P_{n,l}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) \\ &\quad \times (\bar{P}_{n,l'}(\theta) H_{\alpha}(\theta) \bar{P}_{n,l'}(\theta) - \lambda)^{-1} \bar{P}_{n,l'}(\theta) W^{(\alpha)}(\theta) P_{n,l}(\theta) \psi(\alpha; \theta) \rangle| \\ &\leq C \frac{g^2}{|E_{n,l}(\alpha) - \lambda|^2}, \end{aligned}$$

wobei wir im letzten Schritt Lemma VI.15 b) verwendet haben. Integration liefert

$$\int_{E_{n,l'}(\alpha) - \delta_{n,l',-}(\alpha)}^{E_{n,l'}(\alpha) + \delta_{n,l',+}(\alpha)} d\lambda |f_{2,c}(\theta, \lambda)| \leq C \frac{g^2}{\alpha^2} = \mathcal{O}(\alpha).$$

Schritt 5: Für $\lambda \in [E_{n,n}(\alpha) + \delta_{n,n,+}(\alpha), E_n + \delta_{n,+}]$ und ebenso für $\lambda \in [E_n - \delta_{n,-}, E_{n,1}(\alpha) - \delta_{n,1,-}(\alpha)]$ müssen wir etwas anders vorgehen. Wir betrachten nur den zweiten Fall, da der erste analog verläuft, und machen eine Fallunterscheidung.

1. *Fall:* $1 < l \leq n$. Aus Lemma VI.21 ergibt sich mit $l' = 1$ die Ungleichung

$$\|\mathcal{F}_{P_{n,l'}(\theta)}(H_{\alpha}(\theta) - z)^{-1}\| \leq \frac{C}{\sin \vartheta |\lambda - E_{n,l'}(\alpha)| - Cg^2} \leq \frac{C}{\alpha^2},$$

die wir für die Abschätzung an $f_1(\theta, \lambda)$ verwenden. Die Abschätzungen an $f_2(\theta, \lambda)$ verlaufen genau wie in Schritt 4. Man beachte, dass sowohl bei den Abschätzungen

an $f_1(\theta, \lambda)$ als auch bei den Abschätzungen an $f_2(\theta, \lambda)$ die Integrationsgrenzen entsprechend geändert werden müssen. Damit erhalten wir auf dieselbe Weise wie in Schritt 4 die Abschätzungen

$$\left| \int_{E_n - \delta_{n,-}}^{E_{n,1}(\alpha) - \delta_{n,1,-}(\alpha)} d\lambda e^{-i\lambda s} F(\lambda) [f(\bar{\theta}, \lambda) - f(\theta, \lambda)] \right| = \mathcal{O}(\alpha)$$

2. Fall: $l = 1$. Mit der zweiten Resolventengleichung erhalten wir

$$\begin{aligned} f(\theta, \lambda) &= \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), \mathcal{F}_{P_{n,l}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - \lambda)^{-1} \psi(\alpha; \theta) \rangle \\ &= \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), [E_{n,l}(\alpha) - \lambda - Q_{n,l}^{(\alpha)}(\lambda; \theta)]^{-1} \psi(\alpha; \theta) \rangle \\ &\quad - \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), [E_{n,l}(\alpha) - \lambda - Q_{n,l}^{(\alpha)}(\lambda; \theta)]^{-1} \\ &\quad \times [\mathcal{F}_{P_{n,l}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - \lambda) - (E_{n,l}(\alpha) - \lambda + e^{-\theta} \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f - Q_{n,l}^{(\alpha)}(\lambda; \theta)) P_{n,l}(\theta)] \\ &\quad \times [\mathcal{F}_{P_{n,l}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - \lambda)]^{-1} \psi(\alpha; \theta) \rangle =: \tilde{f}(\theta, \lambda) + B(\theta, \lambda), \end{aligned}$$

wobei $\tilde{f}(\theta, \lambda)$ der erste Summand ist. Lemma VI.21 liefert die Abschätzung

$$\|\mathcal{F}_{P_{n,l}(\theta)}(H_\alpha(\theta) - \lambda)^{-1}\| \leq \frac{C}{\sin \vartheta |\lambda - E_{n,l}(\alpha)| - Cg^2}$$

sowie dieselbe Abschätzung für $[E_{n,l}(\alpha) - \lambda - Q_{n,l}^{(\alpha)}(\lambda; \theta)]^{-1}$. Damit gilt wegen Lemma VI.16 die Abschätzung

$$|B(\theta, \lambda)| \leq \frac{Cg^2 \sqrt{\alpha}}{(\sin \vartheta |\lambda - E_{n,l}(\alpha)| - Cg^2)^2}$$

und somit folgt

$$\int_{E_n - \delta_{n,-}}^{E_{n,1}(\alpha) - \delta_{n,1,-}(\alpha)} d\lambda F(\lambda) |B(\theta, \lambda)| = \mathcal{O}(g) = \mathcal{O}(\alpha^{3/2})$$

mit derselben Rechnung wie im nicht-relativistischen Fall (Beweis von Satz V.1, Schritt 2). Dieselbe Abschätzung gilt für $B(\bar{\theta}, \lambda)$.

Für die Abschätzung an $\tilde{f}(\theta, \lambda)$ verwenden wir

$$\begin{aligned} \tilde{f}(\theta, \lambda) &= \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), [E_{n,1}(\alpha) - \lambda]^{-1} \psi(\alpha; \theta) \rangle + \\ &\quad + \langle \psi(\alpha; \bar{\theta}), [E_{n,l}(\alpha) - \lambda]^{-1} Q_{n,1}^{(\alpha)}(\lambda; \theta) [E_{n,1}(\alpha) - \lambda - Q_{n,1}^{(\alpha)}(\lambda; \theta)]^{-1} \psi(\alpha; \theta) \rangle. \end{aligned}$$

Der erste Summand hebt sich mit dem entsprechenden ersten Summanden von $\tilde{f}(\bar{\theta}, \lambda)$ heraus. Der zweite Summand lässt sich abschätzen durch

$$g^2 \frac{C}{|E_{n,1}(\alpha) - \lambda| (\sin \vartheta |\lambda - E_{n,l}(\alpha)| - Cg^2)},$$

woraus mit derselben Begründung wie oben

$$\int_{E_n - \delta_{n,-}}^{E_{n,1}(\alpha) - \delta_{n,1,-}(\alpha)} d\lambda F(\lambda) |\tilde{f}(\theta, \lambda) - \tilde{f}(\bar{\theta}, \lambda)| = \mathcal{O}(g^{2/3}) = \mathcal{O}(\alpha)$$

folgt. □

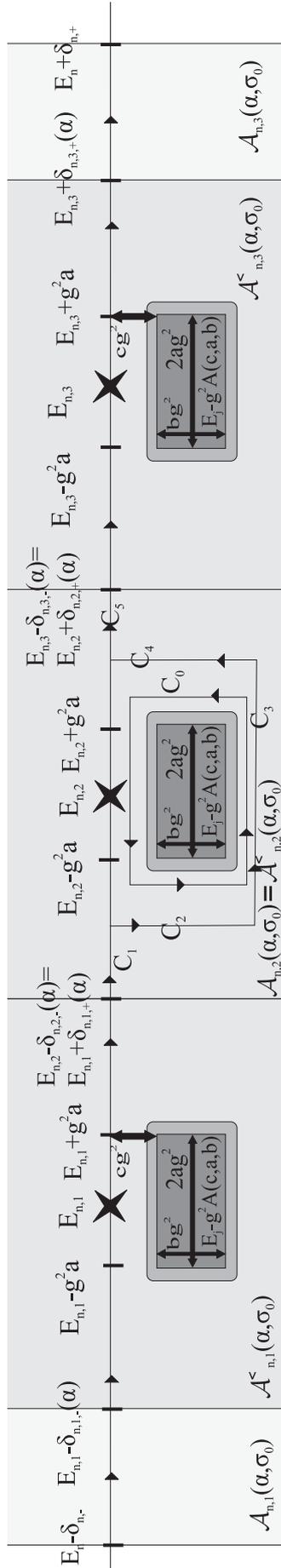


ABBILDUNG VI.1. Die Integrationskontour im relativistischen Modell für die Hauptquantenzahl $n = 3$.

Teil 4

Anhang

ANHANG A

Operatorungleichungen und Minimax-Prinzip

A.1. Einige Operator-Ungleichungen

In diesem Anhang listen wir einige nützliche Ungleichungen aus [8] und [19] sowie geringfügige Verbesserungen davon auf. Wir verwenden die Notation aus Kapitel IV.

LEMMA A.1 ([19], Lemma A.5 und Lemma A.8). *Es sei $\gamma \in F$. Dann gilt*

$$(A.1) \quad \phi^{(\gamma)} \leq \frac{\pi}{2} \|\nabla|\gamma|\|_1 \leq \frac{\pi}{2} \|D_0|\gamma|\|_1 = \frac{\pi}{2} \|\gamma\|_F,$$

$$(A.2) \quad \phi^{(\gamma)} \leq \frac{\pi}{2} \|\gamma\|_1 \|\nabla|\gamma|\| \leq \frac{\pi}{2} \|\gamma\|_1 \|D_0|\gamma|\|.$$

LEMMA A.2 ([19], Lemma A.9). *Es sei $\gamma \in F$. Dann gilt*

$$X^{(\gamma)} \leq \phi^{(|\gamma|)}, \quad \|X^{(\gamma)}\| \leq \|\phi^{(|\gamma|)}\|, \quad \text{und} \quad \|W^{(\gamma)}\| \leq \|\phi^{(|\gamma|)}\|.$$

BEWEIS. Wir beweisen nur die dritte Aussage. Es sei $\gamma = \gamma_+ - \gamma_-$, d.h. γ_+ und γ_- seien der positive bzw. negative Teil von γ . Dann gilt

$$W^{(\gamma)} = \phi^{(\gamma_+)} - \phi^{(\gamma_-)} - X^{(\gamma_+)} + X^{(\gamma_-)} \leq \phi^{(\gamma_+)} + X^{(\gamma_-)} \leq \phi^{(\gamma_+)} + \phi^{(\gamma_-)} = \phi^{(|\gamma|)},$$

wobei wir die Lemmata A.3 und A.2 benützt haben. Auf dieselbe Weise erhalten wir $W^{(\gamma)} \geq -\phi^{(\gamma_-)} - X^{(\gamma_+)} \geq -\phi^{(\gamma_-)} - \phi^{(\gamma_+)} = -\phi^{(|\gamma|)}$, so dass $|(f, W^{(\gamma)}f) \leq (f, \phi^{(|\gamma|)}f)$ für alle $f \in \mathfrak{H}$ gilt. Daraus folgt sofort die Behauptung. \square

LEMMA A.3. *Es sei $0 \leq \gamma \in F$. Dann gilt $0 \leq X^{(\gamma)} \leq \phi^{(\gamma)}$ und insbesondere $0 \leq W^{(\gamma)}$.*

Eine unmittelbare Konsequenz des vorhergehenden Lemmas ist

LEMMA A.4 ([19], Lemma 2.2). *Es sei $\gamma = \gamma^* \in \mathfrak{S}^1(\mathfrak{H})$ und $\gamma' \in F$. Dann gilt*

$$|D(\rho_\gamma, \rho_{\gamma'})| \leq \frac{\pi}{4} \|\gamma\|_1 \operatorname{tr}(|\nabla|\gamma||),$$

$$E(\gamma, \gamma') \leq D(\rho_{|\gamma|}, \rho_{|\gamma'|}).$$

Außerdem benötigen wir

LEMMA A.5 (Bach et al. [8]). *Für alle $\gamma \in F$ gilt $E(\gamma, \gamma) \leq \frac{\pi}{4} \operatorname{tr}(\gamma|\nabla|\gamma|)$.*

Das folgende Lemma zeigt die relative Kompaktheit der Hartree-Fock-Wechselwirkung.

LEMMA A.6 ([19], Lemma A.10 und Lemma A.11). *Es sei $\gamma \in F$ sowie $g \in (-\sqrt{3}/2, \sqrt{3}/2)$ und $\alpha \in \mathbb{R}$. Dann ist $W^{(\gamma)}$ relativ D_0 -kompakt. Der Operator $D_{g,\alpha}^{(\gamma)}$ ist selbstadjungiert mit $\mathcal{D}(D_{g,\alpha}^{(\gamma)}) = \mathcal{D}(D_g) = H^1(\mathbb{R}^3)^4$ und*

$$\sigma_{\text{ess}}(D_{g,\alpha}^{(\gamma)}) = \sigma_{\text{ess}}(D_g) = (-\infty, -1] \cup [1, \infty).$$

Schließlich benötigen wir noch folgendes Lemma (siehe [19, Lemma A.7] und [117]):

LEMMA A.7. (1) Es sei $C_g := (\sqrt{4g^2 + 9} - 4g)/3$, und für $0 \leq g < \sqrt{3}/2$ sei

$$d_g := (1 + C_g^2 - \sqrt{(1 - C_g^2)^2 + 4g^2 C_g^2})/2.$$

Dann gilt für $g \in [0, \sqrt{3}/2]$ nach Morozov ([117])

$$|D_g|^2 \geq d_g^2 |D_0|^2.$$

Wenn zusätzlich $\gamma \in F$ und $d_g - 4|\alpha| \|\gamma\|_1 > 0$ gilt, dann folgt außerdem

$$|D_{g,\alpha}^{(\gamma)}|^2 \geq (d_g - 4|\alpha| \|\gamma\|_1)^2 |D_0|^2.$$

(2) Mit $b_g := \sqrt{1 - g^2}(\sqrt{4g^2 + 9} - 4g)/3$ und für $g \in (0, \sqrt{3}/2)$ gilt

$$|D_g|^2 \geq b_g^2 |\nabla|^2.$$

Wenn zusätzlich $b_g - 4|\alpha| \|\gamma\|_1 > 0$ gilt, dann folgt

$$|D_{g,\alpha}^{(\gamma)}|^2 \geq (b_g - 4|\alpha| \|\gamma\|_1)^2 |\nabla|^2,$$

$$|D_{g,\alpha}^{(\gamma)}|^2 \geq (1 - 4|\alpha| \|\gamma\|_1 b_g^{-1})^2 |D_g|^2.$$

A.2. Das Minimax-Prinzip von Griesemer und Siedentop

In [70] wurde folgendes Minimax-Prinzip für nach unten unbeschränkte Operatoren bewiesen:

SATZ A.8. Es sei A ein selbstadjungierter Operator in einem Hilbert-Raum $\mathfrak{h} = \mathfrak{h}_+ \oplus \mathfrak{h}_-$ mit $\mathfrak{h}_+ \perp \mathfrak{h}_-$. Es sei Λ_{\pm} die orthogonale Projektion auf \mathfrak{h}_{\pm} und es sei \mathfrak{Q} ein Teilraum mit $\mathcal{D}(A) \subset \mathfrak{Q} \subset \mathcal{Q}(A)$ und $\Lambda_{\pm} \mathfrak{h} \subset \mathfrak{Q}$, wobei $\mathcal{D}(A)$ und $\mathcal{Q}(A)$ den Operator- bzw. Formdefinitionsbereich bezeichnen. Es sei $P_+ := \chi_{(0,\infty)}(A)$, $P_- := \chi_{(-\infty,0)}(A)$, $\mathfrak{Q}_{\pm} := \mathfrak{Q} \cap \mathfrak{h}_{\pm}$ und

$$\lambda_n(A) := \inf_{\substack{M_+ \subset \mathfrak{Q}_+ \\ \dim(M_+) = n}} \sup_{\substack{\phi \in M_+ \oplus \mathfrak{Q}_- \\ \|\phi\| = 1}} (\phi, A\phi).$$

Dann gilt:

(1) Wenn $(\phi, A\phi) \leq 0$ für alle $\phi \in \mathfrak{Q}_-$ gilt, dann folgt

$$\lambda_n(A) \leq \mu_n(A|P_+ \mathfrak{h}).$$

(2) Wenn $(\phi, A\phi) > 0$ für alle $0 \neq \phi \in \mathcal{Q}(A) \cap \mathfrak{h}_+$ gilt und $(|A| + 1)^{\frac{1}{2}} P_- \Lambda_+$ beschränkt ist, dann folgt

$$\lambda_n(A) \geq \mu_n(A|P_+ \mathfrak{h}).$$

Hierbei sind die μ_n die üblichen (Courant)Minimax-Werte eines nach unten halbbeschränkten Operators.

Dilatierte Schrödinger-Operatoren und das Pauli-Fierz-Modell

B.1. Abschätzungen für dilatierte Schrödinger-Operatoren

In diesem Anhang zitieren wir einige Ergebnisse aus [13], die wir für die Betrachtung des nicht-relativistischen Grenzwertes dilatierter Dirac-Operatoren in Kapitel III.3 sowie für die Behandlung von Resonanzen im Pauli-Fierz-Modell in Kapitel V benötigen. Insbesondere Satz B.3 verallgemeinern wir in Satz III.15 in Kapitel III.2.5 partiell auf dilatierte Dirac-Operatoren.

Wir wiederholen Definition (V.4) des Mehrteilchen-Schrödinger-Operators aus Kapitel V.1

$$(B.1) \quad H_{\text{el}} := -\frac{1}{2}\Delta_{3N} + \sum_{j=1}^N \frac{-\mathfrak{Z}}{|x_j|} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{|x_i - x_j|}$$

sowie seine (komplex) dilatierte Version

$$(B.2) \quad H_{\text{el}}(\theta) := -\frac{e^{-2\theta}}{2}\Delta_{3N} + \sum_{j=1}^N \frac{-e^{-\theta}\mathfrak{Z}}{|x_j|} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{e^{-\theta}}{|x_i - x_j|}.$$

Man beachte den zusätzlichen Faktor von $1/2$ vor dem Laplace-Operator im Vergleich zu [13]. Dieser ändert jedoch nichts an den Aussagen oder Beweisen der zitierten Sätze.

Wir nehmen an, dass das Spektrum von H_{el} die Struktur

$$\sigma(H_{\text{el}}) = \{E_1, E_2, \dots\} \cup [\Sigma, \infty)$$

hat, wobei $\Sigma := \inf \sigma_{\text{ess}}(H_{\text{el}})$ gilt und $E_1 < E_2 < \dots$ (mindestens zwei) Eigenwerte sind, die sich höchstens bei Σ häufen. Wir setzen $\delta := \text{dist}(E_n, \sigma(H_{\text{el}}) \setminus \{E_n\}) > 0$ und definieren (mit $r > 0$ klein genug) $P_{\text{el},n'}(\theta) := -(2\pi i)^{-1} \int_{|E_{n'} - z| = r} (H_{\text{el}}(\theta) - z)^{-1} dz$ als Projektion auf den Eigenraum von $H_{\text{el}}(\theta)$ zum Eigenwert $E_{n'}$. Zur Abkürzung schreiben wir $\bar{P}_{\text{el},n'}(\theta) := 1 - P_{\text{el},n'}(\theta)$ und $P_{\text{el},n'} := P_{\text{el},n'}(0)$. Für $\eta > 0$ mit $E_n + \delta/2 < \Sigma - \eta$ definieren wir $P_{\text{disc}}(\theta) := \sum_{i: E_i \leq \Sigma - \eta} P_i(\theta)$ und $\bar{P}_{\text{disc}}(\theta) := 1 - P_{\text{disc}}(\theta)$.

Das folgende Lemma erlaubt es, den dilatierten Operator (B.2) durch den nicht dilatierten Operator (B.1) zu kontrollieren. Wir wählen im Folgenden ein hinreichend kleines $\theta_0 > 0$.

LEMMA B.1 ([13], Corollary 1.4.). *Es gibt eine Konstante $C > 0$, so dass für alle $|\theta| < \theta_0$*

$$\|[H_{\text{el}}(\theta) - H_{\text{el}}](H_{\text{el}} \pm i)^{-1}\| \leq C|\theta|$$

gilt.

Aus Lemma (B.1) folgt

KOROLLAR B.2 ([13], Gleichung (3.79)). *Es gibt ein $C > 0$, so dass für alle $|\theta| < \theta_0$*

$$\|P_n(\theta) - P_n(0)\| \leq C|\theta|$$

gilt. Dieselbe Abschätzung ergibt sich, wenn man P_n durch P_{disc} ersetzt.

Mit Hilfe von Lemma B.1 und Korollar B.2 sowie einer Resolventenreihe zeigt man

SATZ B.3 ([13], Lemma 3.8.). *Es sei $z \in \mathbb{C}$ mit $\text{Re } z < \Sigma - \eta$. Dann ist für hinreichend kleines $|\theta|(1 + (\Sigma - \eta - \text{Re } z)^{-1})$ der Operator $H_{\text{el}}(\theta) - z$ auf $\text{Ran } \bar{P}_{\text{disc}}(\theta)$ invertierbar, und es gilt*

$$\|(\bar{P}_{\text{disc}}(\theta)H_{\text{el}}(\theta)\bar{P}_{\text{disc}}(\theta) - z)^{-1}\bar{P}_{\text{disc}}(\theta)\| \leq 2(\Sigma - \eta - \text{Re } z)^{-1}.$$

Der Beweis dieses Lemmas benützt, dass für $\theta = 0$ die Abschätzung mit Konstante eins (statt zwei) gilt, und dass wegen Lemma B.1 der Operator $H_{\text{el}}(0) - H_{\text{el}}(\theta)$ relativ $H_{\text{el}}(0)$ -beschränkt ist.

B.2. Abschätzungen für das Pauli-Fierz-Modell

In diesem Abschnitt geben wir einige wichtige technische Abschätzungen aus [12] und [13] ohne Beweis.

Zur Erinnerung definieren wir nochmals (siehe [13] und den Beweis von Lemma V.11) $B_\theta(\rho) := H_{\text{el}}(\theta) \otimes \mathbf{1}_f - E_j + e^{-\theta}(\mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f + \rho_0)$ mit $\rho_0 = g^{2-\epsilon}$. $B_\theta(\rho)$ ist ein Hilfsobjekt, mit dessen Hilfe man sich in verschiedenen Resolventenentwicklungen eine Menge kombinatorischer Überlegungen erspart. Man beachte die Inklusion $\mathcal{A} \subset \rho(\bar{P}(\theta)H_0(\theta))$. Ferner definieren wir $P(\theta) := P_{\text{el},n}(\theta) \otimes \chi_{H_f \leq \rho_0}$ und $\bar{P}(\theta) := 1 - P(\theta)$. Im Übrigen verweisen wir auf die Definitionen in Kapitel V.1.

LEMMA B.4 ([13], Lemma 3.11). *Es gibt eine Konstante $C > 0$, so dass für $0 < \vartheta < \theta_0$, alle g mit $0 \leq g\rho_0^{-1/2} \leq 1/3$ und $0 < \rho_0 \leq (\delta/3) \sin \vartheta$ sowie für alle $z \in \mathcal{A}$ die Abschätzung*

$$(B.3) \quad \|B_\theta(\rho_0) \frac{\bar{P}(\theta)}{H_0(\theta) - z}\| \leq \frac{C}{\vartheta}$$

gilt.

Der Beweis von Lemma B.4 beruht auf Lemma B.3, der Tatsache, dass $H_{\text{el}}(\theta)$ eingeschränkt auf $\text{Ran } P_{\text{disc}}(\theta)$ ähnlich zu einem selbstadjungierten Operator ist und verschiedenen anderen Abschätzungen an die Resolvente von $H_{\text{el}}(\theta)$ sowie der Anwendung des Spektralsatzes für H_f .

Das folgende Korollar wurde in [11] benützt:

KOROLLAR B.5. *Es gibt eine Konstante $C > 0$, so dass für $0 < \vartheta < \theta_0$, alle g mit $0 \leq g\rho_0^{-1/2} \leq 1/3$ und $0 < \rho_0 \leq (\delta/3) \sin \vartheta$ und für alle $z \in \mathcal{A}$ die Abschätzung*

$$\| |B_\theta(\rho_0)|^{1/2} \frac{\bar{P}(\theta)}{H_0(\theta) - z} |B_{\bar{\theta}}(\rho_0)|^{1/2} \| \leq \frac{C}{\vartheta}$$

gilt.

BEWEIS. Indem wir in Gleichung die Adjungierten nehmen (B.3), finden wir $\|\frac{\bar{P}(\theta)}{H_0(\theta)-z}|B_{\bar{\theta}}(\rho_0)\| \leq \frac{C}{\vartheta}$. Die Behauptung folgt nun durch komplexe Interpolation [123, Kapitel IX.4, Proposition 9]. \square

LEMMA B.6 ([13], Lemma 3.13). *Es gibt eine Konstante $C > 0$, so dass für $0 < \vartheta < \theta_0$ genügend klein, $\theta_1, \theta_2 \in \{\pm i\vartheta\}$ und für alle $\rho > 0$ die Abschätzung*

$$(B.4) \quad \||B_{\theta_1}(\rho)|^{-1/2}W_g(\theta)|B_{\theta_2}(\rho)|^{-1/2}\| \leq g\frac{C}{\vartheta}(1 + \rho^{-1/2})$$

gilt.

Der Beweis von Lemma B.6 benützt, dass $\|A_{\kappa}(x)_-\psi\| \leq C\|H_f^{1/2}\psi\|$ und $\|A_{\kappa}(x)_+\psi\| \leq C\|(H_f + 1)^{1/2}\psi\|$ für ein $0 < C$ und alle ψ im Definitionsbereich von $H_f^{1/2}$ gilt, dass $H_{\text{el}}(0) - H_{\text{el}}(\theta)$ relativ $H_{\text{el}}(0)$ -beschränkt ist, und einige andere Abschätzungen. Der Term proportional zu $\rho^{-1/2}$ ist auf das $+1$ in der Abschätzung für den Erzeugungsoperator $A_{\kappa}(x)_+$ und eine ähnliche Konstante in der Abschätzung des elektronischen Operators zurückzuführen. Man beachte, dass die symmetrische Form der Abschätzung (B.4) wesentlich ist. Abschätzungen an $W_g(\theta)|B_{\theta_2}(\rho)|^{-1}$ führen zu einem schlechteren Verhalten für $\rho \rightarrow 0$.

LEMMA B.7 ([13], Lemma 3.14). *Es gibt ein $C > 0$, so dass für $\vartheta \in (0, \theta_0)$, $\rho_0 < (\delta/3) \sin \vartheta$, $0 < g\rho_0^{-1/2} \ll \vartheta^2$ und für alle $z \in \mathcal{A}$ der Operator $\bar{P}(\theta)H_g\bar{P}(\theta) - z$ auf $\text{Ran } \bar{P}(\theta)$ invertierbar ist und die Abschätzung*

$$\|[\bar{P}(\theta)H_g(\theta)\bar{P}(\theta) - z]^{-1}\bar{P}(\theta)\| \leq \frac{C}{\vartheta\rho_0}$$

erfüllt.

Der Beweis von Lemma B.7 benützt Korollar B.5, Lemma B.6 und eine Entwicklung in eine Neumann-Reihe.

LEMMA B.8 ([13], Lemma 3.15). *Es gelte $\vartheta \in (0, \theta_0)$. Es sei $\rho_0 < (\delta/3) \sin \vartheta$ und $0 < g\rho_0^{-1/2} \ll \vartheta^2$. Dann gilt für alle $z \in \mathcal{A}$, dass der Feshbach-Operator $\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z)$, der in Gleichung (V.9) definiert wurde, existiert. Wenn $z \in \mathcal{A}$ gilt, dann ist $H_g(\theta) - z$ beschränkt invertierbar genau dann, wenn der Feshbach-Operator $\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z)$ beschränkt invertierbar ist. Es gilt die Gleichung*

$$(B.5) \quad (H_g(\theta) - z)^{-1} = [P(\theta) - \bar{P}(\theta)(\bar{P}(\theta)H_g(\theta)\bar{P}(\theta) - z)^{-1}\bar{P}(\theta)W_g(\theta)P(\theta)] \\ \times \mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z)^{-1}[P(\theta) - P(\theta)W_g(\theta)\bar{P}(\theta)(\bar{P}(\theta)H_g(\theta)\bar{P}(\theta) - z)^{-1}\bar{P}(\theta)] \\ + \bar{P}(\theta)[\bar{P}(\theta)H_g(\theta)\bar{P}(\theta) - z]^{-1}\bar{P}(\theta),$$

wobei die linke Seite genau dann existiert, wenn die rechte Seite existiert.

Außerdem gibt es eine von g unabhängige Konstante $C > 0$, so dass für alle $z \in \mathcal{A}$ die Abschätzungen

$$(B.6) \quad \|(\bar{P}(\theta)H_g(\theta)\bar{P}(\theta) - z)^{-1}\bar{P}(\theta)W_g(\theta)P(\theta)\| \leq \frac{Cg}{\vartheta\rho_0^{1/2}}$$

und

$$(B.7) \quad \|P(\theta)W_g(\theta)\bar{P}(\theta)(\bar{P}(\theta)H_g(\theta)\bar{P}(\theta) - z)^{-1}\| \leq \frac{Cg}{\vartheta\rho_0^{1/2}}$$

gelten.

Die Formeln (B.6) und (B.7) werden ähnlich bewiesen wie Lemma B.7. Zusammen mit Lemma B.7 implizieren sie die Existenz des Feshbach-Operators und die Gültigkeit von Gleichung (B.5) (siehe [12, Theorem IV.1]). Man beachte, dass der Operator $W_g(\theta)$ in den Formeln (B.6) und (B.7) die Divergenz für $\rho_0 \rightarrow 0$ im Vergleich zu B.7 reduziert.

Das folgende Lemma gibt global für alle $z \in \mathcal{A}$ eine Approximation des Feshbach-Operators (siehe [13], Lemma 3.16, Abschätzungen an Rem₀ bis Rem₃):

LEMMA B.9. *Es sei $0 < \epsilon < 1/3$ und $0 < \vartheta < \theta_0$. Dann gibt es eine Konstante $C \geq 0$, so dass für alle genügend kleinen $g > 0$ mit $\rho_0 < (\delta/3) \sin \vartheta$ und für alle $z \in \mathcal{A}$ die Abschätzungen*

$$\|[\mathcal{F}_{P(\theta)}(H_g(\theta) - z) - (E_j - z + e^{-\theta} \mathbf{1}_{\text{el}} \otimes H_f - g^2 Q^{(\theta)}(z))]P(\theta)\| \leq Cg^{2+\epsilon}$$

und

$$\|P(\theta)W_g(\theta)P(\theta)\| = \mathcal{O}(g^{2+\epsilon})$$

gelten.

Der lange und technische Beweis von Lemma B.9 beruht auf der Entwicklung der Resolvente in eine Neumann-Reihe, auf ähnlichen Abschätzungen wie in B.6 und auf der pull-through-Formel [12, Lemma IV.8].

Für z genügend nahe zu E_j kann $Q^{(\theta)}(z)$ durch $\tilde{Z}(\alpha, \theta)$ approximiert werden (siehe [13, Lemma 3.16, Abschätzungen an Rem₄ und Rem₅]).

LEMMA B.10. *Es sei $0 < \epsilon < 1/3$ und $0 < \vartheta < \theta_0$. Dann gibt es eine Konstante $C \geq 0$, so dass für alle genügend kleinen $g > 0$ mit $\rho_0 < (\delta/3) \sin \vartheta$ und alle $z \in D(E_j, \rho_0/2)$ die Abschätzung*

$$g^2 \|Q^{(\theta)}(z) - \tilde{Z}(\alpha, \theta)\| \leq Cg^{2+\epsilon}$$

gilt.

Zum Beweis benötigt man zusätzliche Abschätzungen, um die z -Abhängigkeit von $Q^{(\theta)}(z)$ zu eliminieren. Jedoch scheint Lemma B.10 nicht für alle $z \in \mathcal{A}$ zu gelten, was in [13] anscheinend benutzt wird. Lemma B.10 und Formel (V.16) implizieren

KOROLLAR B.11. *Unter den Annahmen von Lemma B.10 gilt*

$$g^2 \|Q^{(\theta)}(z) - Z(\theta)\| \leq Cg^{2+\epsilon}.$$

BEMERKUNG B.12. Man beachte, dass zur Approximation des Feshbach-Operators $\mathcal{F}_{P(\bar{\theta})}(H_g(\bar{\theta}) - z)$ für $\theta = i\vartheta$ mit $\vartheta > 0$ das $-i\epsilon$ in der Definition (V.10) durch $+i\epsilon$ ersetzt werden muss. Insbesondere müssen das Spektrum und der numerische Wertebereich dieses Operators an der reellen Achse gespiegelt werden.

Literaturverzeichnis

- [1] ABOU SALEM, W. K. ; FAUPIN, J. ; FRÖHLICH, J. ; SIGAL, I. M.: On the Theory of Resonances in Non-Relativistic QED and Related Models. In: *ArXiv e-prints* 711 (2007)
- [2] AGUILAR, J. ; COMBES, J. M.: A Class of Analytic Perturbations for One-Body Schrödinger Hamiltonians. In: *Comm. Math. Phys.* 22 (1971), S. 269–279
- [3] ARAI, Asao: A Particle-Field Hamiltonian in Relativistic Quantum Electrodynamics. In: *J. Math. Phys.* 41 (2000), Nr. 7, S. 4271–4283
- [4] ARAI, Asao: Non-Relativistic Limit of a Dirac-Maxwell Operator in Relativistic Quantum Electrodynamics. In: *Rev. Math. Phys.* 15 (2003), Nr. 3, S. 245–270
- [5] AU, C. K. ; FEINBERG, G.: Erratum: Effects of Retardation on Electromagnetic Self-Energy of Atomic States. In: *Phys. Rev. A* 12 (1975), Nr. 4, S. 1733–1734
- [6] AU, Chi-Kwan ; FEINBERG, Gerald: Effects of Retardation on Electromagnetic Self-Energy of Atomic States. In: *Phys. Rev. A* 9 (1974), Nr. 5, S. 1794–1800
- [7] BACH, Volker ; BARBAROUX, Jean-Marie ; HELFFER, Bernard ; SIEDENTOP, Heinz: Stability of Matter for the Hartree-Fock Functional of the Relativistic Electron-Positron Field. In: *Doc. Math.* 3 (1998), S. 353–364 (electronic)
- [8] BACH, Volker ; BARBAROUX, Jean-Marie ; HELFFER, Bernard ; SIEDENTOP, Heinz: On the Stability of the Relativistic Electron-Positron Field. In: *Comm. Math. Phys.* 201 (1999), S. 445–460
- [9] BACH, V. ; FRÖHLICH, J. ; SIGAL, I. M.: Mathematical Theory of Nonrelativistic Matter and Radiation. In: *Lett. Math. Phys.* 34 (1995), Nr. 3, S. 183–201
- [10] BACH, V. ; FRÖHLICH, J. ; SIGAL, I. M.: Mathematical Theory of Radiation. In: *Found. Phys.* 27 (1997), Nr. 2, S. 227–237
- [11] BACH, V. ; FRÖHLICH, J. ; SIGAL, I.M. *Spectral Analysis for Systems of Atoms and Molecules coupled to the Quantized Radiation Field*. Preprint, mp_arc 98-728. 1998
- [12] BACH, Volker ; FRÖHLICH, Jürg ; SIGAL, Israel M.: Quantum Electrodynamics of Confined Nonrelativistic Particles. In: *Adv. Math.* 137 (1998), Nr. 2, S. 299–395
- [13] BACH, Volker ; FRÖHLICH, Jürg ; SIGAL, Israel M.: Spectral Analysis for Systems of Atoms and Molecules Coupled to the Quantized Radiation Field. In: *Comm. Math. Phys.* 207 (1999), Nr. 2, S. 249–290
- [14] BALSLEV, E. ; COMBES, J. M.: Spectral Properties of Many-Body Schrödinger Operators with Dilatation-Analytic Interactions. In: *Comm. Math. Phys.* 22 (1971), S. 280–294
- [15] BALSLEV, E. ; HELFFER, B.: Limiting Absorption Principle and Resonances for the Dirac Operator. In: *Adv. Appl. Math.* 13 (1992), Nr. 2, S. 186–215
- [16] BARBAROUX, Jean-Marie ; CHEN, Thomas ; VOUGALTER, Vitali ; VUGALTER, Semjon: On the Ground State Energy of the Translation Invariant Pauli-Fierz Model. In: *Proc. Amer. Math. Soc.* 136 (2008), Nr. 3, S. 1057–1064 (electronic)
- [17] BARBAROUX, Jean-Marie ; CHEN, Thomas ; VUGALTER, Semjon: Binding Conditions for Atomic N -Electron Systems in Non-Relativistic QED. In: *Ann. Henri Poincaré* 4 (2003), Nr. 6, S. 1101–1136

- [18] BARBAROUX, Jean-Marie ; ESTEBAN, Maria J. ; SÉRÉ, Eric: Some Connections Between Dirac-Fock and Electron-Positron Hartree-Fock. In: *Ann. Henri Poincaré* 6 (2005), Nr. 1, S. 85–102
- [19] BARBAROUX, Jean-Marie ; FARKAS, Walter ; HELFFER, Bernard ; SIEDENTOP, Heinz: On the Hartree-Fock Equations of the Electron-Positron Field. In: *Comm. Math. Phys.* 255 (2005), Nr. 1, S. 131–159
- [20] BARBAROUX, Jean-Marie ; HELFFER, Bernard ; SIEDENTOP, Heinz: Remarks on the Mittleman Max-Min Variational Method for the Electron-Positron Field. In: *J. Phys. A* 39 (2006), Nr. 1, S. 85–98
- [21] BARBAROUX, Jean-Marie ; LINDE, Helmut ; VUGALTER, Semjon: Quantitative Estimates on the Enhanced Binding for the Pauli-Fierz Operator. In: *J. Math. Phys.* 46 (2005), Nr. 12, S. 122103, 11
- [22] BARYSZ, Maria ; SADLEJ, Andrzej: Two-Component Methods of Relativistic Quantum Chemistry: From the Douglas-Kroll Approximation to the Exact Two-Component Formalism. In: *J. Molec. Struct. (Theochem)* 573 (2001), S. 181–200
- [23] BETHE, H.A.: The Electromagnetic Shift of Energy Levels. In: *Phys. Rev., Minneapolis, II, Ser.* 72 (1947), S. 339–341
- [24] BETHE, Hans A. ; SALPETER, Edwin E.: *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*. Berlin-Göttingen-Heidelberg: Springer-Verlag, 1957
- [25] BICKEL, William S.: Mean Lives of Some Excited States in Multiply Ionized Oxygen and Neon. In: *Phys. Rev.* 162 (1967), Nr. 1, S. 7
- [26] BICKEL, William S. ; GOODMAN, Allan S.: Mean Lives of the 2p and 3p Levels in Atomic Hydrogen. In: *Physical Review* 148 (1970), Nr. 2, S. 1–4
- [27] BJORKEN, J.D. ; DRELL, S.D.: *Relativistische Quantenfeldtheorie*. Mannheim: Bibliographisches Institut., 1967
- [28] BORN, M. ; HEISENBERG, W. ; JORDAN, P.: Zur Quantenmechanik. II. In: *Z. f. Physik* 35 (1926), S. 557–615
- [29] BREIT, G. ; TELLER, E.: Metastability of Hydrogen and Helium Levels. In: *Astrophysical Journal* 91 (1940), S. 215–238
- [30] BROWN, G. E. ; RAVENHALL, D. G.: On the Interaction of Two Electrons. In: *Proc. Roy. Soc. London Ser. A.* 208 (1951), S. 552–559
- [31] BRUMMELHUIS, Raymond ; RÖHRL, Norbert ; SIEDENTOP, Heinz: Stability of the Relativistic Electron-Positron Field of Atoms in Hartree-Fock Approximation: Heavy Elements. In: *Doc. Math., J. DMV* 6 (2001), S. 1–8
- [32] CHEN, Thomas ; VOUGALTER, Vitali ; VUGALTER, Semjon A.: The Increase of Binding Energy and Enhanced Binding in Nonrelativistic QED. In: *J. Math. Phys.* 44 (2003), Nr. 5, S. 1961–1970
- [33] CHUPP, E. L. ; DOTCHIN, L. W. ; PEGG, D. J.: Radiative Mean-Life Measurements of Some Atomic-Hydrogen Excited States Using Beam-Foil Excitation. In: *Physical Review* 175 (1968), Nr. 1, S. 45–50
- [34] COHEN-TANNOUJJI, Claude ; DUPONT-ROC, Jacques ; GRYNBERG, Gilbert: *Atom-Photon Interactions – Basic Processes and Applications*. John Wiley and Sons, Inc., 1992
- [35] COHEN-TANNOUJJI, Claude ; DUPONT-ROC, Jacques ; GRYNBERG, Gilbert: *Photons & Atoms*. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2004
- [36] DAVIES, E. B.: The Functional Calculus. In: *J. London Math. Soc. (2)* 52 (1995), Nr. 1, S. 166–176
- [37] DAVIES, E. B.: Pseudo-Spectra, the Harmonic Oscillator and Complex Resonances. In: *R. Soc. Lond. Proc. Ser. A Math. Phys. Eng. Sci.* 455 (1999), Nr. 1982, S. 585–599

- [38] DIRAC, P. A. M.: The Quantum Theory of the Emission and Absorption of Radiation. In: *Proceedings Royal Soc. London (A)* 114 (1927), S. 243–265
- [39] DIRAC, P. A. M.: A Theory of Electrons and Protons. In: *Proceedings Royal Soc. London (A)* 126 (1930), S. 360–365
- [40] DIRAC, P.-A.-M.: Théorie du Positron. In: COCKCROFT (Hrsg.) ; CHADWICK, J. (Hrsg.) ; JOLIOT, F. (Hrsg.) ; JOLIOT, J. (Hrsg.) ; BOHR, N. (Hrsg.) ; GAMOV, G. (Hrsg.) ; DIRAC, P.A.M. (Hrsg.) ; HEISENBERG, W. (Hrsg.): *Structure et propriétés des noyaux atomiques. Rapports et discussions du septieme conseil de physique tenu à Bruxelles du 22 au 29 octobre 1933 sous les auspices de l'institut international de physique Solvay. Publiés par la commission administrative de l'institut.*, Paris: Gauthier-Villars. XXV, 353 S., 1934, S. 203–212
- [41] DIRAC, P.A.M.: The Quantum Theory of the Electron. In: *Proc. Royal Soc. London* 117 (1928), Nr. A, S. 610–624
- [42] DOUGLAS, Marvin ; KROLL, Norman M.: Quantum Electrodynamical Corrections to the Fine Structure of Helium. In: *Annals of Physics* 82 (1974), S. 89–155
- [43] DUNFORD, Nelson: Spectral Operators. In: *Pacific J. Math.* 4 (1954), S. 321–354
- [44] DUNFORD, Nelson: A Survey of the Theory of Spectral Operators. In: *Bull. Am. Math. Soc.* 64 (1958), S. 217–274
- [45] DUNFORD, Nelson ; SCHWARTZ, Jacob T.: *Linear Operators. Part III: Spectral Operators. With the assistance of William G. Bade and Robert G. Bartle. Repr. of the orig., publ. 1971 by John Wiley and Sons Ltd., Paperback ed.* Wiley Classics Library. New York etc.: John Wiley and Sons Ltd./Interscience Publishers, Inc., 1988
- [46] EINSTEIN, A.: Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt. In: *Annalen der Physik* 322 (1905), S. 132–148
- [47] ESTEBAN, M. J. ; SÉRÉ, E.: Nonrelativistic Limit of the Dirac-Fock Equations. In: *Ann. Henri Poincaré* 2 (2001), Nr. 5, S. 941–961
- [48] ESTEBAN, Maria J. ; SÉRÉ, Eric: Solutions of the Dirac-Fock Equations for Atoms and Molecules. In: *Comm. Math. Phys.* 203 (1999), Nr. 3, S. 499–530
- [49] ETHERTON, R. C. ; BEYER, L. M. ; MADDOX, W. E. ; BRIDWELL, L. B.: Lifetimes of 3p, 4p, and 5p States in Atomic Hydrogen. In: *Physical Review A* 2 (1970), Nr. 6, S. 2177–2179
- [50] EVANS, William D. ; PERRY, Peter ; SIEDENTOP, Heinz: The Spectrum of Relativistic One-Electron Atoms According to Bethe and Salpeter. In: *Comm. Math. Phys.* 178 (1996), Nr. 3, S. 733–746
- [51] FERMI, Enrico: *Nuclear Physics. A course given at the University of Chicago. - Notes compiled by Jay Orear, A. H. Rosenfeld and R. A. Schluter. Revised edition.* Chicago: University of Chicago Press; London: Cambridge University Press., 1950
- [52] FESHBACH, Herman: Unified Theory of Nuclear Reactions. In: *Ann. Phys.* 5 (1958), S. 357–390
- [53] FEYNMAN, R. P.: Space-Time Approach to Quantum Electrodynamics. In: *Phys. Rev.* 76 (1949), Nr. 6, S. 769–789
- [54] FEYNMAN, R. P.: The Theory of Positrons. In: *Phys. Rev.* 76 (1949), Nr. 6, S. 749–759
- [55] FEYNMAN, R. P.: Mathematical Formulation of the Quantum Theory of Electromagnetic Interaction. In: *Phys. Rev.* 80 (1950), Nr. 3, S. 440–457
- [56] FOLDY, Leslie L. ; WOUTHUYSEN, Siegfried A.: On the Dirac Theory of Spin 1/2 Particles and its Non-Relativistic Limit. In: *Phys. Rev., II. Ser.* 78 (1950), S. 29–36
- [57] FRENCH, J. B. ; WEISSKOPF, V. F.: The Electromagnetic Shift of Energy Levels. In: *Phys. Rev.* 75 (1949), Nr. 8, S. 1240–1248
- [58] FRÖHLICH, J. ; GRIESEMER, M. ; SCHLEIN, B.: Asymptotic Completeness for Rayleigh Scattering. In: *Ann. H. Poincaré* 3 (2002), S. 107–170

- [59] FRÖHLICH, J. ; GRIESEMER, M. ; SCHLEIN, B.: Asymptotic Completeness for Compton Scattering. In: *Comm. Math. Phys.* 252 (2004), Nr. 1-3, S. 415–476
- [60] FRÖHLICH, J. ; GRIESEMER, M. ; SCHLEIN, B.: Rayleigh Scattering at Atoms with Dynamical Nuclei. In: *Comm. Math. Phys.* 271 (2007), Nr. 2, S. 387–430
- [61] FRÖHLICH, Jürg: On the Infrared Problem in a Model of Scalar Electrons and Massless, Scalar Bosons. In: *Ann. Inst. H. Poincaré Sect. A (N.S.)* 19 (1973), S. 1–103
- [62] FRÖHLICH, Jürg: *Über das Infrarot-Problem in einem Modell skalarer Elektronen und skalarer Bosonen der Ruhemasse 0 – (On the Infrared Problem in a Model of Scalar Electrons and Massless, Scalar Bosons)*. Zürich, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Diss., 1973
- [63] GOHBERG, Israel ; GOLDBERG, Seymour ; KAASHOEK, Marinus A.: *Operator Theory: Advances and Applications*. Bd. 49: *Classes of Linear Operators. Vol. I*. Basel : Birkhäuser Verlag, 1990
- [64] GORDON, W.: Zur Berechnung der Matrizen beim Wasserstoffatom. In: *Annalen d. Physik* 5 (1929), Nr. 2, S. 1031–1056
- [65] GRADSHTEYN, I.S. ; RYZHIK, I.M.: *Table of Integrals, Series, and Products*. 4th. Auflage. Academic Press, 1980
- [66] GRIESEMER, M. *Non-Relativistic Matter and Quantized Radiation*. Dereziński, Jan (Hrsg.) et al., Large Coulomb systems. Lecture notes on mathematical aspects of QED. Selected papers based on the presentations at the summer school on large quantum systems – QED, Nordfjordeid, Norway, August 11–18, 2003, and the summer school "Quantum field theory – from Hamiltonian point of view", Sandbjerg Manor, Denmark, August 2–9, 2000. Berlin: Springer. *Lecture Notes in Physics* 695, 217-248 (2006). 2006
- [67] GRIESEMER, M. ; HASLER, D.: Analytic Perturbation Theory and Renormalization Analysis of Matter Coupled to Quantized Radiation. In: *ArXiv e-prints* 801 (2008)
- [68] GRIESEMER, M. ; LIEB, E. ; LOSS, M.: Ground States in Non-Relativistic Quantum Electrodynamics. In: *Inv. Math.* 145 (2001), S. 557–595
- [69] GRIESEMER, Marcel ; LEWIS, Roger T. ; SIEDENTOP, Heinz: A Minimax Principle for Eigenvalues in Spectral Gaps: Dirac Operators with Coulomb Potential. In: *Doc. Math.* 4 (1999), S. 275–283
- [70] GRIESEMER, Marcel ; SIEDENTOP, Heinz: A Minimax Principle for the Eigenvalues in Spectral Gaps. In: *J. London Math. Soc. (2)* 60 (1999), Nr. 2, S. 490–500
- [71] GROTCHE, Howard: Erratum: "Lamb Shift in Nonrelativistic Quantum Electrodynamics" [Am. J. Phys. 49, 48 (1981)]. In: *American Journal of Physics* 49 (1981), Nr. 7, S. 699–699
- [72] GROTCHE, Howard: Lamb Shift in Nonrelativistic Quantum Electrodynamics. In: *American Journal of Physics* 49 (1981), Nr. 1, S. 48–51
- [73] GUSTAFSON, K. ; WEIDMANN, J.: On the Essential Spectrum. In: *J. Math. Anal. Appl.* 25 (1969), S. 121–127
- [74] GUSTAFSON, Karl: Necessary and Sufficient Conditions for Weyl's Theorem. In: *Michigan Math. J.* 19 (1972), S. 71–81
- [75] HAINZL, Christian ; SIEDENTOP, Heinz: Non-Perturbative Mass and Charge Renormalization in Relativistic No-Photon Quantum Electrodynamics. In: *Comm. Math. Phys.* 243 (2003), Nr. 2, S. 241–260
- [76] HAINZL, Christian ; VOUGALTER, Vitali ; VUGALTER, Semjon A.: Enhanced Binding in Non-Relativistic QED. In: *Comm. Math. Phys.* 233 (2003), Nr. 1, S. 13–26
- [77] HASLER, D. ; HERBST, I.: On the Self-Adjointness and Domain of Pauli-Fierz Type Hamiltonians. In: *ArXiv e-prints* 707 (2007)
- [78] HASLER, D. ; HERBST, I.: Absence of Ground States for a Class of Translation Invariant Models of Non-relativistic QED. In: *Comm. Math. Phys.* 279 (2008), Nr. 3, S. 769–787

- [79] HASLER, D. ; HERBST, I. ; HUBER, M.: On the Lifetime of Quasi-Stationary States in Non-Relativistic QED. In: *ArXiv e-prints* 709 (2007). Zur Veröffentlichung angenommen bei *Ann. Henri Poincaré*
- [80] HAYNSWORTH, Emilie V.: Determination of the Inertia of a Partitioned Hermitian Matrix. In: *Linear Algebra and Appl.* 1 (1968), Nr. 1, S. 73–81
- [81] HEISENBERG, W. ; PAULI, W.: Zur Quantendynamik der Wellenfelder. In: *Z. f. Physik* 56 (1929), S. 1–61
- [82] HELFFER, B. ; SJÖSTRAND, J.: Équation de Schrödinger avec champ magnétique et équation de Harper. In: *Schrödinger operators (Sønderborg, 1988)* Bd. 345. Berlin : Springer, 1989, S. 118–197
- [83] HERBST, I.: The Spectrum of Hilbert Space Semigroups. In: *J. Operator Theory* 10 (1983), Nr. 1, S. 87–94
- [84] HERBST, Ira W.: Contraction Semigroups and the Spectrum of $A_1 \otimes I + I \otimes A_2$. In: *J. Operator Theory* 7 (1982), Nr. 1, S. 61–78
- [85] HOWLAND, James S.: The Livsic Matrix in Perturbation Theory. In: *J. Math. Anal. Appl.* 50 (1975), S. 415–437
- [86] HUBER, Matthias: *Stabilität des relativistischen Elektronen-Positronen-Feldes in Hartree-Fock-Näherung für schwere Atome*. Ludwig-Maximilians-Universität München, Fakultät für Physik, Diplomarbeit, August 2004
- [87] HUBER, Matthias ; SIEDENTOP, Heinz: Solutions of the Dirac-Fock Equations and the Energy of the Electron-Positron Field. In: *Arch. Ration. Mech. Anal.* 184 (2007), Nr. 1, S. 1–22
- [88] HUBER, Matthias ; STOCKMEYER, Edgardo: Perturbative Implementation of the Furry Picture. In: *Lett. Math. Phys.* 79 (2007), Nr. 1, S. 99–108
- [89] HUNZIKER, Walter: Resonances, Metastable States and Exponential Decay Laws in Perturbation Theory. In: *Comm. Math. Phys.* 132 (1990), Nr. 1, S. 177–188
- [90] IANTCHENKO, A. ; JAKUBASSA-AMUNDSEN, D. H.: On the Positivity of the Jansen-Heß Operator for Arbitrary Mass. In: *Ann. Henri Poincaré* 4 (2003), Nr. 6, S. 1083–1099
- [91] ICHINOSE, Takashi: Tensor Products of Linear Operators and the Method of Separation of Variables. In: *Hokkaido Math. J.* 3 (1974), S. 161–189
- [92] JAKUBASSA-AMUNDSEN, D. H.: The Essential Spectrum of Relativistic One-Electron Ions in the Jansen-Hess Model. In: *Math. Phys. Electron. J.* 8 (2002), Paper 3, 30 pp. (electronic)
- [93] JAKUBASSA-AMUNDSEN, Doris H.: The HVZ Theorem for a Pseudo-Relativistic Operator. In: *Ann. Henri Poincaré* 8 (2007), Nr. 2, S. 337–360
- [94] JANSEN, Georg ; HESS, Bernd A.: Revision of the Douglas-Kroll Transformation. In: *Physical Review A* 39 (1989), Nr. 11, S. 6016–6017
- [95] JORDAN, P.: Die Lichtquantenhypothese. Entwicklung und gegenwärtiger Stand. In: *Ergebnisse der exakten Naturwissenschaften* 7 (1928), S. 168–208
- [96] KATO, Tosio: Wave Operators and Similarity for some Non-Selfadjoint Operators. In: *Math. Ann.* 162 (1965/1966), S. 258–279
- [97] KATO, Tosio: *Grundlehren der mathematischen Wissenschaften*. Bd. 132: *Perturbation Theory for Linear Operators*. 1. Auflage. Berlin : Springer-Verlag, 1966
- [98] KROLL, Norman M. ; LAMB, Willis E.: On the Self-Energy of a Bound Electron. In: *Phys. Rev.* 75 (1949), Nr. 3, S. 388–398
- [99] KUTZELNIGG, Werner: Relativistic One-Electron Hamiltonians ‘for Electrons Only’ and the Variational Treatment of the Dirac Equation. In: *Chemical Physics* 225 (1997), Nr. 1–3, S. 203–222
- [100] LAMB, Willis E. ; RETHERFORD, Robert C.: Fine Structure of the Hydrogen Atom by a Microwave Method. In: *Physical Review* 72 (1947), Nr. 3, S. 241–243

- [101] LAMB, Willis E. ; RETHERFORD, Robert C.: Fine Structure of the Hydrogen Atom. Part I. In: *Phys. Rev.* 79 (1950), Nr. 4, S. 549–572
- [102] LAMB, Willis E. ; RETHERFORD, Robert C.: Fine Structure of the Hydrogen Atom. Part II. In: *Phys. Rev.* 81 (1951), Nr. 2, S. 222–232
- [103] LANDAU, L.D. ; LIFSCHITZ, E.M.: *Lehrbuch der theoretischen Physik. In deutscher Sprache hrsg. von Paul Ziesche. Band 3: Quantenmechanik. Übers. aus dem Russ. von A. Kühnel. Unter Mitarb. von L. P. Pitaevskij. 9., bearb. Aufl.* Frankfurt am Main: H. Deutsch., 1992
- [104] LANDAU, L.D. ; LIFSCHITZ, E.M. ; BERESTETSKIJ, V.B. ; PITAEVSKIJ, L.P.: *Lehrbuch der theoretischen Physik. In deutscher Sprache hrsg. von Paul Ziesche. Band 4: Quantenelektrodynamik. Übers. aus dem Russ. und in deutscher Sprache hrsg. von Adolf Kühnel. 7., bearb. Aufl.* Frankfurt am Main: H. Deutsch., 1991
- [105] LIEB, Elliott H.: Bound on the Maximum Negative Ionization of Atoms and Molecules. In: *Physical Review A (General Physics)* 29 (1984), Nr. 6, S. 3018–3028
- [106] LIEB, Elliott H. ; LOSS, Michael: Stability of a Model of Relativistic Quantum Electrodynamics. In: *Comm. Math. Phys.* 228 (2002), Nr. 3, S. 561–588
- [107] LIEB, Elliott H. ; SIEDENTOP, Heinz ; SOLOVEJ, Jan P.: Stability and Instability of Relativistic Electrons in Classical Electromagnetic Fields. In: *J. Statist. Phys.* 89 (1997), Nr. 1-2, S. 37–59. – Dedicated to Bernard Jancovici
- [108] LIEB, Elliott H. ; SIEDENTOP, Heinz ; SOLOVEJ, Jan P.: Stability of Relativistic Matter with Magnetic Fields. In: *Phys. Rev. Lett.* 79 (1997), Nr. 10, S. 1785–1788
- [109] LIVSHITS, M. S.: The Application of Non-Self-Adjoint Operators to Scattering Theory. In: *Soviet Physics. JETP* 4 (1957), S. 91–98
- [110] LIVŠIĆ, M. S.: The Method of Non-Selfadjoint Operators in Scattering Theory. In: *Uspehi Mat. Nauk (N.S.)* 12 (1957), Nr. 1(73), S. 212–218
- [111] MATTE, Oliver ; STOCKMEYER, Edgardo: Spectral Theory of No-Pair Hamiltonians. In: <http://www.citebase.org/abstract?id=oai:arXiv.org:0803.1652> (2008)
- [112] MENNICKEN, Reinhard ; MOTOVILOV, Alexander K.: Operator Interpretation of Resonances Arising in Spectral Problems for 2×2 Operator Matrices. In: *Math. Nachr.* 201 (1999), S. 117–181
- [113] MENNIKEN, R. ; MOTOVILOV, A. K.: Operator Interpretation of Resonances Generated by (2×2) -matrix Hamiltonians. In: *Teoret. Mat. Fiz.* 116 (1998), Nr. 2, S. 163–181
- [114] MILONNI, Peter W.: *The Quantum Vacuum: An Introduction to Quantum Electrodynamics.* 1. Auflage. Boston : Academic Press, Inc., 1994
- [115] MITTLEMAN, Marvin H.: Theory of Relativistic Effects on Atoms: Configuration-Space Hamiltonian. In: *Phys. Rev. A* 24 (1981), Nr. 3, S. 1167–1175
- [116] MOCHIZUKI, Kiyoshi: Eigenfunction Expansions Associated with the Schrödinger Operator with a Complex Potential and the Scattering Theory. In: *Publ. Res. Inst. Math. Sci. Ser. A* 4 (1968/69), S. 419–466
- [117] MOROZOV, Sergey: *Extension of a Minimax Principle for Coulomb-Dirac Operators.* Theresienstr. 39, 80333 München, Germany, Mathematisches Institut, Ludwig-Maximilians-Universität, Masterarbeit, August 2004
- [118] MOROZOV, Sergey ; VUGALTER, Semjon: Stability of Atoms in the Brown-Ravenhall Model. In: *Ann. Henri Poincaré* 7 (2006), Nr. 4, S. 661–687
- [119] NENCIU, G. Self-Adjointness and Invariance of the Essential Spectrum for Dirac Operators Defined as Quadratic Forms. In: *Comm. Math. Phys.* 48 (1976), S. 235–247
- [120] PATUREL, Eric: Solutions of the Dirac-Fock equations without projector. In: *Ann. Henri Poincaré* 1 (2000), Nr. 6, S. 1123–1157

- [121] PLANCK, Max: Ueber das Gesetz der Energieverteilung im Normalspectrum. In: *Annalen der Physik* 309 (1901), Nr. 4, S. 553–563
- [122] REED, Michael ; SIMON, Barry: *Methods of Modern Mathematical Physics. I. Functional Analysis*. New York : Academic Press, 1972
- [123] REED, Michael ; SIMON, Barry: *Methods of Modern Mathematical Physics. II. Fourier Analysis, Self-Adjointness*. New York : Academic Press [Harcourt Brace Jovanovich Publishers], 1975
- [124] REED, Michael ; SIMON, Barry: *Methods of Modern Mathematical Physics*. Bd. 4: Analysis of Operators. 1. Auflage. New York : Academic Press, 1978
- [125] REED, Michael ; SIMON, Barry: *Methods of Modern Mathematical Physics. III*. New York : Academic Press [Harcourt Brace Jovanovich Publishers], 1979. – Scattering theory
- [126] REIHER, Markus ; WOLF, Alexander: Exact Decoupling of the Dirac Hamiltonian. I. General Theory. In: *The Journal of Chemical Physics* 121 (2004), Nr. 5, S. 2037–2047
- [127] REIHER, Markus ; WOLF, Alexander: Exact Decoupling of the Dirac Hamiltonian. II. The Generalized Douglas–Kroll–Hess Transformation up to Arbitrary Order. In: *The Journal of Chemical Physics* 121 (2004), Nr. 22, S. 10945–10956
- [128] RÖHRL, Norbert: *Stabilität und Instabilität des relativistischen Elektronen-Positronen-Felds in Hartree-Fock-Näherung*. 1. Auflage. München : Hieronymus, December 2000 (Typoskript-Edition)
- [129] SCHECHTER, Martin: On the Essential Spectrum of an Arbitrary Operator. I. In: *J. Math. Anal. Appl.* 13 (1966), S. 205–215
- [130] SCHIFF, Leonard I.: *Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, 1949
- [131] SCHWEBER, Silvan S.: *QED and the Men Who Made it: Dyson, Feynman, Schwinger, and Tomonaga*. Princeton, NJ : Princeton University Press, 1994 (Princeton Series in Physics)
- [132] SCHWINGER, Julian: On Quantum-Electrodynamics and the Magnetic Moment of the Electron. In: *Phys. Rev.* 73 (1948), Nr. 4, S. 416–417
- [133] SCHWINGER, Julian: On Radiative Corrections to Electron Scattering. In: *Phys. Rev.* 75 (1949), Nr. 5, S. 898–899
- [134] SCHWINGER, Julian: Quantum Electrodynamics II. Vacuum Polarization and Self-Energy. In: *Phys. Rev., II. Ser.* 75 (1949), S. 651–679
- [135] SCHWINGER, Julian: Quantum Electrodynamics. III. The Electromagnetic Properties of the Electron - Radiative Corrections to Scattering. In: *Phys. Rev., II. Ser.* 76 (1949), S. 790–817
- [136] SCHWINGER, Julian (Hrsg.): *Selected Papers on Quantum Electrodynamics*. New York: Dover Publications, Inc., 1958
- [137] ŠEBA, Petr: The Complex Scaling Method for Dirac Resonances. In: *Lett. Math. Phys.* 16 (1988), Nr. 1, S. 51–59
- [138] SIEDENTOP, Heinz ; STOCKMEYER, Edgardo: The Douglas-Kroll-Heß Method: Convergence and Block-Diagonalization of Dirac Operators. In: *Ann. Henri Poincaré* 7 (2006), Nr. 1, S. 45–58
- [139] SIMON, Barry: *London Mathematical Society Lecture Note Series*. Bd. 35: *Trace Ideals and their Applications*. Cambridge : Cambridge University Press, 1979
- [140] STOCKMEYER, Edgardo ; ZENK, Heribert: Dirac Operators Coupled to the Quantized Radiation Field: Essential Self-Adjointness à la Chernoff. In: *Lett. Math. Phys.* 83 (2008), Nr. 1, S. 59–68
- [141] THALLER, Bernd: *The Dirac Equation*. 1. Auflage. Berlin : Springer-Verlag, 1992 (Texts and Monographs in Physics)
- [142] TOMONAGA, S.: On a Relativistically Invariant Formulation of the Quantum Theory of Wave Fields. In: *Progress of Theoretical Physics* 1 (1946), S. 27–42

- [143] TOMONAGA, S.-I.: On Infinite Field Reactions in Quantum Field Theory. In: *Physical Review* 74 (1948), S. 224–225
- [144] WEDER, R. A.: Spectral Properties of the Dirac Hamiltonian. In: *Ann. Soc. Sci. Bruxelles Sér. I* 87 (1973), S. 341–355
- [145] WEIDMANN, Joachim: *Lineare Operatoren in Hilberträumen. Teil 1*. Stuttgart : B. G. Teubner, 2000
- [146] WENTZEL, G.: Über strahlungslose Quantensprünge. In: *Z. f. Physik* 43 (1927), S. 524–530
- [147] WOLF, Alexander ; REIHER, Markus ; HESS, Bernd: The Generalized Douglas-Kroll Transformation. In: *J. Chem. Phys.* 117 (2002), Nr. 20, S. 9215–9226
- [148] ZHANG, Fuzhen (Hrsg.): *Numerical Methods and Algorithms*. Bd. 4: *The Schur complement and its applications*. New York : Springer-Verlag, 2005
- [149] ŽISLIN, G. M.: A Study of the Spectrum of the Schrödinger Operator for a System of Several Particles. In: *Trudy Moskov. Mat. Obšč.* 9 (1960), S. 81–120

Lebenslauf

17. April 1979	Geboren in Augsburg
09/85 – 07/89	Grundschule in Diedorf
09/89 – 06/98	Besuch des humanistischen Zweiges des Gymnasiums bei St. Stephan in Augsburg
06/98	Abitur am Gymnasium bei St. Stephan in Augsburg
07/98 – 04/99	Wehrdienst in Hemau und Füssen
10/99 – 03/02	Studium der Mathematik und der Physik in Augsburg
09/01	Diplom-Vorprüfung in Physik und in Mathematik an der Universität Augsburg
04/02 – 08/04	Studium der Physik an der Ludwig-Maximilians-Universität München
08/04	Diplom in Physik an der Ludwig-Maximilians-Universität München
seit 10/04	Promotionsstudium in Mathematik und wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Ludwig-Maximilians-Universität München

