Schwache Differenzierbarkeit der Eigenfunktionen des Schrödinger-Operators

Masterarbeit
im 1-Fach Masterstudiengang Mathematik
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel

vorgelegt von
Jonas Jakob Lorenzen

Erstgutachter: Prof. Dr. Steffen Börm
Zweitgutachter: Prof. Dr. Malte Braack

Kiel im Oktober 2017

Zusammenfassung

Dieser Arbeit liegt der Artikel [15], *On the regularity of the electronic Schrödinger equation in Hilbert spaces of mixed derivatives*, von Harry Yserentant zugrunde. Die dortige Nummerierung der hier wiedergegebenen Aussagen und Beweisideen wird jeweils in der Beschreibung der betreffenden Aussage angegeben.

Es werden die Lösungen $u \in \mathcal{H}^2(\mathbb{R}^{3N})$ der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$Hu = \lambda u$$

mit $\lambda \in \mathbb{R}$ auf ihre Differenzierbarkeit untersucht. Dabei ist H der Schrödinger-Operator eines Systems mit N Elektronen unter Verwendung der Born-Oppenheimer-Approximation. Hiernach werden die Nuclei als unbeweglich angenommen und die relative Bewegung der Elektronen untersucht. Aus dem HVZ-Satz folgt die Existenz von Lösungen der Schrödinger-Gleichung. Die elektrostatischen Wechselwirkungen der Elektronen mit den Kernen und untereinander werden durch Coulomb-Potentiale beschrieben. Diese weisen für das Mehrteilchenproblem Singularitäten auf, welche die wesentliche Schwierigkeit bei der Analyse der Eigenfunktionen darstellen.

Es wird nachgewiesen, dass die Lösungen globale schwache Ableitungen hoher Ordnung (bis zu $N+1$) besitzen. Dies resultiert aus den Antisymmetrieeigenschaften, die eine zulässige Zustandsfunktionen u nach dem Pauli-Prinzip erfüllen muss. Konkret ermöglichen diese die Anwendung einer Variante der Hardy-Ungleichung zur Beschränkung der Potentialanteile des Schrödinger-Operators. Dabei werden anfangs die Spins der Elektronen fixiert.

Zunächst wird die Schrödinger-Gleichung verallgemeinert zu einem Variationsproblem von der Form

$$\forall v \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \quad \int_{\mathbb{R}^{3N}} (H + \mu \cdot Id) u(x) v(x) \, dx = \int_{\mathbb{R}^{3N}} (\lambda + \mu) u(x) v(x) \, dx$$

mit einem Verschiebungsparameter $\mu \in \mathbb{R}$.

Anschließend wird ein modifiziertes Problem betrachtet, dessen Lösungen in natürlicher Weise die gewünschten schwachen Ableitungen besitzen. Durch geeignete Wahl von μ kann mit einem Eindeutigkeitsargument gezeigt werden, dass die Eigenfunktionen von H ebenfalls zu diesen Lösungen gehören und somit die gleiche Regularität aufweisen.

Daraufhin wird dieses Resultat auf beliebige μ ausgeweitet, um eine quantitativ bessere Abschätzung der Sobolev-Norm der Lösungen zu erhalten. Dies wird mittels einer Zerlegung in niedrig- und hochfrequente Lösungsanteile unter Zuhilfenahme der Fourier-Transformation erreicht. Statt des Verschiebungsparameters muss dann nur noch die Grenzfrequenz problemabhängig gewählt werden.

Abschließend wird ein Lösungsraum definiert, der die Regularität der Eigenfunktionen des Schrödinger-Operators unabhängig von den Spinkoordinaten der Elektronen beschreibt.

Inhaltsverzeichnis

1 Grundlagen über Hilbert- und Sobolev-Räume

In diesem Abschnitt werden einige Grundbegriffe und nützliche Aussagen aus der Theorie der Sobolev-Räume und der Funktionalanalysis aufgeführt, die bereits für die präzise Formulierung (und später die Lösung) der in dieser Arbeit behandelten Eigenwert- und Variationsprobleme unerlässlich sind. Elementare mathematische Grundlagen, insbesondere der Maßtheorie, werden dabei vorausgesetzt. Im Interesse der Vollständigkeit und einer einheitlichen Notation sind allerdings einige dieser Werkzeuge im Anhang verzeichnet.
Charakteristisch für Probleme der Quantenmechanik ist die Betrachtung von Operatoren auf einem Hilbert-Raum und deren Spektren (siehe dazu die im nächsten Abschnitt eingeführte Axiomatik). Daher folgen zunächst die Definitionen dieser Begriffe.
Es seien im Folgenden $m \in \mathbb{N}$ und $\mathbb{K} \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$.

Definition 1.1: *(Hilbert-Raum).*
Ein Paar $(V, \langle\cdot,\cdot\rangle_V)$, bestehend aus einem $\mathbb{K}$-Vektorraum V und einem Skalarprodukt auf V heißt $\mathbb{K}$-*Hilbert-Raum*, wenn V vollständig bzgl. der Norm[1] ist, die definiert wird durch:

$$\forall v \in V \quad \|v\|_V := \langle v, v\rangle_V^{\frac{1}{2}}$$

Definition 1.2: *(Operator und adjungierter Operator).*
Sei $(V, \langle\cdot,\cdot\rangle_V)$ ein $\mathbb{K}$-Hilbert-Raum und $X \subseteq V$ eine dichte Teilmenge. Eine lineare Abbildung $L : X \to V,\ \ x \mapsto Lx$ heißt *(linearer) Operator*.
Setze

$$Y := \{y \in V \mid \exists \tilde{y} \in V \quad \forall x \in X \quad \langle y, Lx\rangle_V = \langle \tilde{y}, x\rangle_V\}$$

Der Operator

$$L^* : Y \longrightarrow V,\ \ y \longmapsto \tilde{y}$$

heißt der zu L *adjungierte Operator*. Gilt $L = L^*$, so wird L *selbstadjungiert* genannt.
Gilt

$$\sup_{x \in X,\ \|x\|_V = 1} \|Lx\|_V \ < \ \infty$$

so heißt L *beschränkt*.

Definition 1.3: *(Spektrum).*
Sei V ein $\mathbb{K}$-Hilbert-Raum und $L : X \to V$ ein Operator. Die Menge

$$\sigma(L) := \{\lambda \in \mathbb{K} \mid L - \lambda \cdot Id|_X \text{ hat keine beschränkte Inverse}\}$$

heißt *Spektrum* von L.
Ein *Eigenwert* von L ist ein Element $\lambda \in \sigma(L)$ mit $Lx = \lambda x$ für einen *Eigenvektor* [2] $x \in X \setminus \{0\}$.
Weiter werden die diskrete Teilmenge

$$\sigma_{dis}(L) := \{\lambda \in \sigma(L) \mid \lambda \text{ ist isolierter Eigenwert von } L\}$$

[1] Zum Nachweis der Normeigenschaften siehe [14], V.1.3.
[2] Wenn V ein Funktionenraum ist, werden die Eigenvektoren als *Eigenfunktionen* bezeichnet.

als *diskretes Spektrum* und $\sigma_{ess}(L) := \sigma(L) \setminus \sigma_{dis}(L)$ als *wesentliches Spektrum* von L bezeichnet. Setze zudem

$$E(L) := \operatorname{span}\{x \in X \setminus \{0\} \mid x \text{ ist Eigenvektor zu } \lambda_x \in \sigma_{dis}(L)\}$$

Bemerkung 1.4 *zu 1.3*: Das Spektrum eines selbstadjungierten Operators ist stets reell. (Siehe [4], Satz 6.3.)

Der natürliche Hilbert-Raum für quantenmechanische Betrachtungen ist der Raum der quadratintegrierbaren Funktionen; darin bietet der Sobolev-Raum $\mathcal{H}^1$ die minimalen Regularitätsanforderungen für die Betrachtung von Differentialgleichungen wie der Schrödinger-Gleichung. Beide werden nun definiert.

Definition 1.5: *(Quadratintegierbare Funktionen, Schwache Ableitungen, Sobolev-Raum).*
Für alle Lebesgue-messbaren Funktionen $u, v : \mathbb{R}^m \to \mathbb{K}$ setze:

$$\begin{aligned}
\langle u, v\rangle_{\mathcal{L}^2} &:= \int_{\mathbb{R}^m} u(x) \cdot \overline{v(x)}\, dx \\
\|u\|_{\mathcal{L}^2} &:= (\langle u, u\rangle_{\mathcal{L}^2})^{\frac{1}{2}} \quad = \quad \left(\int_{\mathbb{R}^m} |u(x)|^2\, dx\right)^{\frac{1}{2}} \\
\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^m, \mathbb{K}) &:= \{u : \mathbb{R}^m \to \mathbb{K} \mid u \text{ Lebesgue-messbar}, \|u\|_{\mathcal{L}^2} < \infty\} \\
\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^m) &:= \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^m, \mathbb{R})
\end{aligned}$$

Seien $u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^m, \mathbb{K})$ und $\alpha \in \mathbb{N}_0^m$. Setze $|\alpha| := \sum\limits_{k=1}^{m} \alpha_k$ und $D^\alpha := \prod\limits_{k=1}^{m} \partial_k^{\alpha_k}$. Eine Funktion $g \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^m, \mathbb{K})$ heißt eine *schwache Ableitung von u nach α*, falls für alle $v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^m, \mathbb{K})$ gilt:

$$\langle g, v\rangle_{\mathcal{L}^2} \quad = \quad (-1)^{|\alpha|}\langle u, D^\alpha v\rangle_{\mathcal{L}^2}$$

Dann wird $D^\alpha u := g$ geschrieben.[3] Falls u für alle $\alpha \in \mathbb{N}_0^m$ mit $|\alpha| \leq k \in \mathbb{N}$ eine schwache Ableitung $D^\alpha u$ besitzt, so heißt *u k-mal schwach differenzierbar*.
Setze ferner:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}^k(\mathbb{R}^m, \mathbb{K}) &:= \{u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^m, \mathbb{K}) \mid u\ k\text{-mal schwach differenzierbar}\} \\
\mathcal{H}^k(\mathbb{R}^m) &:= \mathcal{H}^k(\mathbb{R}^m, \mathbb{R})
\end{aligned}$$

Diese Räume heißen *Sobolev-Räume*.
Definiere für alle $u, v \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^m, \mathbb{K})$:

$$\begin{aligned}
\nabla u(x) &:= (\partial_1 u(x), \ldots, \partial_m u(x)) \in \mathbb{R}^m \\
\langle u, v\rangle_{\mathcal{H}^1} &:= \int_{\mathbb{R}^m} u(x)\overline{v(x)}\, dx + \int_{\mathbb{R}^m} \langle \nabla u(x), \nabla v(x)\rangle_2\, dx \\
|u|_{\mathcal{H}^1} &:= \left(\int_{\mathbb{R}^m} \|\nabla u(x)\|_2^2\, dx\right)^{\frac{1}{2}} \quad = \quad \left(\sum_{k=1}^{m} \int_{\mathbb{R}^m} |\partial_k u(x)|^2\, dx\right)^{\frac{1}{2}} \quad = \quad \left(\sum_{k=1}^{m} \|\partial_k u\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

[3]Diese Notation ist gerechtfertigt, weil die schwache Ableitung nach α eindeutig ist. Siehe dazu [14], Definition V.1.11., sowie A.8.

$$\|u\|_{\mathcal{H}^1} := (\langle u,u\rangle_{\mathcal{H}^1})^{\frac{1}{2}} \;=\; \left(\|u\|^2_{\mathcal{L}^2} + |u|^2_{\mathcal{H}^1}\right)^{\frac{1}{2}}$$

Bemerkung 1.6 *zu 1.5*: Es gelten für alle $u, v \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ die folgenden Ungleichungen:

$$\|u\|_{\mathcal{L}^2} \;=\; \left(\|u\|^2_{\mathcal{L}^2}\right)^{\frac{1}{2}} \;\leq\; \left(\|u\|^2_{\mathcal{L}^2} + |u|^2_{\mathcal{H}^1}\right)^{\frac{1}{2}} \;=\; \|u\|_{\mathcal{H}^1} \tag{1}$$

$$|u|_{\mathcal{H}^1} \;=\; \left(|u|^2_{\mathcal{H}^1}\right)^{\frac{1}{2}} \;\leq\; \left(\|u\|^2_{\mathcal{L}^2} + |u|^2_{\mathcal{H}^1}\right)^{\frac{1}{2}} \;=\; \|u\|_{\mathcal{H}^1} \tag{2}$$

$$|\langle u,v\rangle_{\mathcal{H}^1}| \;\overset{113}{\leq}\; \|u\|_{\mathcal{H}^1}\|v\|_{\mathcal{H}^1} \tag{3}$$

Es gibt außer der oben genannten Definition noch einen alternativen Zugang zum schwachen Ableitungsbegriff, für den sogenannte Testfunktionen zum Einsatz kommen.

Definition 1.7: *(Testfunktionen).*
Für alle $u : \mathbb{R}^m \to \mathbb{K}$ bezeichne $\operatorname{supp}(u)$ den Abschluss von $\{x \in \mathbb{R}^m \mid u(x) \neq 0\}$, genannt der *Träger* von u. Die Funktionen in

$$\mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^m,\mathbb{K}) := \{u \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^m,\mathbb{K}) \mid \operatorname{supp}(u) \text{ kompakt}\}$$
$$\mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^m) := \mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^m,\mathbb{R})$$

werden als *Testfunktionen* bezeichnet.

Bemerkung 1.8 *zu 1.7*: Der Raum der Testfunktionen ist abgeschlossen unter Bildung von Summen, Produkten, skalaren Vielfachen, Produktbildung mit Polynomen und Differentiation.

Lemma 1.9: *(Approximation schwacher Ableitungen).*
Seien $u, w \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^m,\mathbb{K})$ und $\alpha \in \mathbb{N}^m_0$ sowie $(u_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^m,\mathbb{K})^{\mathbb{N}}$ mit

$$\lim_{n\to\infty} \|u_n - u\|_{\mathcal{L}^2} \;=\; 0 \;=\; \lim_{n\to\infty} \|D^\alpha u_n - w\|_{\mathcal{L}^2} \tag{4}$$

Dann ist $w = D^\alpha u$ die schwache Ableitung von u nach α.

Beweis. Siehe A.11. □

Für die Umkehrung dieser Aussage bedarf es etwas stärkerer Voraussetzungen. Es müssen zusätzlich auch bestimmte schwache Ableitungen niedrigerer Ordnungen existieren. Definiere hierzu für Multiindices $\alpha, \beta \in \mathbb{N}^m_0$:

$$\beta \;\leq\; \alpha \quad :\Longleftrightarrow \quad \forall k \in \{1,\dots,m\} \quad \beta_k \;\leq\; \alpha_k$$

Lemma 1.10: *(Approximation schwacher Ableitungen, Umkehrung).*
Seien $m \in \mathbb{N}$ und $\alpha \in \mathbb{N}^m_0$ sowie $u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^m,\mathbb{K})$. Für alle $\beta \in \mathbb{N}^m_0$ mit $\beta \leq \alpha$ existiere die (schwache) Ableitung $D^\beta u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^m,\mathbb{K})$. Weiter sei $f_n \in \mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^m,\mathbb{K})$ mit $f_n|_{\overline{B_n(0)}} = 1$ für alle $n \in \mathbb{N}$ (beachte dazu A.21). Ferner setze $u_n := f_n \cdot u$ für alle $n \in \mathbb{N}$.
Dann gilt:

$$\lim_{n\to\infty} \|D^\alpha u_n - D^\alpha u\|_{\mathcal{L}^2} \;=\; 0 \tag{5}$$

Beweis. Siehe A.12. □

Die obige Charakterisierung schwacher Ableitungen wird im Folgenden immer wieder zum Einsatz kommen, indem die zu betrachtenden Funktionenräume nicht direkt durch Differenzierbarkeitseigenschaften definiert werden sondern als Abschluss des Testfunktionenraums (oder eines Teilraums davon) unter einer geeigneten Norm. Das erste Beispiel dafür ist die Möglichkeit, den Raum $\mathcal{H}^1(\mathbb{R}^m)$ mit dem Abschluss der Testfunktionen unter der $\mathcal{H}^1$-Norm zu identifizieren.

Satz 1.11: *($\mathcal{L}^2$- und $\mathcal{H}^1$-Norm).*

(i) Die Räume $(\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^m, \mathbb{K}), \langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathcal{L}^2})$ und $(\mathcal{H}^1(\mathbb{R}^m, \mathbb{K}), \langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathcal{H}^1})$ sind $\mathbb{K}$-Hilbert-Räume.

(ii) Bezüglich der Norm $\|\cdot\|_{\mathcal{L}^2}$ liegt $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^m, \mathbb{K})$ dicht in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^m, \mathbb{K})$.

(iii) Bezüglich der Norm $\|\cdot\|_{\mathcal{H}^1}$ liegt $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^m, \mathbb{K})$ dicht in $\mathcal{H}^1(\mathbb{R}^m, \mathbb{K})$.

Beweis. Siehe [1], 2.18, 2.19, 3.6 und 3.23. □

Die Tatsache, dass Testfunktionen dicht in $\mathcal{H}^1$ liegen, ermöglicht es, ein Variationsproblem zunächst nur mithilfe von Testfunktionen zu definieren und dann durch eine stetige Fortsetzung auf den ganzen Sobolev-Raum zu erweitern. Die technischen Grundlagen für diesen Vorgang liefern die folgenden beiden Lemmata:

Lemma 1.12: *(Stetige Linear- und Bilinearformen).*
Seien $(U, \|\cdot\|_U), (V, \|\cdot\|_V)$ $\mathbb{K}$-Banach-Räume.

(i) Eine lineare Abbildung $b : V \to \mathbb{K}$ ist genau dann stetig, wenn eine Stetigkeitskonstante $\xi_S \in \mathbb{R}_{>0}$ existiert, sodass
$$\forall v \in V \quad |b(v)| \quad \leq \quad \xi_S \|v\|_V$$

(ii) Eine Bilinearform $a : U \times V \to \mathbb{K}$ ist genau dann stetig (bzgl. der Produkttopologie), wenn eine Stetigkeitskonstante $\xi_S \in \mathbb{R}_{>0}$ existiert, sodass
$$\forall (u, v) \in U \times V \quad |a(u, v)| \quad \leq \quad \xi_S \|u\|_U \|v\|_V$$

Beweis. (i) Siehe [14].
(ii) Siehe A.13. □

Lemma 1.13: *(Stetige Fortsetzungen).*
Seien $(U, \|\cdot\|_U), (V, \|\cdot\|_V)$ $\mathbb{K}$-Banach-Räume und D_U, D_V dichte Teilräume von U bzw. V.

(i) Es sei $b|_{D_V} : D_V \to \mathbb{K}$ eine stetige lineare Abbildung. Dann existiert eine eindeutige stetige Fortsetzung $b : V \to \mathbb{R}$.

(ii) $a|_{D_U \times D_V} : D_U \times D_V \to \mathbb{K}$ eine stetige Bilinearform. Dann existiert eine eindeutige stetige Fortsetzung $a : U \times V \to \mathbb{R}$.

Beweis. (i) Siehe [14], Satz II.1.5.
(ii) Siehe A.14. □

Neben Testfunktionen werden als weiteres Hilfsmittel die Schwartz-Funktionen dienen. Dies sind Funktionen, die zwar nicht notwendigerweise einen beschränkten Träger haben, aber asymptotisch schneller fallen als das Reziproke jedes Polynoms. Der wesentliche Nutzen der Schwartz-Funktionen liegt in der Anwendung der Fourier-Transformation, die auf dem Schwartz-Raum eine Isometrie bewirkt und Differentiation in algebraische Operationen umwandelt.

Definition 1.14: *(Schwartz-Funktionen).*
Für jeden Multiindex $\alpha \in \mathbb{N}_0^m$ und für alle $x \in \mathbb{R}^m$ definiere das Polynom $x^\alpha := \prod_{k=1}^{m} x_k^{\alpha_k}$. Die Funktionen in

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{K}) &:= \left\{ u \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^m, \mathbb{K}) \;\middle|\; \forall \alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^m \;\; \exists C \in \mathbb{R}_{>0} \;\; \forall x \in \mathbb{R}^m \quad |x^\beta \partial_\alpha u(x)| < C \right\} \\ \mathcal{S}(\mathbb{R}^m) &:= \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}) \end{aligned}$$

heißen *Schwartz-Funktionen*.

Bemerkung 1.15 *zu 1.14*: Es gilt $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^m, \mathbb{K}) \subseteq \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{K}) \subseteq \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^m, \mathbb{K})$ und somit liegt nach 1.11 auch $\mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$ dicht in $\mathcal{H}^1(\mathbb{R}^m)$. Weiter gelten die gleichen elementaren Eigenschaften wie in 1.8 auch für den Schwartz-Raum.

Definition 1.16: *(Fourier-Transformation).*
Für alle $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$ setze:

$$\mathcal{F}(u) : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{C}, \;\; \xi \longmapsto (2\pi)^{-\frac{m}{2}} \int_{\mathbb{R}^m} u(x) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\langle x, \xi \rangle_2} \, dx$$

Die Abbildung $\mathcal{F}(u)$ heißt die *Fourier-Transformierte* von u.

Satz 1.17: *(Fourier-Transformation).*
Die Fourier-Transformation erfüllt die folgenden Eigenschaften:

(i) Es ist $\mathcal{F} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C}) \to \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$ eine lineare Bijektion.

(ii) Die inverse Fourier-Transformation ist durch

$$\forall u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C}) \qquad \mathcal{F}^{-1}(u) : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{C}, \;\; x \longmapsto (2\pi)^{-\frac{m}{2}} \int_{\mathbb{R}^m} u(\xi) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\langle x, \xi \rangle_2} \, d\xi \tag{6}$$

gegeben.

(iii) Für alle $k \in \{1, \ldots, m\}$ und alle $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$ gilt:

$$\forall \xi \in \mathbb{R}^m \qquad \mathcal{F}(\partial_k u)(\xi) \;=\; \mathrm{i}\xi_k \mathcal{F}(u)(\xi) \tag{7}$$

(iv) Für $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$ sei $\overline{u} : \mathbb{R}^m \to \mathbb{C}, \;\; x \mapsto \overline{u(x)}$. Dann gilt:

$$\forall u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C}) \qquad \forall \xi \in \mathbb{R}^m \qquad \mathcal{F}(\overline{u})(\xi) \;=\; \overline{\mathcal{F}(u)(-\xi)} \tag{8}$$

(v) Die Fourier-Transformation ist bzgl. des $\mathcal{L}^2$-Skalarprodukts isometrisch, d. h.

$$\forall u, v \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C}) \qquad \langle u, v \rangle_{\mathcal{L}^2} \;=\; \langle \mathcal{F}(u), \mathcal{F}(v) \rangle_{\mathcal{L}^2} \tag{9}$$

Insbesondere:

$$\forall u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C}) \qquad \|u\|_{\mathcal{L}^2} \;=\; \|\mathcal{F}(u)\|_{\mathcal{L}^2} \tag{10}$$

Beweis. (i),(ii),(iii) und (v) finden sich in [14].
(iv) Seien $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$ und $\xi \in \mathbb{R}^m$. Dann gilt:

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(\overline{u})(\xi) &= (2\pi)^{-\frac{m}{2}} \int_{\mathbb{R}^m} \overline{u(x)} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\langle x, \xi \rangle_2} \, dx \\
&= (2\pi)^{-\frac{m}{2}} \int_{\mathbb{R}^m} \overline{u(x)} (-\cos(\langle x, \xi \rangle_2) - \mathrm{i} \sin(\langle x, \xi \rangle_2)) \, dx \\
&= (2\pi)^{-\frac{m}{2}} \int_{\mathbb{R}^m} \overline{u(x)} (-\cos(\langle x, -\xi \rangle_2) + \mathrm{i} \sin(\langle x, -\xi \rangle_2)) \, dx \\
&= \overline{(2\pi)^{-\frac{m}{2}} \int_{\mathbb{R}^m} u(x) (-\cos(\langle x, -\xi \rangle_2) - \mathrm{i} \sin(\langle x, -\xi \rangle_2)) \, dx} \\
&= \overline{(2\pi)^{-\frac{m}{2}} \int_{\mathbb{R}^m} u(x) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\langle x, -\xi \rangle_2} \, dx} \\
&= \overline{\mathcal{F}(u)(-\xi)}
\end{aligned}$$

□

Da im Folgenden nur reellwertige Schwartz-Funktionen betrachtet werden sollen, wird hierfür noch ein Kriterium im Zusammenhang mit der Fourier-Transformierten benötigt:

Korollar 1.18: *(Reellwertige Schwartzfunktionen).*
Sei $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$. Dann gilt:

$$u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m) \quad \Longleftrightarrow \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^m \qquad \mathcal{F}(u)(-\xi) \;=\; \overline{\mathcal{F}(u)(\xi)} \tag{11}$$

Beweis. Gilt $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$, so folgt $u = \overline{u}$ und damit nach 1.17:

$$\forall \xi \in \mathbb{R}^m \qquad \mathcal{F}(u)(-\xi) \;=\; \mathcal{F}(\overline{u})(-\xi) \;\stackrel{8}{=}\; \overline{\mathcal{F}(u)(-(-\xi))} \;=\; \overline{\mathcal{F}(u)(\xi)}$$

Gilt umgekehrt $\mathcal{F}(u)(-\xi) = \overline{\mathcal{F}(u)(\xi)}$ für alle $\xi \in \mathbb{R}^m$, impliziert dies nach 1.17:

$$\forall \xi \in \mathbb{R}^m \qquad \mathcal{F}(\overline{u})(\xi) \;\stackrel{8}{=}\; \overline{\mathcal{F}(u)(-\xi)} \;=\; \mathcal{F}(u)(-(-\xi)) \;=\; \mathcal{F}(u)(\xi)$$

woraus durch Anwendung von $\mathcal{F}^{-1}$ folgt:

$$\overline{u} \;=\; \mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(\overline{u})) \;=\; \mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(u)) \;=\; u$$

und folglich $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$. □

Zur eindeutigen Lösbarkeit der auftretenden Variationsprobleme wird ein zentrales Resultat aus der Funktionalanalysis benötigt, nämlich der Satz von Lax-Milgram. Dieser garantiert die

Existenz einer eindeutigen Lösung für solche Variationsprobleme, die von koerziven Bilinearformen und stetigen Funktionalen eines Hilbert-Raums abstammen.

Definition 1.19: *(Dualraum)*.
Sei $(V, \|\cdot\|_V)$ ein $\mathbb{K}$-Banach-Raum.

$$V^* := \{b : V \longrightarrow \mathbb{K} \mid b \text{ linear und stetig}\}$$

heißt der *Dualraum* von V.

Definition 1.20: *(Koerzivität)*.
Sei $(V, \|\cdot\|_V)$ ein $\mathbb{K}$-Banach-Raum. Eine Bilinearform $a : V \times V \to \mathbb{K}$ heißt *koerziv*, falls $\xi_C \in \mathbb{R}_{>0}$ existiert, sodass

$$\forall v \in V \quad a(v,v) \;\; \geq \;\; \xi_C \|v\|_V^2$$

Satz 1.21: *(Lax-Milgram)*.
Es seien V ein $\mathbb{K}$-Hilbert-Raum, $a : V \times V \to \mathbb{K}$ eine koerzive Bilinearform und $b \in V^*$. Dann hat das Variationsproblem

$$\forall v \in V \quad a(u,v) \;\; = \;\; b(v)$$

eine eindeutige Lösung $u \in V$.

Beweis. Siehe 6.39 in [10]. □

2 Quantenmechanische Grundlagen

Es bezeichnen $p, q : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^3$ den Impuls- bzw. den Ortsvektor eines Teilchens in Abhängigkeit von einer Zeitkoordinate. Nach der klassischen Newtonschen Mechanik wird angenommen, dass $p_0 := p(t_0) \in \mathbb{R}^3$ und $q_0 := q(t_0) \in \mathbb{R}^3$ zu einem Zeitpunkt $t_0 \in \mathbb{R}$ durch Messungen (theoretisch) eindeutig bestimmbar sind. Dann sind p, q durch Differentialgleichungen mit den Anfangsbedingungen p_0, q_0 eindeutig gegeben. Somit handelt es sich also um eine deterministische Theorie. Die Heisenbergsche Unschärferelation zeigt jedoch, dass die Newtonsche Mechanik lediglich eine Näherung ist und für kleine Teilchen unpräzise wird. Seien $\mathrm{Var}(p_0), \mathrm{Var}(q_0) \in \mathbb{R}^3$ die Messungenauigkeiten[4] der Größen p_0 bzw. q_0. Dann besagt die Heisenbergsche Unschärferelation:

$$\mathrm{Var}(p_0) \cdot \mathrm{Var}(q_0) \;\; \geq \;\; \frac{\hbar}{2}$$

wobei $\hbar$ das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum bezeichnet. Ort und Impuls sind also nicht unabhängig voneinander beliebig genau bestimmbar. Damit geht auch die kausale Berechenbarkeit von p und q verloren. Dies erfordert den Übergang zu einer *probabilistischen* Theorie, wie es die Quantenmechanik ist.

[4] Formal definiert durch die Varianzen, die sich als mittlere quadratische Abweichung der Messgrößen im Sinne von Axiom 3 ergeben. Siehe dazu [4], Abschnitt 5.1.

2.1 Axiome der Quantenmechanik

In diesem Abschnitt soll kurz die Axiomatik der Quantenmechanik eingeführt werden. Johann von Neumann hat in [9] die wesentlichen Grundlagen hierfür bereitet und eine weitere Diskussion der Axiome und äquivalenter Definitionen durchgeführt (insbesondere in Abschnitt III.1 ebendort). Die hier aufgelisteten vier Axiome finden sich - in etwas allgemeinerer Form - in Abschnitt 2.1 von [13].

Es sei im Folgenden stets $N \in \mathbb{N}$. Zunächst zu einer formalen Festlegung, die die Beschreibung von Ortskoordinaten verschiedener Teilchen vereinfachen soll:

Bemerkung 2.1 *(Notation der Ortskoordinaten)*: Es wird im Folgenden oft zweckmäßig sein, die isomorphen Räume $\left(\mathbb{R}^3\right)^N$ und $\mathbb{R}^{3N}$ sowie die zugehörigen isomorphen Funktionenräume jeweils miteinander zu identifizieren. Dementsprechend setze für alle $x \in \mathbb{R}^{3N}$, alle $u \in \mathcal{H}^2(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{K})$ und $k \in \{1, \dots, N\}$ sowie $\gamma \in \{1,2,3\}$:

$$x_{k,\gamma} := x_{3(k-1)+\gamma} \qquad \partial_{k,\gamma} u := \partial_{3(k-1)+\gamma} u$$

$$x_k := (x_{k,1}, x_{k,2}, x_{k,3}) \qquad \nabla_k u := (\partial_{k,1} u, \partial_{k,2} u, \partial_{k,3} u) \qquad \Delta_k u := \sum_{\gamma=1}^{3} \partial_{k,\gamma}^2 u$$

Axiom 1: *(Zustandsfunktion)*.
Zu einem System von N Teilchen existiert eine *Zustandsfunktion* $\Psi : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^{3N} \to \mathbb{C}$ mit $\Psi_t := \Psi(t, \cdot) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C})$ für jede Zeitkoordinate $t \in \mathbb{R}$. Der Raum $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C})$ wird daher auch *Zustandsraum* genannt.

Bemerkung 2.2 *(Born-Interpretation)*: Die Zustandsfunktion Ψ entspricht keiner real beobachtbaren Größe. Die Funktion $|\Psi|^2$ hingegen stellt eine Wahrscheinlichkeitsdichte dar: Zu gegebenem Zeitpunkt $t \in \mathbb{R}$ sei ohne Einschränkung der Allgemeinheit $\|\Psi_t\|_{\mathcal{L}^2} = 1$ angenommen (sonst betrachte $\widetilde{\Psi_t} := \frac{1}{\|\Psi_t\|_{\mathcal{L}^2}} \Psi_t$). Dann kann für jedes Gebiet $X \subseteq \mathbb{R}^{3N}$ das Integral $\int_X |\Psi_t(y)|^2 \, dy$ als die Wahrscheinlichkeit $P(x \in X)$ interpretiert werden, wobei $x := (x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^{3N}$ den Vektor der Ortskoordinaten der N Teilchen bezeichne.

Axiom 2: *(Observablen)*.
Jede messbare physikalische Größe $\lambda \in \mathbb{R}$, eine sogenannte *Observable*, korrespondiert[5] mit einem selbstadjungierten (in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C})$ nicht weiter fortsetzbaren) Operator $L : X \to \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C})$. Ist außerdem p ein reelles Polynom, so korrespondiert die Observable $p(\lambda)$ mit dem Operator $p(L)$ (definiert auf einer geeigneten Teilmenge von X).

Axiom 3: *(Erwartungswerte)*.
Sind $L : X \to \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C})$ ein selbstadjungierter Operator und $\Psi_t \in X \subseteq \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C})$ eine Zustandsfunktion zum Zeitpunkt $t \in \mathbb{R}$, so ist

$$\mathbb{E}_{\Psi_t}(L) := \int_{\mathbb{R}^{3N}} L\Psi_t(x) \overline{\Psi_t(x)} \, dx \in \mathbb{R}$$

der Erwartungswert der zu L gehörigen Messgröße im Zustand Ψ_t.

[5] Die Art dieser Korrespondenz wird durch das folgende Axiom und die anschließende Bemerkung näher beleuchtet.

Bemerkung 2.3 *(Interpretation des Spektrums)*: Das obige Axiom motiviert die folgende Interpretation: Das Spektrum von L entspricht den möglichen Werten, die die Observable λ annehmen kann. Eine Begründung dieser Betrachtung findet sich in Abschnitt 6.1 von [4]. Aufgrund dieser Beobachtung ist die Untersuchung der Spektren selbstadjungierter Operatoren von zentraler Bedeutung in der Quantenmechanik.

Axiom 4: *(Schrödinger-Gleichung)*.
Seien $m_1, \dots, m_N \in \mathbb{R}_{>0}$ die Massen der N Teilchen des Systems. Weiter sei $V : \mathbb{R}^{3N} \to \mathbb{R}$ ein sogenanntes *Potential*. Ein Operator der Form

$$H : X \longrightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}), \;\; x \longmapsto V \cdot x - \sum_{k=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m_k} \Delta_k x \tag{12}$$

heißt *Schrödinger-Operator* oder *Hamilton-Operator*. Er korrespondiert mit der Energie des Systems.[6]
Jede Zustandsfunktion Ψ ist in der ersten Koordinate differenzierbar und erfüllt die *zeitabhängige Schrödinger-Gleichung*:

$$\forall t \in \mathbb{R} \quad \mathrm{i} \cdot \partial_1 \Psi(t, \cdot) \;\; = \;\; H\Psi_t$$

Bemerkung 2.4 *(Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung)*: Ist H selbstadjungiert, liefert die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung mit einer Anfangsbedingung $\Psi(0, \cdot) = \Psi_0 \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C})$ ein Anfangswertproblem, das für alle $t \in \mathbb{R}$ eindeutig lösbar ist und $\|\Psi_t\|_{\mathcal{L}^2} = \|\Psi_0\|_{\mathcal{L}^2}$ erfüllt. Darüberhinaus lässt sich Ψ_t dann sogar in geschlossener Form angeben. Siehe hierzu Abschnitt 2 von [4].
Diese Erkenntnis wird genutzt, um die Stabilität von Zuständen zu charakterisieren: Gilt $\Psi_0 \in E(H)$, kann man zeigen, dass der Träger von Ψ_t für alle $t \in \mathbb{R}$ im Wesentlichen beschränkt bleibt; genauer: Für eine beliebige vorgegebene Wahrscheinlichkeit < 1 findet sich ein beschränktes Gebiet, in dem das System mit dieser Wahrscheinlichkeit lokalisiert ist. Ein solcher Zustand Ψ wird *gebunden* oder *stationär* genannt.
Liegt hingegen Ψ_0 im orthogonalen Komplement von $E(H)$ (bzgl. des $\mathcal{L}^2$-Skalarprodukts), so konvergiert die Wahrscheinlichkeit, dass das System in einem endlichen Gebiet lokalisiert bleibt, gegen 0 für $t \to \infty$. Das System zerfällt also mit der Zeit.
Ein Beweis dieser beiden Aussagen findet sich in Abschnitt 6.2 von [4].
Von besonderem Interesse sind die stabilen gebundenen Zustände und somit das diskrete Spektrum von H bzw. die zugehörigen Eigenfunktionen, also die Lösungen $\psi \in X$ der *zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung*

$$H\psi \;\; = \;\; \lambda\psi \tag{13}$$

für $\lambda \in \sigma_{dis}(H)$.

[6] Dabei misst der Potentialanteil die potentielle Energie, während der Differentialanteil mit der kinetischen Energie korrespondiert.

2.2 Elektronenspins

Für diesen Abschnitt wird ein System von N Elektronen zu einem fixierten Zeitpunkt $t \in \mathbb{R}$ betrachtet (die Variable t wird zur Abkürzung unterdrückt).
Bei näherer Betrachtung zeigt sich, dass die Wahl des Zustandsraums $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C})$ aus Axiom 1 bestimmte Phänomene nur unzureichend beschreibt. Experimentell lässt sich zeigen, dass Elektronen einen Eigendrehimpuls, *Spin* genannt, besitzen. Dieser lässt sich nach den Axiomen als Eigenwert eines Drehimpulsoperators beschreiben und nimmt die Werte $s \in \left\{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}$ an. Eine Zustandsfunktion ist also eigentlich keine Abbildung $\Psi : \mathbb{R}^{3N} \to \mathbb{C}$ sondern eine Abbildung

$$\Psi : \left(\mathbb{R}^3 \times \left\{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}\right)^N \longrightarrow \mathbb{C}, \quad ((x_1, s_1), \ldots, (x_N, s_N)) \longmapsto \Psi(x_1, s_1, \ldots, x_N, s_N)$$

Folglich wäre auch ein modifizierter Schrödinger-Operator $\tilde{H}$ zu definieren, der die Spins berücksichtigt. Da jedoch die Spinkräfte relativ gering sind, kann näherungsweise angenommen werden, dass eine Eigenfunktion Ψ von $\tilde{H}$ gemäß

$$\begin{aligned} \forall((x_1, s_1), \ldots, (x_N, s_N)) &\in \left(\mathbb{R}^3 \times \left\{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}\right)^N \\ \Psi(x_1, s_1, \ldots, x_N, s_N) &= \psi(x_1, \ldots, x_N)\chi(s_1, \ldots, s_N) \end{aligned} \tag{14}$$

in eine Eigenfunktion ψ von H und eine Spinfunktion $\chi : \left\{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}^N \to \mathbb{C} \setminus \{0\}$ zerfällt. Genauere Betrachtungen zu diesem Vorgang finden sich in Abschnitt 6 von [12].
Experimentell zeigt sich, dass nur bestimmte spinabhängige Zustandsfunktionen physikalisch relevant sind.[7] Deswegen bietet es sich an, das sogenannte Pauli-Prinzip als weiteres Axiom zu fordern:

Axiom 5: *(Pauli-Prinzip)*.
Eine spinabhängige Zustandsfunktion $\Psi : \left(\mathbb{R}^3 \times \left\{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}\right)^N \to \mathbb{C}$ ist antisymmetrisch unter Vertauschung je zweier Paare $(x_i, s_i), (x_j, s_j)$ von Orts- und Spinkoordinaten. Das bedeutet: Ist $\tau \in \mathrm{Sym}_N$ eine Transposition, so gilt

$$\begin{aligned} \forall((x_1, s_1), \ldots, (x_N, s_N)) &\in \left(\mathbb{R}^3 \times \left\{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}\right)^N \\ \Psi(x_{\tau(1)}, s_{\tau(1)}, \ldots, x_{\tau(N)}, s_{\tau(N)}) &= -\Psi(x_1, s_1, \ldots, x_N, s_N) \end{aligned} \tag{15}$$

Für eine kürzere Notation wäre es sinnvoll, die Spinkoordinaten im Folgenden zu unterdrücken und nur noch Eigenfunktionen von H aus dem Eingangs definierten Zustandsraum $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C})$ zu betrachten. Da jedoch das Pauli-Prinzip einen entscheidenden Beitrag zu den nachfolgenden Beweisen leistet, muss dafür zunächst eine Version des Pauli-Prinzips formuliert werden, die nur die Ortsanteile der Zustandsfunktionen betrifft. Seien dazu die Spins

[7] Siehe dazu [12], Abschnitt 7.1.

$s_1, \dots, s_N \in \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}$ der N Elektronen fixiert und:

$$I_+ := \left\{ k \in \{1, \dots, N\} \;\middle|\; s_k = \frac{1}{2} \right\} \qquad I_- := \left\{ k \in \{1, \dots, N\} \;\middle|\; s_k = -\frac{1}{2} \right\}$$

Dann sind die ortsabhängigen Anteile der Zustandsfunktionen antisymmetrisch unter Vertauschung je zweier Ortskoordinaten zu Indices aus I_+ bzw. I_-, wie das nachstehende Lemma zeigt:

Lemma 2.5.
Sei $\tau \in \mathrm{Sym}_N$ eine Transposition mit $\tau(I_+) = I_+$ und $\tau(I_-) = I_-$. Weiter sei $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C})$ der ortsabhängige Anteil einer spinabhängigen Zustandsfunktion $\Psi : (\mathbb{R}^3 \times \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\})^N \to \mathbb{C}$ gemäß 14. Dann gilt:

$$\forall x \in \mathbb{R}^{3N} \quad \psi(x_{\tau(1)}, \dots, x_{\tau(N)}) \;=\; -\psi(x_1, \dots, x_N)$$

Beweis. Nach Voraussetzung gilt $s_{\tau(k)} = s_k$ für alle $k \in \{1, \dots, N\}$. Somit folgt für alle $x \in \mathbb{R}^{3N}$:

$$\begin{aligned}
\psi(x_{\tau(1)}, \dots, x_{\tau(N)}) &\overset{14}{=} \frac{\Psi(x_{\tau(1)}, s_{\tau(1)}, \dots, x_{\tau(N)}, s_{\tau(N)})}{\chi(s_{\tau(1)}, \dots, s_{\tau(N)})} \\
&= \frac{\Psi(x_{\tau(1)}, s_{\tau(1)}, \dots, x_{\tau(N)}, s_{\tau(N)})}{\chi(s_1, \dots, s_N)} \\
&\overset{15}{=} -\frac{\Psi(x_1, s_1, \dots, x_N, s_N)}{\chi(s_1, \dots, s_N)} \\
&\overset{14}{=} -\psi(x_1, \dots, x_N)
\end{aligned}$$

□

2.3 Das Mehrteilchenproblem

Im Folgenden seien stets $K \in \mathbb{N}$ und $Z_1, \dots, Z_K \in \mathbb{N}$ sowie $Z := \sum_{k=1}^{K} Z_k$.
Betrachtet wird ein System aus N Elektronen und K Nuclei mit den Ladungszahlen $Z_1, \dots, Z_K$, die mittels elektrostatischer Wechselwirkungen paarweise miteinander interagieren. Die Frage der Existenz stabiler molekularer Zustände, also eines diskreten Spektrums des zugehörigen Schrödinger-Operators, ist ohne weitere Vereinfachung sehr diffizil.[8] Ein sehr zweckdienliches Modell ist die sogenannte *Born-Oppenheimer-Approximation*, die ausnutzt, dass die Nuclei sehr viel schwerer als die Elektronen sind. Deswegen wird angenommen, dass die Positionen der Kerne $c_1, \dots, c_K \in \mathbb{R}^3$ im Raum fixiert sind. Untersucht wird also lediglich die relative Bewegung der Elektronen um die Nuclei. Mithilfe eines zweiten Operators, der (nur) die Bewegung der Nuclei erfasst, kann dann der eigentliche molekulare Schrödinger-Operator approximiert werden. Weiterführende Betrachtungen hierzu finden sich in Abschnitt 11.4 von [4].
Wendet man man also die Born-Oppenheimer-Approximation auf H an, entfallen alle Operatoren Δ_k aus 12, die die kinetische Energie der Nuclei messen. Es bleibt noch das Potential V

[8] Laut [4], Abschnitt 10.1, sogar bislang ungelöst.

zu definieren.

Definition 2.6: *(Schrödinger-Operator des N-Elektronen-Systems nach Born-Oppenheimer).*
Sei $\kappa \in \mathbb{R}_{>0}$. Setze

$$\begin{aligned} Y_{ee} &:= \{x \in \mathbb{R}^{3N} \mid \exists (i,j) \in \{1,\ldots,N\}^2 \quad i \neq j \ \wedge \ x_i = x_j\} \\ Y_{ne} &:= \{x \in \mathbb{R}^{3N} \mid \exists (i,k) \in \{1,\ldots,N\} \times \{1,\ldots,K\} \quad x_i = c_k\} \\ Z &:= \mathbb{R}^{3N} \setminus (Y_{ee} \cup Y_{ne}) \end{aligned}$$

Außerdem setze für alle $k \in \mathbb{N}$:

$$X := \left\{u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N},\mathbb{C}) \;\middle|\; u|_Z \in \mathcal{C}^2(Z,\mathbb{C}) \quad \wedge \quad \forall \alpha \in \mathbb{N}_0^{3N} \quad |\alpha| \leq 2 \Longrightarrow D^\alpha u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N},\mathbb{C})\right\}$$

Definiere nun die Potentiale:

$$\begin{aligned} V_{ee} &: \mathbb{R}^{3N} \longrightarrow \mathbb{R}, \ x \longmapsto \begin{cases} \frac{1}{2}\sum\limits_{i=1}^{N} \sum\limits_{j \in \{1,\ldots,N\}\setminus\{i\}} \frac{1}{\|x_i - x_j\|_2}, & x \in Z \\ 0, & x \notin Z \end{cases} \\ V_{ne} &: \mathbb{R}^{3N} \longrightarrow \mathbb{R}, \ x \longmapsto \begin{cases} -\sum\limits_{i=1}^{N}\sum\limits_{k=1}^{K} \frac{Z_k}{\|x_i - c_k\|_2}, & x \in Z \\ 0, & x \notin Z \end{cases} \\ V &:= V_{ee} + V_{ne} \end{aligned}$$

und den Schrödinger-Operator[9]

$$H : X \longrightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N},\mathbb{C}), \ u \longmapsto V \cdot u - \frac{\kappa}{2}\Delta u$$

Im Folgenden ist unter *dem* Schrödinger-Operator stets die obige Wahl von H zu verstehen.

Bemerkung 2.7 *zu 2.6*: Bemerke, dass $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N},\mathbb{C}) \subseteq X \subseteq \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N},\mathbb{C})$ und somit nach 1.11 insbesondere X dicht in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N},\mathbb{C})$ liegt. Ferner sind die Mengen Y_{ee}, Y_{ne} und somit auch $Y_{ee} \cup Y_{ne}$ als endliche Vereinigungen von Lebesgue-Nullmengen wieder Lebesgue-Nullmengen. Die im Definitionsbereich von H enthaltenen Funktionen sind also fast überall zweimal stetig differenzierbar. Da $\mathcal{L}^2$-Funktionen nur bis auf Nullmengen eindeutig definiert sind, ist der Operator H somit wohldefiniert.

Bemerkung 2.8 *zu 2.6*: Tosio Kato hat in [7] gezeigt, dass ein Hamiltonscher Operator unter Voraussetzungen, wie sie H erfüllt, stets eine eindeutige Fortsetzung zu einem selbstadjungierten Operator

$$\overline{H} : \mathcal{H}^2(\mathbb{R}^{3N},\mathbb{C}) \longrightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N},\mathbb{C})$$

besitzt, der sich somit in die obige Axiomatik der Quantenmechanik einfügt. Insbesondere gilt $\sigma(H) \subseteq \sigma(\overline{H}) \subseteq \mathbb{R}$. (Vergleiche 2.12.)
Kato hat ebenfalls nachgewiesen, dass alle Eigenfunktionen von $\overline{H}$ überall dort zweimal stetig

[9] Dass das Bild von H tatsächlich in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N},\mathbb{C})$ liegt, ließe sich durch Anwendung des Satzes von Fubini-Tonelli und der Hölder-Ungleichung auf 3.8 zeigen. Da hier jedoch vorrangig die Eigenfunktionen von H untersucht werden sollen, die offensichtlich in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N},\mathbb{C})$ liegen, wird dieser Beweis nicht ausgeführt.

differenzierbar sind, wo das Potential V hinreichend regulär ist, und dort auch die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für H lösen. Da das Potential V auf Z unendlich oft stetig differenzierbar ist, was maximaler Regularität entspricht, sind also alle Eigenfunktionen von $\overline{H}$ bereits Eigenfunktionen von H. Demzufolge genügt es, die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für H zu untersuchen.

Bemerkung 2.9 *zu 2.6*: Die Regularitätseigenschaften der Eigenfunktionen sind von der Konstanten κ unabhängig.[10]
Betrachte hierzu einen Operator $\tilde{H}$, der analog zu H mit der Konstante $\tilde{\kappa} := 1$ und den Koordinaten der Nuclei $\tilde{c_l} := \frac{1}{\kappa}c_l$ für alle $l \in \{1, \ldots, N\}$ sowie dem entsprechenden Potential $\tilde{V}$ definiert wird. Bemerke zunächst, dass für alle $x \in Z$ gilt:

$$\begin{aligned}
\tilde{V}\left(\frac{1}{\kappa}x\right) &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\in\{1,\ldots,N\}\setminus\{i\}} \frac{1}{\|\frac{1}{\kappa}x_i - \frac{1}{\kappa}x_j\|_2} - \sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{K} \frac{Z_k}{\|\frac{1}{\kappa}x_i - \tilde{c_k}\|_2} \\
&= \kappa\left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\in\{1,\ldots,N\}\setminus\{i\}} \frac{1}{\|x_i - x_j\|_2} - \sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{K} \frac{Z_k}{\|x_i - c_k\|_2}\right) \qquad (16) \\
&= \kappa V(x)
\end{aligned}$$

Sei nun $\tilde{u}$ eine Eigenfunktion von $\tilde{H}$ zum Eigenwert $\lambda \in \mathbb{R}$. Setze

$$u : \mathbb{R}^{3N} \longrightarrow \mathbb{R}, \;\; x \longmapsto \tilde{u}\left(\frac{1}{\kappa}x\right)$$

Dann folgt für alle $x \in Z$ unter Verwendung der Kettenregel:

$$\begin{aligned}
\frac{\lambda}{\kappa}u(x) &= \frac{1}{\kappa}\lambda\tilde{u}\left(\frac{1}{\kappa}x\right) \\
&= \frac{1}{\kappa}\tilde{H}\tilde{u}\left(\frac{1}{\kappa}x\right) \\
&= \frac{1}{\kappa}\left(\tilde{V}\left(\frac{1}{\kappa}x\right)\tilde{u}\left(\frac{1}{\kappa}x\right) - \frac{\tilde{\kappa}}{2}\Delta\tilde{u}\left(\frac{1}{\kappa}x\right)\right) \\
&\overset{16}{=} \frac{1}{\kappa}\left(\kappa V(x)u(x) - \frac{1}{2}\kappa^2\Delta u(x)\right) \\
&= V(x)u(x) - \frac{\kappa}{2}\Delta u(x) \\
&= Hu(x)
\end{aligned}$$

Also ist u eine Eigenfunktion von H zum Eigenwert $\frac{\lambda}{\kappa}$. Mit der gleichen Rechnung erhält man zu jeder Eigenfunktion u von H eine Eigenfunktion $\tilde{u}$ von $\tilde{H}$. Ferner ist offenbar u genau dann - und genauso oft - (schwach) differenzierbar, wenn $\tilde{u}$ dies ist. Da zudem alle folgenden Regularitätsaussagen unabhängig von den Koordinaten der Nuclei sind, genügt es, statt des Operators H den Operator $\tilde{H}$ zu betrachten.

Unter Verweis auf die vorangegangene Bemerkung sei von hier an ohne Einschränkung der

[10] Um der Wahl der Einheiten aus Axiom 4 zu entsprechen, ist offenbar $\kappa := \frac{\hbar^2}{m_e}$ zu setzen, wobei $m_e \in \mathbb{R}_{>0}$ die Masse eines Elektrons bezeichne.

Allgemeinheit $\kappa = 1$ angenommen.

Bemerkung 2.10 *zu 2.6*: Die Funktionen V_{ne} und V_{ee} stellen *Coulomb-Potentiale* dar, die die elektrostatischen Kräfte zwischen den Nuclei und den Elektronen bzw. zwischen den Elektronen untereinander messen, abhängig von deren Position im Raum. Eigentlich wäre noch ein dritter Term V_{nn} zu berücksichtigen, der die Wechselwirkungen der Nuclei untereinander misst. Da diese jedoch als unbeweglich vorausgesetzt wurden, ist $V_{nn} \in \mathbb{R}$ konstant, womit folgt, dass die Eigenwertgleichung

$$(H + V_{nn})u \;=\; \lambda u$$

äquivalent ist zur Eigenwertgleichung

$$Hu \;=\; (\lambda - V_{nn})u$$

Daher kann der Potentialanteil V_{nn} unter Verwendung der Born-Oppenheimer-Approximation bei der Betrachtung des Eigenwertproblems vernachlässigt werden.

Bemerkung 2.11 *zu 2.6*: Sei $u \in X$ eine Eigenfunktion von H zum Eigenwert $\lambda \in \mathbb{R}$. Setze $v(x) := \mathrm{Re}(u(x))$ und $w(x) := \mathrm{Im}(u(x))$ für alle $x \in \mathbb{R}^{3N}$. Dann sind $v, w \in X$ und für alle $x \in Z$ gilt:

$$\begin{aligned}
\lambda v(x) + \mathrm{i}\lambda w(x) &= \lambda u(x) \\
&= Hu(x) \\
&= V(x)u(x) - \frac{1}{2}\Delta u(x) \\
&= V(x)(v(x) + \mathrm{i}w(x)) - \frac{1}{2}\Delta(v + \mathrm{i}w)(x) \\
&= V(x)v(x) - \frac{1}{2}\Delta v(x) + \mathrm{i}\left(V(x)w(x) - \frac{1}{2}\Delta w(x)\right) \\
&= Hv(x) + \mathrm{i}Hw(x)
\end{aligned}$$

Da Hv und Hw offenbar reellwertig sind, folgen durch Koeffizientenvergleich $Hv(x) = \lambda v(x)$ und $Hw(x) = \lambda w(x)$ für alle $x \in Z$. Also sind auch v und w Eigenfunktionen von H; diese liegen sogar im gleichen Eigenraum wie u. Folglich sind alle komplexwertigen Eigenfunktionen von H Linearkombinationen reellwertiger Eigenfunktionen. Es genügt daher, im Folgenden nur noch reellwertige Eigenfunktionen zu untersuchen. Alle Regularitätsaussagen übertragen sich dann durch Linearität auf den allgemeinen Fall.

In dieser Arbeit werden Differenzierbarkeitseigenschaften der (reellwertigen) Eigenfunktionen des Schrödinger-Operators diskutiert. Um die Sinnhaftigkeit dieser Theorie zu gewährleisten, ist zunächst die Existenz solcher Eigenfunktionen zu klären. Dies bedarf einer Analyse des Spektrums von H. Kernresultat ist in diesem Bereich der Satz von Hunziker, van Winter und Zhislin (HVZ-Satz).

Satz 2.12: *(Spektrum des Schrödinger-Operators).*

(i) (*HVZ-Satz*) Es existiert $\Sigma \in \mathbb{R}$ mit $\sigma_{ess}(H) = [\Sigma, \infty)$.

(ii) Gilt $N \leq Z$, so gilt $|\sigma_{dis}(H)| = \infty$. (Insbesondere $\sigma_{dis}(H) \neq \emptyset$.)

Beweis. Siehe [4], Satz 10.2 und Satz 10.3. □

Bemerkung 2.13 *zu 2.12*: Die Konstante Σ wird als Ionisierungsenergie interpretiert. Oberhalb von Σ bewegt sich demnach (mindestens) ein Elektron frei, d. h. unbeschränkt. Die Bedingung $N \leq Z$ entspricht der Tatsache, dass das System keine negative Ladung trägt, also nicht bereits (negativ) ionisiert ist.

3 Die Hardy-Ungleichung und Folgerungen für Zweiteilchensysteme

Für eine variationelle Formulierung der Eigenwertgleichung des Schrödinger-Operators wird eine Bilinearform vom Typus

$$a(u,v) \;=\; \int_{\mathbb{R}^{3N}} Hu(x)v(x)\,dx \;=\; \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)u(x)v(x)\,dx - \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \Delta u(x)v(x)\,dx$$

für $u,v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ benötigt. Um deren Stetigkeit bezüglich der $\mathcal{H}^1$-Norm nachzuweisen, bedarf es nach 1.12 einer Abschätzung von der Form

$$|a(u,v)| \;\leq\; C\|u\|_{\mathcal{H}^1}\|v\|_{\mathcal{H}^1}$$

mit einer Konstante $C \in \mathbb{R}_{>0}$. Insbesondere sind also die Integrale $\int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)u(x)v(x)\,dx$ zu beschränken. Da jedoch das Potential V nicht quadratintegrierbar ist, reicht hierfür eine einfache Anwendung der Hölder-Ungleichung nicht aus. Dieser Abschnitt dient daher der Entwicklung technischer Hilfsmittel zur Handhabung dieser und ähnlicher Integrale.
Die einzelnen Summanden des Potentials V beschreiben jeweils die Wechselwirkung von nur zwei Teilchen, sodass es sich zur Vereinfachung der Notation anbietet, zunächst $N-2$ Elektronen zu fixieren, also Funktionen von drei oder sechs Ortskoordinaten zu untersuchen, und daraus hinterher Aussagen über das gesamte System mit N Elektronen zu gewinnen.
Basis der anschließenden Überlegungen ist eine mehrdimensionale Variante der Hardy-Ungleichung, die sich aus der klassischen Form folgern lässt. Der Beweis der eindimensionalen Ungleichung ist eine Verallgemeinerung des im Original für den Fall $p = q$ geführten Beweises von Hardy, Littlewood und Pólya in [6].

Lemma 3.1: *(Eindimensionale Hardy-Ungleichung).*
Seien $q \in \mathbb{R} \setminus \{1\},\ p \in \mathbb{R}_{>1}$ und $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ integrierbar sowie

$$F : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}_{\geq 0},\;\; x \longmapsto \begin{cases} \int\limits_0^x f(t)\,dt, & q > 1 \\ \int\limits_x^\infty f(t)\,dt, & q < 1 \end{cases}$$

Dann gilt:

$$\int_0^\infty x^{-q} F(x)^p \, dx \quad \leq \quad \left(\frac{p}{|q-1|}\right)^p \int_0^\infty x^{p-q} f(x)^p \, dx \tag{17}$$

Beweis. Sei zunächst $q > 1$.
Für $f \equiv 0$ ist die Behauptung trivial, daher sei ohne Beschränkung der Allgemeinheit $f \neq 0$. Nach dem Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung gilt $F'(x) = f(x)$. Für alle $n \in \mathbb{N}$ setze:

$$\begin{aligned}
&f_n : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}, \ \ x \longmapsto \min\{n, f(x)\} \\
&F_n : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}, \ \ x \longmapsto \int_0^x f_n(t) \, dt \\
&y_0 := \inf\{y \in \mathbb{R}_{\geq 0} \mid f|_{(0,y)} \neq 0\}
\end{aligned}$$

Dann folgt für alle $y \in \mathbb{R}_{>y_0}$ mit partieller Integration und der Hölder-Ungleichung:

$$\begin{aligned}
\int_0^y x^{-q} F_n(x)^p \, dx \quad &= \quad \left[-\frac{x^{1-q}}{q-1} F_n(x)^p\right]_0^y - \int_0^y -\frac{x^{1-q}}{q-1} p F_n(x)^{p-1} f_n(x) \, dx \\
&= \quad -\frac{y^{1-q}}{q-1} F_n(y)^p + \frac{0^{1-q}}{q-1} F_n(0)^p + \frac{p}{q-1} \int_0^y x^{1-q} F_n(x)^{p-1} f_n(x) \, dx \\
&= \quad -\frac{y^{1-q}}{q-1} F_n(y)^p + \frac{p}{q-1} \int_0^y x^{1-q} F_n(x)^{p-1} f_n(x) \, dx \\
&\leq \quad \frac{p}{q-1} \int_0^y x^{1-q} F_n(x)^{p-1} f_n(x) \, dx \\
&= \quad \frac{p}{q-1} \int_0^y x^{-\frac{p-1}{p}q} F_n(x)^{p-1} \ \cdot \ x^{1-\frac{1}{p}q} f_n(x) \, dx \\
&\overset{112}{\leq} \quad \frac{p}{q-1} \left(\int_0^y x^{-q} F_n(x)^p \, dx\right)^{\frac{p-1}{p}} \left(\int_0^y x^{p-q} f_n(x)^p\right)^{\frac{1}{p}}
\end{aligned}$$

Nach Wahl von y ist $\int_0^y x^{-q} F_n(x)^p \, dx > 0$, also folgt durch Division

$$\left(\int_0^y x^{-q} F_n(x)^p \, dx\right)^{\frac{1}{p}} \leq \frac{p}{q-1} \left(\int_0^y x^{p-q} f_n(x)^p\right)^{\frac{1}{p}}$$

und somit

$$\int_0^y x^{-q} F_n(x)^p \, dx \leq \frac{p}{q-1} \int_0^y x^{p-q} f_n(x)^p \, dx$$

Es sind $(f_n)_{n\in\mathbb{N}}$ und damit auch $(F_n)_{n\in\mathbb{N}}$ monoton wachsende Folgen nichtnegativer messbarer Funktionen, also folgt mit dem Satz von Beppo Levi:

$$\begin{aligned}
\int_0^y x^{-q}F(x)^p\,dx &= \int_0^y \lim_{n\to\infty} x^{-q}F_n(x)^p\,dx \\
&\overset{123}{=} \lim_{n\to\infty}\int_0^y x^{-q}F_n(x)^p\,dx \\
&\leq \lim_{n\to\infty}\frac{p}{q-1}\int_0^y x^{p-q}f_n(x)^p\,dx \\
&\overset{123}{=} \frac{p}{q-1}\int_0^y \lim_{n\to\infty} x^{p-q}f_n(x)^p\,dx \\
&= \frac{p}{q-1}\int_0^y x^{p-q}f(x)^p\,dx
\end{aligned}$$

Die Behauptung ergibt sich hieraus als Grenzwert $y\to\infty$.
Der Fall $q<1$ folgt analog unter Ausnutzung der Tatsache, dass dann für alle $x\in\mathbb{R}$ gilt: $F'(x) = -f(x)$. □

Die folgende mehrdimensionale Version der Hardy-Ungleichung samt Beweisskizze findet sich in [8].

Satz 3.2: *(Mehrdimensionale Hardy-Ungleichung).*
Es seien $m\in\mathbb{N}$ sowie $p\in\mathbb{R}_{>1}$ und $q\in\mathbb{R}\setminus\{m\}$. Weiter sei $u\in C_0^\infty(\mathbb{R}^m)$. Falls $q>m$, gelte zudem $u(0)=0$. Dann gilt:

$$\int_{\mathbb{R}^m}\frac{|u(x)|^p}{\|x\|_2^q}\,dx \;\leq\; \left(\frac{p}{|q-m|}\right)^p\int_{\mathbb{R}^m}\frac{\|\nabla u(x)\|_2^p}{\|x\|_2^{q-p}}\,dx \tag{18}$$

Beweis. Sei zunächst $q>m$ und es gelte $u(0)=0$.
Es seien

$$\begin{aligned}
S^{m-1} &:= \{\omega\in\mathbb{R}^m \mid \|\omega\|_2 = 1\} \\
\Phi &: \mathbb{R}_{\geq 0}\times S^{m-1}\longrightarrow \mathbb{R}^m,\ \ (r,\omega)\longmapsto r\omega \\
v := u\circ\Phi &: \mathbb{R}_{\geq 0}\times S^{m-1}\longrightarrow \mathbb{R},\ \ (r,\omega)\longmapsto u(r\omega) \\
\forall\omega\in S^{m-1}\quad v_\omega := v(\cdot,\omega) &: \mathbb{R}_{\geq 0}\longrightarrow\mathbb{R},\ \ r\longmapsto u(r\omega) \\
\forall k\in\{1,\dots,m\}\quad \pi_k &: \mathbb{R}^m\longrightarrow\mathbb{R},\ \ x\longmapsto x_k
\end{aligned}$$

Dann gilt für alle $(r,\omega)\in\mathbb{R}_{\geq 0}\times S^{m-1}$ nach der mehrdimensionalen Kettenregel und der

Cauchy-Schwarz-Ungleichung:

$$\begin{aligned} |v'_\omega(r)| &= |\partial_1 v(r,\omega)| \\ &= \left|\sum_{k=1}^{m} \partial_k u(\Phi(r,\omega)) \cdot \partial_1(\pi_k \circ \Phi)(r,\omega)\right| \\ &= \left|\sum_{k=1}^{m} \partial_k u(r\omega) \cdot \omega_k\right| \\ &\overset{114}{\leq} \|\nabla u(r\omega)\|_2 \|\omega\|_2 \\ &= \|\nabla u(r\omega)\|_2 \end{aligned} \tag{19}$$

Weiter gilt nach Voraussetzung:

$$\forall \omega \in S^{m-1} \quad v_\omega(0) = u(\Phi(0,\omega)) = u(0) = 0 \tag{20}$$

Wählt man nun $f := |v_\omega|$ in 3.1, so folgt mit dem Satz von Fubini-Tonelli und der Transformation auf Kugelkoordinaten (wobei σ_{m-1} das Oberflächenmaß auf S^{m-1} gemäß A.6 bezeichne):

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^m} \frac{|u(x)|^p}{\|x\|_2^q}\, dx &\overset{118}{=} \int_0^\infty \left(\int_{S^{m-1}} r^{m-1} \frac{|u(r\omega)|}{r^q} \right) \sigma_{m-1}(d\omega)\, dr \\ &\overset{116}{=} \int_{S^{m-1}} \left(\int_0^\infty r^{m-q-1} |v_\omega(r)|^p\, dr \right) \sigma_{m-1}(d\omega) \\ &\overset{20}{=} \int_{S^{m-1}} \left(\int_0^\infty r^{m-q-1} |v_\omega(r) - v_\omega(0)|^p\, dr \right) \sigma_{m-1}(d\omega) \\ &= \int_{S^{m-1}} \left(\int_0^\infty r^{m-q-1} \left| \left(\int_0^r v'_\omega(t)\, dt \right) \right|^p dr \right) \sigma_{m-1}(d\omega) \\ &\leq \int_{S^{m-1}} \left(\int_0^\infty r^{m-q-1} \left(\int_0^r \left|v'_\omega(t)\right|\, dt \right)^p dr \right) \sigma_{m-1}(d\omega) \\ &\overset{17}{\leq} \int_{S^{m-1}} \left(\left(\frac{p}{|q-m+1-1|} \right)^p \int_0^\infty r^{p+m-q-1} \left|v'_\omega(r)\right|^p\, dr \right) \sigma_{m-1}(d\omega) \\ &= \left(\frac{p}{|q-m+1-1|} \right)^p \int_{S^{m-1}} \left(\int_0^\infty r^{p-q} \left|v'_\omega(r)\right|^p r^{m-1}\, dr \right) \sigma_{m-1}(d\omega) \\ &\overset{19}{\leq} \left(\frac{p}{|q-m+1-1|} \right)^p \int_{S^{m-1}} \left(\int_0^\infty r^{m-1} \cdot r^{p-q} \|\nabla u(r\omega)\|_2^p\, dr \right) \sigma_{m-1}(d\omega) \\ &\overset{116}{=} \left(\frac{p}{|q-m+1-1|} \right)^p \int_0^\infty \left(\int_{S^{m-1}} r^{m-1} \cdot r^{p-q} \|\nabla u(r\omega)\|_2^p\, \sigma_{m-1}(d\omega) \right) dr \\ &\overset{118}{=} \left(\frac{p}{|q-m+1-1|} \right)^p \int_{\mathbb{R}^m} \|x\|_2^{p-q} \|\nabla u(x)\|_2^p\, dx \end{aligned}$$

Der Fall $q < m$ folgt unter Ausnutzung der Kompaktheit von $\operatorname{supp}(u)$ aus der Gleichung

$$|v_\omega(r)| = \left|\lim_{b\to\infty} v_\omega(b) - v_\omega(r)\right| = \left|\lim_{b\to\infty} \int_r^b v_\omega'(s)\, ds\right| = \left|\int_r^\infty v_\omega'(s)\, ds\right|$$

analog zur obigen Rechnung. □

Von besonderem Interesse für die nachfolgenden Betrachtungen sind die folgenden Spezialfälle:

Korollar 3.3: [YSERENTANT Lemma 1, Lemma 2].
Seien $u \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ und $c \in \mathbb{R}^3$.

(i) Es gelten:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{u(x)^2}{\|x\|_2^2}\, dx \;\leq\; 4\int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla u(x)\|_2^2\, dx \;=\; 4|u|_{\mathcal{H}^1}^2 \tag{21}$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{u(x)^2}{\|x-c\|_2^2}\, dx \;\leq\; 4\int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla u(x)\|_2^2\, dx \;=\; 4|u|_{\mathcal{H}^1}^2 \tag{22}$$

(ii) Gilt $u(0) = 0$, so folgt:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{u(x)^2}{\|x\|_2^4}\, dx \;\leq\; 4\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\|\nabla u(x)\|_2^2}{\|x\|_2^2}\, dx \tag{23}$$

Beweis. Verwende 18 mit $m = 3,\ p = 2 = q$ für 21 bzw. $q = 4$ für 23.
Die Abschätzung 22 erhält man nun mit dem Transformationssatz (beachte dazu A.15), denn für $u_c : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3,\ \ x \mapsto u(x+c)$ gilt $u_c \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ und mit 21 folgt:

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^3} \frac{u(x)^2}{\|x-c\|_2^2}\, dx &\overset{117}{=} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{u_c(x)^2}{\|x\|_2^2}\, dx \\
&\overset{21}{\leq} 4\int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla u_c(x)\|_2^2\, dx \\
&\overset{130}{=} 4\int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla u(x+c)\|_2^2\, dx \\
&\overset{117}{=} 4\int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla u(x)\|_2^2
\end{aligned}$$

□

Definition 3.4.
Es bezeichne $D := \{(z,z) \mid z \in \mathbb{R}^3\}$ die *Diagonale* in $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$. Weiter seien im Folgenden $c \in \mathbb{R}^3$ und

$$f : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R},\ (x,y) \longmapsto \begin{cases} \frac{1}{\|x-y\|_2}, & (x,y) \notin D \\ 0, & (x,y) \in D \end{cases}$$

$$g_c : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}, \qquad x \longmapsto \begin{cases} \frac{1}{\|x-c\|_2}, & x \neq c \\ 0, & x = c \end{cases}$$

Die Funktion f beschreibt ein einzelnes Elektron-Elektron-Potential, g ein einzelnes Nucleus-Elektron-Potential. Die Lebesgue-Nullmenge D ist genau die Menge der singulären Punkte des Potentials f. Einige der folgenden Aussagen sind nur gültig, wenn die beteiligten Testfunktionen auf der Diagonale verschwinden. Diese Eigenschaft wird im Modell durch die Antisymmetrie der nach dem Pauli-Prinzip zulässigen Zustandsfunktionen impliziert.

Lemma 3.5: [YSERENTANT (3.7), (3.9)].
Sei $u \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$.

(i) Es gilt:

$$\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{u(x,y)^2}{\|x-y\|_2^2}\, d(x,y) \;\leq\; 2\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \|\nabla u(x,y)\|_2^2\, d(x,y) \;=\; 2|u|_{\mathcal{H}^1}^2 \tag{24}$$

(ii) Gilt $u|_D = 0$, so folgt:

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{u(x,y)^2}{\|x-y\|_2^4}\, d(x,y) \;&\leq\; 16\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} (\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u(x,y))^2\, d(x,y) \\ &=\; 16\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} \|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u\|_{\mathcal{L}^2}^2\end{aligned} \tag{25}$$

Beweis. (i) Betrachte die Abbildungen

$$\begin{aligned}\forall x \in \mathbb{R}^3 \quad v_x &: \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}^3,\; z \longmapsto u(x, x-z)\\ \forall y \in \mathbb{R}^3 \quad v_y &: \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}^3,\; z \longmapsto u(z+y, y)\end{aligned}$$

Offenbar gelten $v_x, v_y \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ für alle $x, y \in \mathbb{R}^3$. Dann folgt mit dem Transformationssatz (vgl. A.16) und dem Satz von Fubini-Tonelli aus 3.3:

$$\begin{aligned}&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{u(x,y)^2}{\|x-y\|_2^2}\, d(x,y)\\
=\;& \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{u(x,y)^2}{\|x-y\|_2^2}\, d(x,y) + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{u(x,y)^2}{\|x-y\|_2^2}\, d(x,y)\\
\overset{117}{=}\;& \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{u(x+y,y)^2}{\|x\|_2^2}\, d(x,y) + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{u(x,x-y)^2}{\|y\|_2^2}\, d(x,y)\\
\overset{116}{=}\;& \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{v_y(x)^2}{\|x\|_2^2}\, dx\, dy + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{v_x(y)^2}{\|y\|_2^2}\, dy\, dx\\
\overset{21}{\leq}\;& \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} 4\int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla v_y(x)\|_2^2\, dx\, dy + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} 4\int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla v_x(y)\|_2^2\, dy\, dx\\
\overset{131}{\underset{132}{=}}\;& 2\int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla_1 u(x+y,y)\|_2^2\, dx\, dy + 2\int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla_2 u(x,x-y)\|_2^2\, dy\, dx\\
\overset{116}{=}\;& 2\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \|\nabla_1 u(x+y,y)\|_2^2\, d(x,y) + 2\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \|\nabla_2 u(x,x-y)\|_2^2\, d(x,y)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\overset{117}{=} \; 2\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \|\nabla_1 u(x,y)\|_2^2 \, d(x,y) + 2\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \|\nabla_2 u(x,y)\|_2^2 \, d(x,y) \\
&= \; 2\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \|\nabla u(x,y)\|_2^2 \, d(x,y)
\end{aligned}$$

(ii) Betrachte

$$\forall \alpha \in \{1,2,3\} \quad \forall x \in \mathbb{R}^3 \quad v_{\alpha,x} : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}^3, \;\; z \longmapsto \partial_{1,\alpha} u(x, x-z)$$

Dann gilt $v_{\alpha,x} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ für alle $\alpha \in \{1,2,3\}$ und alle $x \in \mathbb{R}^3$. Außerdem ist nach Voraussetzung $v_y(0) = u(y,y) = 0$ für alle $y \in \mathbb{R}^3$. Wie oben folgt dann:

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{u(x,y)^2}{\|x-y\|_2^4} \, d(x,y) &\overset{117}{=} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{u(x+y,y)^2}{\|x\|_2^4} \, d(x,y) \\
&\overset{116}{=} \int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{v_y(x)^2}{\|x\|_2^4} \, dx \, dy \\
&\overset{23}{\leq} \int_{\mathbb{R}^3} 4 \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\|\nabla v_y(x)\|_2^2}{\|x\|_2^2} \, dx \, dy \\
&= 4\int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \sum_{\alpha=1}^{3} \frac{(\partial_{1,\alpha} v_y(x))^2}{\|x\|_2^2} \, dx \, dy \\
&\overset{131}{=} 4\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{(\partial_{1,\alpha} u(x+y,y))^2}{\|x\|_2^2} \, dx \, dy \\
&\overset{116}{=} 4\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{(\partial_{1,\alpha} u(x+y,y))^2}{\|x\|_2^2} \, d(x,y) \\
&\overset{117}{=} 4\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{(\partial_{1,\alpha} u(x,x-y))^2}{\|y\|_2^2} \, d(x,y) \\
&\overset{116}{=} 4\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{v_{\alpha,x}(y)^2}{\|y\|_2^2} \, dy \, dx \\
&\overset{21}{\leq} 4\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3} 4 \int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla v_{\alpha,x}\|_2^2 \, dy \, dx \\
&= 16\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \sum_{\beta=1}^{3} (\partial_{1,\beta} v_{\alpha,x}(y))^2 \, dy \, dx \\
&\overset{133}{=} 16\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \sum_{\beta=1}^{3} (-\partial_{2,\beta}\partial_{1,\alpha} u(x,x-y))^2 \, dy \, dx \\
&\overset{116}{=} 16\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} (\partial_{2,\beta}\partial_{1,\alpha} u(x,x-y))^2 \, d(x,y) \\
&\overset{117}{=} 16\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} (\partial_{2,\beta}\partial_{1,\alpha} u(x,y))^2 \, d(x,y) \\
&= 16\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} (\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} u(x,y))^2 \, d(x,y)
\end{aligned}$$

$\square$

Lemma 3.6: [YSERENTANT Lemma 3].
Seien $u, v \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$ mit $u|_D = 0$. Dann gilt:

$$\begin{aligned}
&\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}(f\cdot u)(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)\; d(x,y) \\
\leq\;& (5+4\sqrt{6})\sqrt{2}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{26}$$

Beweis. Das Integral zerfällt nach der Produktregel in vier Teile, die zunächst einzeln abgeschätzt werden.
Mit der Cauchy-Schwarz- und der Hölder-Ungleichung sowie A.17 und 3.5 folgen:

$$\begin{aligned}
&\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}f(x,y)u(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)\; d(x,y) \\
=\;& \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} u(x,y)\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}f(x,y)\cdot\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y))\; d(x,y) \\
\overset{114}{\leq}\;& \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} u(x,y)\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}f(x,y))^2\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y))^2\right)^{\frac{1}{2}} d(x,y) \\
\overset{135}{=}\;& \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} u(x,y)(6f(x,y)^6)^{\frac{1}{2}}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y))^2\right)^{\frac{1}{2}} d(x,y) \\
=\;& \sqrt{6}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{u(x,y)}{\|x-y\|_2^2}\cdot\frac{1}{\|x-y\|_2}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y))^2\right)^{\frac{1}{2}} d(x,y) \\
\overset{112}{\leq}\;& \sqrt{6}\left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\frac{u(x,y)^2}{\|x-y\|_2^4}\, d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}}\left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\frac{1}{\|x-y\|_2^2}\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y))^2\, d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}} \\
=\;& \sqrt{6}\left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\frac{u(x,y)^2}{\|x-y\|_2^4}\, d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\frac{(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y))^2}{\|x-y\|_2^2}\, d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}} \\
\overset{25}{\leq}\;& \sqrt{6}\left(16\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\frac{(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y))^2}{\|x-y\|_2^2}\, d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}} \\
\overset{24}{\leq}\;& \sqrt{6}\left(16\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}2|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
=\;& 4\sqrt{6}\sqrt{2}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

weiter bei Betrachtung von $u_\beta : \mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3 \to \mathbb{R},\ (x,y)\mapsto \partial_{2,\beta}u(x,y)$ für jedes $\beta\in\{1,2,3\}$ mit der gleichen Rechnung wie für das vordere Integral im Beweis von 3.5

$$\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha}f(x,y)\partial_{2,\beta}u(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)\; d(x,y)$$

$$
\begin{aligned}
&= \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} (\partial_{1,\alpha} f(x,y)\partial_{2,\beta} u(x,y) \cdot \partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} v(x,y))\, d(x,y) \\
&\overset{114}{\leq} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} (\partial_{1,\alpha} f(x,y)\partial_{2,\beta} u(x,y))^2\right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} (\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} v(x,y))^2\right)^{\frac{1}{2}} d(x,y) \\
&= \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} (\partial_{1,\alpha} f(x,y))^2 \sum_{\beta=1}^{3} (\partial_{2,\beta} u(x,y))^2\right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} (\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} v(x,y))^2\right)^{\frac{1}{2}} d(x,y) \\
&\overset{134}{=} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \left(f(x,y)^4 \sum_{\beta=1}^{3} (\partial_{2,\beta} u(x,y))^2\right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} (\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} v(x,y))^2\right)^{\frac{1}{2}} d(x,y) \\
&= \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{1}{\|x-y\|_2} \left(\sum_{\beta=1}^{3} (\partial_{2,\beta} u(x,y))^2\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{\|x-y\|_2} \left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} (\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} v(x,y))^2\right)^{\frac{1}{2}} d(x,y) \\
&\overset{112}{\leq} \left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{1}{\|x-y\|_2^2} \sum_{\beta=1}^{3} (\partial_{2,\beta} u(x,y))^2\, d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\quad \cdot \left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{1}{\|x-y\|_2^2} \sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} (\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} v(x,y))^2\, d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\sum_{\beta=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{(u_\beta(x,y))^2}{\|x-y\|_2^2}\, d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} v(x,y))^2}{\|x-y\|_2^2}\, d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{24}{\leq} \left(\sum_{\beta=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{(u_\beta(x,y))^2}{\|x-y\|_2^2}\, d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} 2|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} v|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{\text{vgl. 3.5}}{\leq} \left(\sum_{\beta=1}^{3} 4 \sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} (\partial_{1,\alpha} u_\beta(x,y))^2\, d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} 2|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} v|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= 2\sqrt{2} \left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} \|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} u\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} |\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} v|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}
$$

sowie analog durch Vertauschung von $(1,\alpha)$ und $(2,\beta)$ in jedem Summanden, der gleichen Rechnung wie für das hintere Integral im Beweis von 3.5 und der Kommutativität der Operatoren $\partial_{1,\alpha}$ und $\partial_{2,\beta}$

$$
\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{2,\beta} f(x,y)\partial_{1,\alpha} u(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} v(x,y)\, d(x,y) \\
&= \sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha} f(x,y)\partial_{2,\beta} u(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} v(x,y)\, d(x,y) \\
&= 2\sqrt{2} \left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} \|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} u\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} |\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} v|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}
$$

und schließlich

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} f(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)\,d(x,y)\\
=\;&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} f(x,y)\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\left(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u(x,y)\cdot\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)\right)d(x,y)\\
\overset{114}{\leq}\;&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} f(x,y)\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u(x,y))^2\right)^{\frac{1}{2}}\cdot\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y))^2\right)^{\frac{1}{2}}d(x,y)\\
=\;&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u(x,y))^2\right)^{\frac{1}{2}}\cdot\frac{1}{\|x-y\|_2}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y))^2\right)^{\frac{1}{2}}d(x,y)\\
\overset{112}{\leq}\;&\left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u(x,y))^2\,d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}}\\
&\cdot\left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\frac{1}{\|x-y\|_2^2}\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y))^2\,d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}}\\
=\;&\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u(x,y))^2\,d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\frac{(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y))^2}{\|x-y\|_2^2}\,d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}}\\
\overset{24}{\leq}\;&\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u(x,y))^2\,d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}2|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}}\\
=\;&\sqrt{2}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}
$$

Die Kombination der obigen vier Abschätzungen liefert mit der Produktregel das gewünschte Resultat:

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}(f\cdot u)(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)\,d(x,y)\\
=\;&\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\partial_{1,\alpha}(\partial_{2,\beta}f\cdot u+f\cdot\partial_{2,\beta}u)(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)\,d(x,y)\\
=\;&\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}f\cdot u+\partial_{2,\beta}f\cdot\partial_{1,\alpha}u+\partial_{1,\alpha}f\cdot\partial_{2,\beta}u+f\cdot\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u)(x,y)\\
&\qquad\cdot\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)\,d(x,y)\\
=\;&\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}f(x,y)u(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)\,d(x,y)\\
&+\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\partial_{2,\beta}f(x,y)\partial_{1,\alpha}u(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)\,d(x,y)\\
&+\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\partial_{1,\alpha}f(x,y)\partial_{2,\beta}u(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)\,d(x,y)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&+ \sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} f(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)\ d(x,y) \\
\leq\ & (4\sqrt{6}\sqrt{2} + 2\sqrt{2} + 2\sqrt{2} + \sqrt{2}) \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} \|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} |\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v|_{\mathcal{H}^1}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\
=\ & (4\sqrt{6}+5)\sqrt{2} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} \|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} |\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v|_{\mathcal{H}^1}^2 \right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}
$$

□

Lemma 3.7: [YSERENTANT Lemma 4].

(i) Seien $u, v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$. Dann gelten:

$$
\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha}(f\cdot u)(x,y)\partial_{1,\alpha}v(x,y)\ d(x,y) \ \leq\ 3\sqrt{2} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \|\partial_{1,\alpha}u\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} |\partial_{1,\alpha}v|_{\mathcal{H}^1}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \tag{27}
$$

$$
\sum_{\beta=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{2,\beta}(f\cdot u)(x,y)\partial_{2,\beta}v(x,y)\ d(x,y) \ \leq\ 3\sqrt{2} \left(\sum_{\beta=1}^{3} \|\partial_{2,\beta}u\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\beta=1}^{3} |\partial_{2,\beta}v|_{\mathcal{H}^1}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \tag{28}
$$

(ii) Seien $u, v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Dann gilt:

$$
\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha}(-g_c\cdot u)(x)\partial_{1,\alpha}v(x)\ dx \ \leq\ 6 \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \|\partial_{1,\alpha}u\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} |\partial_{1,\alpha}v|_{\mathcal{H}^1}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \tag{29}
$$

Beweis. (i) Nach der Produktregel zerfällt das Integral in zwei Teile, die zunächst separat abgeschätzt werden.
Die Cauchy-Schwarz- und die Hölder-Ungleichung sowie A.17 und 3.5 liefern:

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha}f(x,y)u(x,y)\partial_{1,\alpha}v(x,y)\ d(x,y) \\
=\ & \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} u(x,y) \sum_{\alpha=1}^{3} (\partial_{1,\alpha}f(x,y)\cdot\partial_{1,\alpha}v(x,y))\ d(x,y) \\
\overset{114}{\leq}\ & \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} u(x,y) \left(\sum_{\alpha=1}^{3} (\partial_{1,\alpha}f(x,y))^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} (\partial_{1,\alpha}v(x,y))^2 \right)^{\frac{1}{2}} d(x,y) \\
\overset{134}{=}\ & \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} u(x,y)(f(x,y)^4)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} (\partial_{1,\alpha}v(x,y))^2 \right)^{\frac{1}{2}} d(x,y) \\
=\ & \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{u(x,y)}{\|x-y\|_2} \cdot \frac{1}{\|x-y\|_2} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} (\partial_{1,\alpha}v(x,y))^2 \right)^{\frac{1}{2}} d(x,y)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\overset{112}{\leq} \left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{u(x,y)^2}{\|x-y\|_2^2}\, d(x,y) \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{1}{\|x-y\|_2^2} \sum_{\alpha=1}^{3} (\partial_{1,\alpha} v(x,y))^2\, d(x,y) \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{u(x,y)^2}{\|x-y\|_2^2}\, d(x,y) \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{(\partial_{1,\alpha} v(x,y))^2}{\|x-y\|_2^2}\, d(x,y) \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{\text{vgl. 3.5}}{\leq} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} 4 \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} (\partial_{1,\alpha} u(x,y))^2\, d(x,y) \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{(\partial_{1,\alpha} v(x,y))^2}{\|x-y\|_2^2}\, d(x,y) \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{24}{\leq} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} 4 \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} (\partial_{1,\alpha} u(x,y))^2\, d(x,y) \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} 2 |\partial_{1,\alpha} v|_{\mathcal{H}^1}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= 2\sqrt{2} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \|\partial_{1,\alpha} u\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} |\partial_{1,\alpha} v|_{\mathcal{H}^1}^2 \right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}
$$

und

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} f(x,y) \partial_{1,\alpha} u(x,y) \partial_{1,\alpha} v(x,y)\, d(x,y) \\
&= \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} f(x,y) \sum_{\alpha=1}^{3} (\partial_{1,\alpha} u(x,y) \cdot \partial_{1,\alpha} v(x,y))\, d(x,y) \\
&\overset{114}{\leq} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} f(x,y) \left(\sum_{\alpha=1}^{3} (\partial_{1,\alpha} u(x,y))^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} (\partial_{1,\alpha} v(x,y))^2 \right)^{\frac{1}{2}} d(x,y) \\
&= \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} (\partial_{1,\alpha} u(x,y))^2 \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{\|x-y\|_2} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} (\partial_{1,\alpha} v(x,y))^2 \right)^{\frac{1}{2}} d(x,y) \\
&\overset{112}{\leq} \left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \sum_{\alpha=1}^{3} (\partial_{1,\alpha} u(x,y))^2\, d(x,y) \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{1}{\|x-y\|_2^2} \sum_{\alpha=1}^{3} (\partial_{1,\alpha} v(x,y))^2\, d(x,y) \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} (\partial_{1,\alpha} u(x,y))^2\, d(x,y) \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{(\partial_{1,\alpha} v(x,y))^2}{\|x-y\|_2^2}\, d(x,y) \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{24}{\leq} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} (\partial_{1,\alpha} u(x,y))^2\, d(x,y) \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} 2 |\partial_{1,\alpha} v|_{\mathcal{H}^1}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \sqrt{2} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \|\partial_{1,\alpha} u\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} |\partial_{1,\alpha} v|_{\mathcal{H}^1}^2 \right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}
$$

Insgesamt ergibt sich mit der Produktregel die gesuchte Abschätzung:

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha} (f \cdot u)(x,y) \partial_{1,\alpha} v(x,y)\, d(x,y) \\
&= \sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} (\partial_{1,\alpha} f \cdot u + f \cdot \partial_{1,\alpha} u)(x,y) \partial_{1,\alpha} v(x,y)\, d(x,y) \\
&= \sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha} f(x,y) u(x,y) \partial_{1,\alpha} v(x,y)\, d(x,y)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
& + \sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} f(x,y)\partial_{1,\alpha}u(x,y)\partial_{1,\alpha}v(x,y)\,d(x,y) \\
\leq\ & (2\sqrt{2}+\sqrt{2}) \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \|\partial_{1,\alpha}u\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} |\partial_{1,\alpha}v|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
=\ & 3\sqrt{2} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \|\partial_{1,\alpha}u\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} |\partial_{1,\alpha}v|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}
$$

Die Ungleichung 28 resultiert aus dem Ersatz von $(1,\alpha)$ durch $(2,\beta)$.
(ii) Dies folgt analog zu (i) durch Ersatz von f durch $-g_c$ (die Gleichung 134 gilt dann ebenso für g_c durch Einsetzen von c für y) und Integration über x statt über (x,y). Bemerke, dass dann abweichend im jeweils vorletzten Schritt der beiden Teilabschätzungen gilt:

$$
\left(\sum_{\alpha=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{(\partial_{1,\alpha}v(x))^2}{\|x-c\|_2^2}\,dx\right)^{\frac{1}{2}} \overset{22}{\leq} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} 4|\partial_{1,\alpha}v|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}}
$$

und sich dadurch die Konstante als $2\cdot 2+2=6$ ergibt. □

Lemma 3.8: [YSERENTANT Lemma 5].

(i) Für $v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)$ und $u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)$ gilt:

$$
\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} |f(x,y)u(x,y)v(x,y)|\,d(x,y) \leq \sqrt{2}\|u\|_{\mathcal{L}^2}|v|_{\mathcal{H}^1} \tag{30}
$$

(ii) Für $u,v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)$ gilt:

$$
\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} |f(x,y)^2u(x,y)v(x,y)|\,d(x,y) \leq 2|u|_{\mathcal{H}^1}|v|_{\mathcal{H}^1} \tag{31}
$$

(iii) Für $v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ und $u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ gilt:

$$
\int_{\mathbb{R}^3} |g_c(x)u(x)v(x)|\,dx \leq 2\|u\|_{\mathcal{L}^2}|v|_{\mathcal{H}^1} \tag{32}
$$

(iv) Für $u,v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ gilt:

$$
\int_{\mathbb{R}^3} |g_c(x)^2u(x)v(x)|\,dx \leq 4|u|_{\mathcal{H}^1}|v|_{\mathcal{H}^1} \tag{33}
$$

Beweis. (i),(ii) Aus der Hölder-Ungleichung und 3.5 resultieren:

$$
\begin{aligned}
& \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} |f(x,y)u(x,y)v(x,y)|\,d(x,y) \\
=\ & \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \left|u(x,y)\cdot\frac{v(x,y)}{\|x-y\|_2}\right|\,d(x,y)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\overset{112}{\leq} \left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} u(x,y)^2\, d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{v(x,y)^2}{\|x-y\|_2^2}\, d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{24}{\leq} \left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} u(x,y)^2\, d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}} \left(2|v|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \sqrt{2}\|u\|_{\mathcal{L}^2}|v|_{\mathcal{H}^1}
\end{aligned}
$$

und

$$
\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} |f(x,y)^2 u(x,y) v(x,y)|\, d(x,y) \\
&= \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \left|\frac{u(x,y)}{\|x-y\|_2}\cdot\frac{v(x,y)}{\|x-y\|_2}\right|\, d(x,y) \\
&\overset{112}{\leq} \left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{u(x,y)^2}{\|x-y\|_2^2}\, d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{v(x,y)^2}{\|x-y\|_2^2}\, d(x,y)\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{24}{\leq} \left(2|u|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} \left(2|v|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= 2|u|_{\mathcal{H}^1}|v|_{\mathcal{H}^1}
\end{aligned}
$$

(iii),(iv) Dies folgt analog zu (i) bzw. (ii) durch den Austausch von f durch $-g_c$, Integration über x statt (x,y) und unter Verwendung von 22 statt 24. □

Bemerkung 3.9 *zu 3.8*: Dank des vorigen Lemmas, insbesondere der Punkte (ii) und (iv), lassen sich alle Integrale der Form $\int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)^2 u(x)^2\, dx$ mit $u \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ beschränken. Dies ist mit den gleichen Methoden möglich, wie sie im Beweis von 4.7 angewendet werden. So kann eingesehen werden, dass das Bild von H tatsächlich in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N},\mathbb{C})$ liegt.

Lemma 3.10: [YSERENTANT Lemma 6].
Seien $u, v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)$ mit $u|_D = 0$. Dann gilt für alle $\alpha,\beta\in\{1,2,3\}$:

$$
\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}(f\cdot u)(x,y)v(x,y)\, d(x,y) = \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} f(x,y)u(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)\, d(x,y) \tag{34}
$$

Beweis. Betrachte die Funktionen

$$
\begin{aligned}
h : \mathbb{R}_{\geq 0} &\longrightarrow \mathbb{R}, & r &\longmapsto \begin{cases} \frac{31}{24}, & r\in\left[0,\frac{1}{2}\right) \\ 6r^4 - \frac{52}{3}r^3 + 17r^2 - 7r + \frac{7}{3}, & r \in \left[\frac{1}{2},1\right] \\ \frac{1}{r}, & r\in(1,\infty) \end{cases} \\
f_n : \mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3 &\longrightarrow \mathbb{R}, & (x,y) &\longmapsto nh(n\|x-y\|_2)
\end{aligned}
$$

für alle $n\in\mathbb{N}$.
Sei $n\in\mathbb{N}$. Mit partieller Integration und der Produktregel folgt (zur Existenz der Integrale vgl.

A.18):

$$
\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} f_n(x,y)u(x,y)\partial_{2,\beta}\partial_{1,\alpha}v(x,y)\ d(x,y) \\
\overset{122}{=}\ &\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}(f_n\cdot u)(x,y)v(x,y)\ d(x,y) \\
=\ &\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha}[\partial_{2,\beta}f_n\cdot u + f_n\cdot\partial_{2,\beta}u](x,y)v(x,y)\ d(x,y) \\
=\ &\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} [\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}f_n(x,y)u(x,y) + \partial_{1,\alpha}f_n(x,y)\partial_{2,\beta}u(x,y) \\
&\qquad + \partial_{2,\beta}f_n(x,y)\partial_{1,\alpha}u(x,y) + f_n(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u(x,y)]v(x,y)\ d(x,y)
\end{aligned}
\tag{35}
$$

Setze

$$
D_n := \left\{(x,y)\in\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3 \;\middle|\; \|x-y\|_2 \le \frac{1}{n}\right\} \qquad \Omega_n := (\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)\setminus D_n
$$

Dann gilt

$$
\begin{aligned}
(x,y)\in\Omega_n \quad&\Longleftrightarrow\quad n\|x-y\|_2 \;>\; 1 \\
&\Longrightarrow\quad f_n(x,y) \;=\; nh(n\|x-y\|_2) \;=\; n\frac{1}{n\|x-y\|_2} \;=\; f(x,y)
\end{aligned}
$$

also (weil Ω_n offen ist):

$$
\begin{aligned}
f_n|_{\Omega_n} &= f|_{\Omega_n} & \partial_{1,\alpha}f_n|_{\Omega_n} &= \partial_{1,\alpha}f|_{\Omega_n} \\
\partial_{2,\beta}f_n|_{\Omega_n} &= \partial_{2,\beta}f|_{\Omega_n} & \partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}f_n|_{\Omega_n} &= \partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}f|_{\Omega_n}
\end{aligned}
$$

Da $D_1 \supseteq \ldots \supseteq D_n \supseteq D_{n+1} \supseteq \ldots$ eine absteigende Kette und die Diagonale $D = \bigcap_{n\in\mathbb{N}} D_n$ eine Lebesgue-Nullmenge sind, erhält man punktweise fast überall die folgenden Konvergenzen:

$$
\begin{aligned}
\lim_{n\to\infty} f_n &= f & \lim_{n\to\infty}\partial_{1,\alpha}f_n &= \partial_{1,\alpha}f \\
\lim_{n\to\infty}\partial_{2,\beta}f_n &= \partial_{2,\beta}f & \lim_{n\to\infty}\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}f_n &= \partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}f
\end{aligned}
$$

Der Satz von der majorisierten Konvergenz (vgl. A.18) liefert nun:

$$
\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} f(x,y)u(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)\ d(x,y) \\
=\ &\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \lim_{n\to\infty} f_n(x,y)u(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)\ d(x,y) \\
\overset{124}{=}\ &\lim_{n\to\infty}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} f_n(x,y)u(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)\ d(x,y) \\
\overset{35}{=}\ &\lim_{n\to\infty}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} [\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}f_n(x,y)u(x,y) + \partial_{1,\alpha}f_n(x,y)\partial_{2,\beta}u(x,y) \\
&\qquad + \partial_{2,\beta}f_n(x,y)\partial_{1,\alpha}u(x,y) + f_n(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u(x,y)]v(x,y)\ d(x,y) \\
\overset{124}{=}\ &\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \lim_{n\to\infty}[\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}f_n(x,y)u(x,y) + \partial_{1,\alpha}f_n(x,y)\partial_{2,\beta}u(x,y) \\
&\qquad + \partial_{2,\beta}f_n(x,y)\partial_{1,\alpha}u(x,y) + f_n(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u(x,y)]v(x,y)\ d(x,y)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} [\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} f(x,y)u(x,y) + \partial_{1,\alpha} f(x,y)\partial_{2,\beta} u(x,y) \\
&\qquad + \partial_{2,\beta} f(x,y)\partial_{1,\alpha} u(x,y) + f(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} u(x,y)]v(x,y)\ d(x,y) \\
&= \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha}[\partial_{2,\beta} f\cdot u + f\cdot\partial_{2,\beta} u](x,y)v(x,y)\ d(x,y) \\
&= \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}(f\cdot u)(x,y)v(x,y)\ d(x,y)
\end{aligned}
$$

□

Lemma 3.11: [YSERENTANT Lemma 7].

(i) Seien $u, v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)$. Dann gelten für alle $\alpha, \beta \in \{1,2,3\}$:

$$
\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha}(f\cdot u)(x,y)v(x,y)\ d(x,y) = -\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} f(x,y)u(x,y)\partial_{1,\alpha} v(x,y)\ d(x,y) \quad (36)
$$

$$
\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{2,\beta}(f\cdot u)(x,y)v(x,y)\ d(x,y) = -\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} f(x,y)u(x,y)\partial_{2,\beta} v(x,y)\ d(x,y) \quad (37)
$$

(ii) Seien $u, v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Dann gilt für alle $\alpha \in \{1,2,3\}$:

$$
\int_{\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha}(-g_c\cdot u)(x)v(x)\ dx = -\int_{\mathbb{R}^3} -g_c(x)u(x)\partial_{1,\alpha} v(x)\ dx \quad (38)
$$

Beweis. (i) Unter Verwendung der gleichen Notation und Argumentation wie im Beweis von 3.10 liefern partielle Integration und die Produktregel (zur Integrierbarkeit vgl. A.19):

$$
\begin{aligned}
&-\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} f_n(x,y)u(x,y)\partial_{1,\alpha} v(x,y)\ d(x,y) \\
&\overset{122}{=} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha}(f_n\cdot u)(x,y)v(x,y)\ d(x,y) \qquad (39) \\
&= \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} [\partial_{1,\alpha} f_n(x,y)u(x,y) + f_n(x,y)\partial_{1,\alpha} u(x,y)]v(x,y)\ d(x,y)
\end{aligned}
$$

Mit dem Satz von der majorisierten Konvergenz (vgl. A.19) erhält man also:

$$
\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} f(x,y)u(x,y)\partial_{1,\alpha} v(x,y)\ d(x,y) \\
&= \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \lim_{n\to\infty} f_n(x,y)u(x,y)\partial_{1,\alpha} v(x,y)\ d(x,y) \\
&\overset{124}{=} \lim_{n\to\infty}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} f_n(x,y)u(x,y)\partial_{1,\alpha} v(x,y)\ d(x,y) \\
&\overset{39}{=} \lim_{n\to\infty}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} [\partial_{1,\alpha} f_n(x,y)u(x,y) + f_n(x,y)\partial_{1,\alpha} u(x,y)]v(x,y)\ d(x,y) \\
&\overset{124}{=} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \lim_{n\to\infty}[\partial_{1,\alpha} f_n(x,y)u(x,y) + f_n(x,y)\partial_{1,\alpha} u(x,y)]v(x,y)\ d(x,y) \\
&= \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} [\partial_{1,\alpha} f(x,y)u(x,y) + f(x,y)\partial_{1,\alpha} u(x,y)]v(x,y)\ d(x,y) \\
&= \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha}(f\cdot u)(x,y)v(x,y)\ d(x,y)
\end{aligned}
$$

Die Gleichung 37 folgt analog.
(ii) Dies folgt ebenfalls analog unter Anwendung der majorisierten Konvergenz (vgl. A.19) auf die Funktionen

$$g_n : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}, \;\; x \longmapsto nh(n\|x-c\|_2)$$

□

4 Variationelle Formulierung des Eigenwertproblems

4.1 Übergang zum N-Elektronen-System

Unter Zuhilfenahme der Werkzeuge aus dem vorherigen Abschnitt können nun Resultate für das gesamte System mit N Elektronen und dem Potential V formuliert werden. Diese sind in hohem Maße abhängig von Antisymmetrieeigenschaften der Zustandsfunktionen. Die nach dem Pauli-Prinzip zulässigen Eigenfunktionen des Schrödinger-Operators sind antisymmetrisch unter Vertauschung zweier Elekronen gleicher Spinquantenzahl. Es ist daher zweckmäßig, eine Teilmenge der Indizes 1 bis N zu fixieren und alle Funktionen aus dem Sobolev-Raum zu untersuchen, die antisymmetrisch unter Vertauschung der zugehörigen Elektronen sind.
Im Folgenden sei stets $I \subseteq \{1, \ldots, N\}$.

Definition 4.1: *(Antisymmetrische Test- und Schwartz-Funktionen).*
Für alle $i, j \in I$ mit $i \neq j$ betrachte die Abbildungen

$$\varphi_{i,j} : \mathbb{R}^{3N} \longrightarrow \mathbb{R}^{3N}, \;\; x \longmapsto (x_{\tau(k)})_{k \in \{1,\ldots,N\}}$$

wobei $\tau \in \mathrm{Sym}_N$ die Transposition mit $\tau(i) = j$ sei, und setze

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N}) &:= \{u \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N}) \mid \forall i \in I \quad \forall j \in I \setminus \{i\} \quad u \circ \varphi_{i,j} = -u\} \\ \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N}) &:= \{u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N}) \mid \forall i \in I \quad \forall j \in I \setminus \{i\} \quad u \circ \varphi_{i,j} = -u\} \end{aligned}$$

$\mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ und $\mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$ sind also die Mengen all jener Test- bzw. Schwartz-Funktionen, die antisymmetrisch unter Vertauschung je zweier Indices aus I sind.
Es sei ferner $\mathcal{H}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$ der Abschluss von $\mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ in $\mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ bzgl. der Norm $\|\cdot\|_{\mathcal{H}^1}$.

Bemerkung 4.2 *zu 4.1*: Ist $u \in \mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N}) \cup \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$, so bleiben alle (ggfs. mehrfachen) partiellen Ableitungen von u antisymmetrisch unter Vertauschung je zweier Indices aus I, nach denen nicht abgeleitet wurde; das heißt: Sind $k \in \{1, \ldots, N\}$ und $\gamma \in \{1, 2, 3\}$ sowie $i, j \in I$ mit $i \neq j$, so gilt $\partial_{k,\gamma} u \circ \varphi_{i,j} = -\partial_{k,\gamma} u$ genau dann, wenn $k \notin \{i, j\}$.
Denn es gilt nach der mehrdimensionalen Kettenregel:

$$\partial_{k,\gamma}(u \circ \varphi_{i,j}) \;=\; \begin{cases} \partial_{j,\gamma} u \circ \varphi_{i,j}, & k = i \\ \partial_{i,\gamma} u \circ \varphi_{i,j}, & k = j \\ \partial_{k,\gamma} u \circ \varphi_{i,j}, & i \neq k \neq j \end{cases}$$

und es folgt

$$-\partial_{k,\gamma} u \;=\; \partial_{k,\gamma}(-u) \;=\; \partial_{k,\gamma}(u \circ \varphi_{i,j}) \;=\; \partial_{k,\gamma} u \circ \varphi_{i,j}$$

genau dann, wenn $i \neq k \neq j$.

Bemerkung 4.3 *zu 4.1*: Die Mengen $\mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ und $\mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$ sind so gewählt, dass die enthaltenen Funktionen Nullstellen an den Singularitäten des Elektron-Elektron-Potentials haben. Sind nämlich $i, j \in I$ mit $i \neq j$ und $u \in \mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N}) \cup \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$ sowie $x \in \mathbb{R}^{3N}$ mit $x_i = x_j$, so folgt:

$$u(x) \;=\; u(\varphi_{i,j}(x)) \;=\; (u \circ \varphi_{i,j})(x) \;=\; -u(x) \quad \Longrightarrow \quad u(x) \;=\; 0$$

Diese Eigenschaft ermöglicht die Anwendung aller im vorangegangenen Abschnitt entwickelten Hilfsmittel auf das volle System mit N Elektronen.

Aus der abstrakten Definition von $\mathcal{H}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$ ist nicht unmittelbar ersichtlich, dass es sich hierbei tatsächlich genau um den Teilraum der antisymmetrischen Funktion aus dem Sobolev-Raum handelt. Dies ist jedoch der Fall, wie das folgende Lemma zeigt:

Lemma 4.4: *(Antisymmetrischer Sobolev-Raum)*.
Es gilt:

$$\mathcal{H}_I^1(\mathbb{R}^{3N}) \;=\; \{u \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \mid \forall i \in I \quad \forall j \in I \setminus \{i\} \quad u \circ \varphi_{i,j} = -u\}$$

Beweis. Im Hinblick auf 1.11 ist nur zu prüfen, dass sich das Antisymmetrieverhalten von Testfunktionenfolgen auf deren Grenzwerte überträgt und umgekehrt zu jedem antisymmetrischen $u \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ eine gegen u konvergente Folge von Testfunktionen mit der gleichen Antisymmetrie gewählt werden kann.
Seien also zunächst $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$ sowie $u \in \mathcal{H}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$ und $(u_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ mit $\lim\limits_{n\to\infty} \|u - u_n\|_{\mathcal{H}^1} = 0$. Dann existiert $n_0 \in \mathbb{N}$ mit

$$\forall n \in \mathbb{N}_{\geq n_0} \quad \|u - u_n\|_{\mathcal{H}^1} \;<\; \frac{\epsilon}{2} \tag{40}$$

Es seien ferner $i, j \in I$ mit $i \neq j$. Dann folgt mit dem Transformationssatz (beachte A.20) für alle $n \in \mathbb{N}_{\geq n_0}$:

$$\begin{aligned}
\|u \circ \varphi_{i,j} + u\|_{\mathcal{L}^2} &= \|u \circ \varphi_{i,j} - u_n \circ \varphi_{i,j} + u_n \circ \varphi_{i,j} + u\|_{\mathcal{L}^2} \\
&= \|(u - u_n) \circ \varphi_{i,j} + u - u_n\|_{\mathcal{L}^2} \\
&\leq \|(u - u_n) \circ \varphi_{i,j}\|_{\mathcal{L}^2} + \|u - u_n\|_{\mathcal{L}^2} \\
&= \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} (u - u_n)(\varphi_{i,j}(x))^2 \, dx\right)^{\frac{1}{2}} + \|u - u_n\|_{\mathcal{L}^2} \\
&\overset{117}{=} \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} (u - u_n)(x)^2 \, dx\right)^{\frac{1}{2}} + \|u - u_n\|_{\mathcal{L}^2} \\
&= 2\|u - u_n\|_{\mathcal{L}^2} \\
&\overset{1}{\leq} 2\|u - u_n\|_{\mathcal{H}^1}
\end{aligned}$$

$$\stackrel{40}{<} \quad \epsilon$$

und da $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$ beliebig war, liefert dies $u \circ \varphi_{i,j} = -u$.
Es gelte nun umgekehrt $u \in \{u \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \mid \forall i \in I \quad \forall j \in I \setminus \{i\} \quad u \circ \varphi_{i,j} = -u\}$. Eine gegen u bzgl. der $\mathcal{H}^1$-Norm konvergente Folge $(u_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ kann wie in 3.22 aus [1] konstruiert werden:
Wähle für alle $n \in \mathbb{N}$ gemäß A.21 eine radialsymmetrische Abschneidefunktion $f_n \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ mit $f_n|_{\overline{B_n(0)}} = 1$ und setze $u_n := f_n \cdot u$. Weiter sei für alle $n \in \mathbb{N}$ ein Mollifier $J_{\frac{1}{n}} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ wie in 2.28 aus [1] gegeben. Wie aus 3.16, 2.29 und 2.15 in [1] hervorgeht, gelten:

$$(J_{\frac{1}{n}} * u_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}} \qquad \lim_{n\to\infty} \|u_n - J_{\frac{1}{n}} * u_n\|_{\mathcal{H}^1} = 0$$

Mit 1.10 folgt also:

$$\begin{aligned}
\lim_{n\to\infty} \|u - J_{\frac{1}{n}} * u_n\|_{\mathcal{H}^1} &= \lim_{n\to\infty} \|u - u_n + u_n - J_{\frac{1}{n}} * u_n\|_{\mathcal{H}^1} \\
&\leq \lim_{n\to\infty} \|u - u_n\|_{\mathcal{H}^1} + \lim_{n\to\infty} \|u_n - J_{\frac{1}{n}} * u_n\|_{\mathcal{H}^1} \\
&= \lim_{n\to\infty} \|u - u_n\|_{\mathcal{H}^1} \\
&= \lim_{n\to\infty} \left(\|u - u_n\|_{\mathcal{L}^2}^2 + |u - u_n|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \lim_{n\to\infty} \left(\|u - u_n\|_{\mathcal{L}^2}^2 + \sum_{k=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} \|\partial_{k,\gamma} u - \partial_{k,\gamma} u_n\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\left(\lim_{n\to\infty} \|u - u_n\|_{\mathcal{L}^2}\right)^2 + \sum_{k=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} \left(\lim_{n\to\infty} \|\partial_{k,\gamma} u - \partial_{k,\gamma} u_n\|_{\mathcal{L}^2}\right)^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\stackrel{5}{=} 0
\end{aligned}$$

Es bleibt zu zeigen, dass $J_{\frac{1}{n}} * u_n$ für alle $n \in \mathbb{N}$ die gewünschte Antisymmetriebedingung erfüllt. Seien also $i, j \in I$ mit $i \neq j$. Dann folgt für alle $n \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned}
u_n \circ \varphi_{i,j} &= u \circ \varphi_{i,j} \cdot f_n \circ \varphi_{i,j} \\
&\stackrel{150}{=} u \circ \varphi_{i,j} \cdot f_n \\
&= -u \cdot f_n \\
&= -u_n
\end{aligned}$$

und da das Beispiel in 2.28 aus [1] zeigt, dass $J_{\frac{1}{n}}$ ohne Einschränkung der Allgemeinheit ebenfalls radialsymmetrisch gewählt werden kann, erhält man nach Definition der Faltung mit dem Transformationssatz (beachte wieder A.20):

$$\begin{aligned}
(J_{\frac{1}{n}} * u_n)(\varphi_{i,j}(x)) &= \int_{\mathbb{R}^{3N}} J_{\frac{1}{n}}(\varphi_{i,j}(x) - y) u_n(y)\, dy \\
&\stackrel{117}{=} \int_{\mathbb{R}^{3N}} J_{\frac{1}{n}}(\varphi_{i,j}(x) - \varphi_{i,j}(y)) u_n(\varphi_{i,j}(y))\, dy \\
&= \int_{\mathbb{R}^{3N}} J_{\frac{1}{n}}(\varphi_{i,j}(x - y))(-u_n)(y)\, dy
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= -\int_{\mathbb{R}^{3N}} J_{\frac{1}{n}}(x-y)u_n(y)\,dy \\ &= -(J_{\frac{1}{n}} * u_n)(x) \end{aligned}$$

für alle $x \in \mathbb{R}^{3N}$; also $J_{\frac{1}{n}} * u_n \in \mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})$. □

Ziel dieses Abschnitts ist die Formulierung eines bei hinreichend regulärer rechter Seite b eindeutig in $\mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ lösbaren Variationsproblems der Form

$$\forall v \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \qquad a(u,v) \;=\; \hat{b}(v)$$

(wobei $a : \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \times \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \to \mathbb{R}$ eine Bilinearform und $\hat{b} : \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \to \mathbb{R}$ eine lineare Abbildung sind), das das Eigenwertproblem 13 insofern verallgemeinert, als bei geeigneter Wahl von b alle Eigenfunktionen Lösungen sind. Die Bilinearform a repräsentiert dabei eine variationelle Anwendung des Operators H.
Falls b im Sinne der vorangegangenen Definition antisymmetrisch ist, wird sich zeigen, dass die Lösung u dieses Variationsproblems bestimmte schwache partielle Ableitungen der Ordnung $|I|+1$ besitzt. Um diese zu spezifizieren und den zugehörigen Sobolev-Raum präzise definieren zu können, bedarf es zunächst einiger Definitionen, insbesondere einer stärkeren Norm als der $\mathcal{H}^1$-Norm.

Definition 4.5.
Bezeichne mit

$$I^* := \{1,2,3\}^I$$

die Menge der Multiindices, die jedem Index $k \in I$ eine Raumkoordinate $\alpha(k) \in \{1,2,3\}$ zuordnen. Weiter definiere für jeden Multiindex $\alpha \in I^*$ die Differentialoperatoren[11]

$$D_\alpha := \prod_{k\in I} \partial_{k,\alpha(k)} \qquad\qquad \Delta_I := \sum_{\alpha \in I^*} D_\alpha^2$$

wobei Produktbildung als Hintereinanderausführung zu interpretieren ist. Außerdem definiere für alle $u, v \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N})$:

$$\begin{aligned} \langle u,v\rangle_{\mathcal{L}_I^2} &:= \langle u,v\rangle_{\mathcal{L}^2} + \sum_{\alpha\in I^*} \langle D_\alpha u, D_\alpha v\rangle_{\mathcal{L}^2} \\ \langle u,v\rangle_{\mathcal{R}_I^1} &:= \langle u,v\rangle_{\mathcal{H}^1} + \sum_{\alpha\in I^*} \langle D_\alpha u, D_\alpha v\rangle_{\mathcal{H}^1} \\ |u|_{\mathcal{L}_I^2} &:= \left(\sum_{\alpha\in I^*} \|D_\alpha u\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}} \\ |u|_{\mathcal{R}_I^1} &:= \left(\sum_{\alpha\in I^*} |D_\alpha u|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} \\ \|u\|_{\mathcal{L}_I^2} &:= (\langle u,u\rangle_{\mathcal{L}_I^2})^{\frac{1}{2}} \;=\; \left(\|u\|_{\mathcal{L}^2}^2 + \sum_{\alpha\in I^*} \|D_\alpha u\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}} \;=\; \left(\|u\|_{\mathcal{L}^2}^2 + |u|_{\mathcal{L}_I^2}^2\right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

[11] Bemerke, dass die hier verwendete Definition von Multiindices aus praktischen Gründen von der in Abschnitt 1 abweicht, weswegen die Notation D_α statt D^α verwendet wird.

$$\|u\|_{\mathcal{R}_I^1} := (\langle u,u\rangle_{\mathcal{R}_I^1})^{\frac{1}{2}} = \left(\|u\|_{\mathcal{H}^1}^2 + \sum_{\alpha\in I^*}\|D_\alpha u\|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\|u\|_{\mathcal{H}^1}^2 + |u|_{\mathcal{L}_I^2}^2 + |u|_{\mathcal{R}_I^1}^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

Schließlich seien $\mathcal{R}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$ und $\mathcal{L}_I^2(\mathbb{R}^{3N})$ die Abschlüsse von $\mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ in $\mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ bzgl. der Normen $\|\cdot\|_{\mathcal{R}_I^1}$ bzw. $\|\cdot\|_{\mathcal{L}_I^2}$.

Bemerkung 4.6 *zu 4.5*: Die Elemente von $\mathcal{R}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$ sind jene Funktionen $u \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$, für die alle schwachen Ableitungen der Form $D_\alpha u$ sowie $\partial_{k,\gamma}D_\alpha u$ mit $\alpha \in I^*$, $k \in \{1,\dots,N\}$ und $\gamma \in \{1,2,3\}$ existieren. Dies folgt aus 1.9 und der Definition der $\mathcal{R}_I^1$-Norm.
Es ist $(\mathcal{R}_I^1(\mathbb{R}^{3N}), \langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathcal{R}_I^1})$ nach Definition vollständig, also ein $\mathbb{R}$-Hilbert-Raum. Ferner gelten die folgenden Ungleichungen:

$$|u|_{\mathcal{L}_I^2} = \left(|u|_{\mathcal{L}_I^2}^2\right)^{\frac{1}{2}} \le \left(\|u\|_{\mathcal{H}^1}^2 + |u|_{\mathcal{L}_I^2}^2 + |u|_{\mathcal{R}_I^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} = \|u\|_{\mathcal{R}_I^1} \tag{41}$$

$$|u|_{\mathcal{R}_I^1} = \left(|u|_{\mathcal{R}_I^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} \le \left(\|u\|_{\mathcal{H}^1}^2 + |u|_{\mathcal{L}_I^2}^2 + |u|_{\mathcal{R}_I^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} = \|u\|_{\mathcal{R}_I^1} \tag{42}$$

$$\|u\|_{\mathcal{L}_I^2} = \left(\|u\|_{\mathcal{L}^2}^2 + |u|_{\mathcal{L}_I^2}^2\right)^{\frac{1}{2}} \overset{1}{\le} \left(\|u\|_{\mathcal{H}^1}^2 + |u|_{\mathcal{L}_I^2}^2 + |u|_{\mathcal{R}_I^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} = \|u\|_{\mathcal{R}_I^1} \tag{43}$$

$$\|u\|_{\mathcal{L}^2} = \left(\|u\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}} \le \left(\|u\|_{\mathcal{L}^2}^2 + |u|_{\mathcal{L}_I^2}^2\right)^{\frac{1}{2}} = \|u\|_{\mathcal{L}_I^2} \tag{44}$$

$$\|u\|_{\mathcal{H}^1} = \left(\|u\|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} \le \left(\|u\|_{\mathcal{H}^1}^2 + |u|_{\mathcal{L}_I^2}^2 + |u|_{\mathcal{R}_I^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} = \|u\|_{\mathcal{R}_I^1} \tag{45}$$

Mittels der neu definierten Differentialoperatoren und (Halb-)Normen lassen sich auch die Resultate des vorherigen Abschnitts auf das N-Elektronen-System verallgemeinern und kompakt in den folgenden drei Sätzen zusammenfassen. Die ersten beiden stellen Stetigkeitsaussagen dar, während die dritte die partielle Integration über die Singularitäten der Potentiale hinweg ermöglicht. Dabei werden zunächst das Elektron-Elektron- und das Nucleus-Elektron-Potential gesondert betrachtet. Im Interesse der Übersichtlichkeit werden die Beweise dieser Sätze in einen eigenen Unterabschnitt ausgegliedert.

Satz 4.7: [YSERENTANT Satz 3, (3.26)].
Seien $u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N})$ und $v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$. Dann gelten:

(i)
$$\int_{\mathbb{R}^{3N}} V_{ee}(x)u(x)v(x)\,dx \le N^{\frac{3}{2}}\|u\|_{\mathcal{L}^2}|v|_{\mathcal{H}^1} \tag{46}$$

(ii)
$$\int_{\mathbb{R}^{3N}} V_{ne}(x)u(x)v(x)\,dx \le 2ZN^{\frac{1}{2}}\|u\|_{\mathcal{L}^2}|v|_{\mathcal{H}^1} \tag{47}$$

Satz 4.8: [YSERENTANT Satz 1, (3.25)].
Seien $u \in \mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ und $v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$. Dann gelten:

(i)
$$\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(V_{ee}u)(x)D_\alpha v(x)\,dx \le (5+4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}|u|_{\mathcal{L}_I^2}|v|_{\mathcal{R}_I^1} \tag{48}$$

(ii)

$$\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha (V_{ne} u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \;\leq\; 6ZN^{\frac{1}{2}} |u|_{\mathcal{L}^2_I} |v|_{\mathcal{R}^1_I} \tag{49}$$

Satz 4.9: [YSERENTANT Satz 2].
Seien $u \in \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})$ und $v \in \mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^{3N})$. Dann gelten:

(i)

$$\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha (V_{ee} u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \;=\; (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} V_{ee}(x) u(x) \Delta_I v(x)\, dx \tag{50}$$

(ii)

$$\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha (V_{ne} u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \;=\; (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} V_{ne}(x) u(x) \Delta_I v(x)\, dx \tag{51}$$

Die folgenden Ausführungen beschränken sich formal auf den Fall ungeladener Systeme, also den Fall $Z = N$. Dies dient lediglich der Vereinfachung der auftretenden Konstanten und stellt qualitativ keine Einschränkung der Allgemeinheit dar. Mithilfe der vorangegangenen Sätze lassen sich leicht analoge Schlüsse für den allgemeinen Fall herleiten.
Unter obiger Annahme werden nun die vorhandenen Formeln zu Aussagen über das gesamte Potential V zusammengefasst.

Korollar 4.10.
Seien $u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N})$ und $v \in \mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^{3N})$. Dann folgt:

$$\left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x) u(x) v(x)\, dx \right| \;\leq\; 3N^{\frac{3}{2}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} |v|_{\mathcal{H}^1} \tag{52}$$

Beweis. Nach 4.7 gilt:

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x) u(x) v(x)\, dx &= \int_{\mathbb{R}^{3N}} (V_{ee} + V_{ne})(x) u(x) v(x)\, dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^{3N}} V_{ee}(x) u(x) v(x)\, dx + \int_{\mathbb{R}^{3N}} V_{ne}(x) u(x) v(x)\, dx \\
&\overset{46,47}{\leq} N^{\frac{3}{2}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} |v|_{\mathcal{H}^1} + 2ZN^{\frac{1}{2}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} |v|_{\mathcal{H}^1} \\
&= 3N^{\frac{3}{2}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} |v|_{\mathcal{H}^1}
\end{aligned}$$

Ebenso gilt bei Anwendung auf $-v \in \mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^{3N})$:

$$\begin{aligned}
-\int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x) u(x) v(x)\, dx &= \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x) u(x) (-v)(x)\, dx \leq 3N^{\frac{3}{2}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} |-v|_{\mathcal{H}^1} \\
&= 3N^{\frac{3}{2}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} |v|_{\mathcal{H}^1}
\end{aligned}$$

Es folgt die Behauptung. □

Korollar 4.11: [YSERENTANT (3.28)].
Seien $u \in \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})$ und $v \in \mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^{3N})$. Dann folgt:

$$\left| \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha (Vu)(x) D_\alpha v(x)\, dx \right| \;\leq\; (11 + 4\sqrt{6}) N^{\frac{3}{2}} |u|_{\mathcal{L}^2_I} |v|_{\mathcal{R}^1_I} \tag{53}$$

Beweis. Nach 4.8 gilt:

$$
\begin{aligned}
& \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x) D_\alpha v(x)\, dx \\
= & \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha((V_{ee} + V_{ne})u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \\
= & \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(V_{ee}u)(x) D_\alpha v(x)\, dx + \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(V_{ne}u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \\
\overset{48,49}{\leq} & (5 + 4\sqrt{6}) N^{\frac{3}{2}} |u|_{\mathcal{L}_I^2} |v|_{\mathcal{R}_I^1} + 6 Z N^{\frac{1}{2}} |u|_{\mathcal{L}_I^2} |v|_{\mathcal{R}_I^1} \\
= & (11 + 4\sqrt{6}) N^{\frac{3}{2}} |u|_{\mathcal{L}_I^2} |v|_{\mathcal{R}_I^1}
\end{aligned}
$$

Ebenso gilt bei Anwendung auf $-v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ auch

$$
\begin{aligned}
- \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x) D_\alpha v(x)\, dx &= \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x) D_\alpha(-v)(x)\, dx \\
&\leq (11 + 4\sqrt{6}) N^{\frac{3}{2}} |u|_{\mathcal{L}_I^2} |-v|_{\mathcal{R}_I^1} \\
&= (11 + 4\sqrt{6}) N^{\frac{3}{2}} |u|_{\mathcal{L}_I^2} |v|_{\mathcal{R}_I^1}
\end{aligned}
$$

Es folgt die Behauptung. □

Korollar 4.12: [YSERENTANT (3.31)].
Seien $u \in \mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ und $v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$. Dann folgt:

$$
\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x) D_\alpha v(x)\, dx = (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x) u(x) \Delta_I v(x)\, dx \tag{54}
$$

Beweis. Nach 4.9 gilt:

$$
\begin{aligned}
& \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x) D_\alpha v(x)\, dx \\
= & \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha((V_{ee} + V_{ne})u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \\
= & \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(V_{ee}u)(x) D_\alpha v(x)\, dx + \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(V_{ne}u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \\
\overset{50,51}{=} & (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} V_{ee}(x) u(x) \Delta_I v(x)\, dx + (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} V_{ne}(x) u(x) \Delta_I v(x)\, dx \\
= & (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x) u(x) \Delta_I v(x)\, dx
\end{aligned}
$$

□

4.2 Beweise der Sätze 4.7,4.8 und 4.9

Es werden zunächst einige Hilfsmittel eingeführt, die es erlauben, die Resultate des Abschnitts 3 in den hier vorliegenden Kontext einzubetten.

Seien $i, j \in I$ mit $i \neq j$ und $c \in \mathbb{R}^3$. Setze:

$$\begin{aligned}
f_{i,j} : \mathbb{R}^{3N} &\longrightarrow \mathbb{R}, & x &\longmapsto \frac{1}{\|x_i - x_j\|_2} \\
g_{c,i} : \mathbb{R}^{3N} &\longrightarrow \mathbb{R}, & x &\longmapsto \frac{1}{\|x_i - c\|_2} \\
\pi_{i,j} : \mathbb{R}^{3N} &\longrightarrow \mathbb{R}^{3(N-2)}, & x &\longmapsto (x_1, \ldots, x_{i-1}, x_{i+1}, \ldots, x_{j-1}, x_{j+1}, \ldots, x_N) \\
\pi_i : \mathbb{R}^{3N} &\longrightarrow \mathbb{R}^{3(N-1)}, & x &\longmapsto (x_1, \ldots, x_{i-1}, x_{i+1}, \ldots, x_N)
\end{aligned}$$

sowie für gegebene $x_k \in \mathbb{R}^3$ für alle $k \in \{1, \ldots, N\} \setminus \{i, j\}$:

$$\begin{aligned}
\iota_{i,j} : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 &\longrightarrow \mathbb{R}^{3N}, & (x_i, x_j) &\longmapsto (x_1, \ldots, x_N) = x \\
\iota_{i,j}^* : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N}) &\longrightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3), & w &\longmapsto w \circ \iota_{i,j}
\end{aligned}$$

und für gegebene $x_k \in \mathbb{R}^3$ für alle $k \in \{1, \ldots, N\} \setminus \{i\}$:

$$\begin{aligned}
\iota_i : \mathbb{R}^3 &\longrightarrow \mathbb{R}^{3N}, & x_i &\longmapsto (x_1, \ldots, x_N) = x \\
\iota_i^* : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N}) &\longrightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3), & w &\longmapsto w \circ \iota_i
\end{aligned}$$

Bemerke

$$\begin{aligned}
\iota_{i,j}^*(f_{i,j}) &= f & \qquad \iota_{i,j}^*(\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})) &\subseteq \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3) \\
\iota_i^*(g_{c,i}) &= g_c & \qquad \iota_i^*(\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})) &\subseteq \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)
\end{aligned}$$

wobei f und g_c wie im Abschnitt 3 definiert seien.
Schreibe außerdem $J_i := \{1, \ldots, N\} \setminus \{i\}$.

Beweis von 4.7. (i) Mit der Hölder-Ungleichung und dem Satz von Fubini-Tonelli liefert 3.8:

$$\begin{aligned}
& \int_{\mathbb{R}^{3N}} V_{ee}(x) u(x) v(x) \, dx \\
= \; & \int_{\mathbb{R}^{3N}} \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \in J_i} f_{i,j} \right) (x) u(x) v(x) \, dx \\
= \; & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \in J_i} \int_{\mathbb{R}^{3N}} f_{i,j}(x) u(x) v(x) \, dx \\
\stackrel{116}{=} \; & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \in J_i} \int_{R^{3(N-2)}} \left(\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} f_{i,j}(x) u(x) v(x) \, dx_i \, dx_j \right) d\pi_{i,j}(x) \\
= \; & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \in J_i} \int_{R^{3(N-2)}} \left(\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \iota_{i,j}^*(f_{i,j})(x_i, x_j) \cdot \iota_{i,j}^*(u)(x_i, x_j) \cdot \iota_{i,j}^*(v)(x_i, x_j) \, dx_i \, dx_j \right) d\pi_{i,j}(x) \\
= \; & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \in J_i} \int_{R^{3(N-2)}} \left(\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} f(x_i, x_j) \cdot \iota_{i,j}^*(u)(x_i, x_j) \cdot \iota_{i,j}^*(v)(x_i, x_j) \, dx_i \, dx_j \right) d\pi_{i,j}(x) \\
\stackrel{30}{\leq} \; & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \in J_i} \int_{R^{3(N-2)}} \left(\sqrt{2} \|\iota_{i,j}^*(u)\|_{\mathcal{L}^2} |\iota_{i,j}^*(v)|_{\mathcal{H}^1} \right) d\pi_{i,j}(x)
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \in J_i} \int_{R^{3(N-2)}} \left(\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \iota_{i,j}^*(u)(x_i, x_j)^2 \, dx_i \, dx_j \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\qquad \cdot \left(\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \|\nabla \iota_{i,j}^*(v)(x_i, x_j)\|_2^2 \, dx_i \, dx_j \right)^{\frac{1}{2}} \, d\pi_{i,j}(x) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \in J_i} \int_{R^{3(N-2)}} \left(\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} u(x)^2 \, dx_i \, dx_j \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\qquad \cdot \left(\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \|\nabla_i v(x)\|_2^2 + \|\nabla_j v(x)\|_2^2 \, dx_i \, dx_j \right)^{\frac{1}{2}} \, d\pi_{i,j}(x) \\
&\overset{112}{\leq} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \in J_i} \left(\int_{R^{3(N-2)}} \left(\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} u(x)^2 \, dx_i \, dx_j \right) \, d\pi_{i,j}(x) \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\qquad \cdot \left(\int_{R^{3(N-2)}} \left(\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \|\nabla_i v(x)\|_2^2 + \|\nabla_j v(x)\|_2^2 \, dx_i \, dx_j \right) \, d\pi_{i,j}(x) \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{116}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \in J_i} \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla_i v(x)\|_2^2 \, dx + \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla_j v(x)\|_2^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq \frac{1}{\sqrt{2}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla_i v(x)\|_2^2 \, dx + \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla_j v(x)\|_2^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{151}{\leq} \frac{1}{\sqrt{2}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} \sqrt{2} N^{\frac{3}{2}} \left(\sum_{i=1}^{N} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla_i v(x)\|_2^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= N^{\frac{3}{2}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla v(x)\|_2^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= N^{\frac{3}{2}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} |v|_{\mathcal{H}^1}
\end{aligned}
$$

(ii) Mit der Hölder- und der Cauchy-Schwarz-Ungleichung und dem Satz von Fubini-Tonelli liefert 3.8:

$$
\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^{3N}} V_{ne}(x) u(x) v(x) \, dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^{3N}} \left(\sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} -Z_k g_{c_k,i} \right)(x) u(x) v(x) \, dx \\
&= \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} Z_k \int_{\mathbb{R}^{3N}} -g_{c_k,i}(x) u(x) v(x) \, dx \\
&\overset{116}{=} \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} Z_k \int_{R^{3(N-1)}} \left(\int_{\mathbb{R}^3} -g_{c_k,i}(x) u(x) v(x) \, dx_i \right) \, d\pi_i(x) \\
&= \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} Z_k \int_{R^{3(N-1)}} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \iota_i^*(-g_{c_k,i})(x_i) \cdot \iota_i^*(u)(x_i) \cdot \iota_i^*(v)(x_i) \, dx_i \right) \, d\pi_i(x) \\
&= \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} Z_k \int_{R^{3(N-1)}} \left(\int_{\mathbb{R}^3} -g_{c_k}(x_i) \cdot \iota_i^*(u)(x_i) \cdot \iota_i^*(v)(x_i) \, dx_i \right) \, d\pi_i(x) \\
&\overset{32}{\leq} \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} Z_k \int_{R^{3(N-1)}} (2\|\iota_i^*(u)\|_{\mathcal{L}^2} |\iota_i^*(v)|_{\mathcal{H}^1}) \, d\pi_i(x)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= 2\sum_{i=1}^{N} Z \int_{R^{3(N-1)}} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \iota_i^*(u)(x_i)^2 \, dx_i\right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla \iota_i^*(v)(x_i)\|_2^2 \, dx_i\right)^{\frac{1}{2}} \, d\pi_i(x) \\
&= 2Z \sum_{i=1}^{N} \int_{R^{3(N-1)}} \left(\int_{\mathbb{R}^3} u(x)^2 \, dx_i\right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla_i v(x)\|_2^2 \, dx_i\right)^{\frac{1}{2}} \, d\pi_i(x) \\
&\overset{112}{\leq} 2Z \sum_{i=1}^{N} \left(\int_{R^{3(N-1)}} \left(\int_{\mathbb{R}^3} u(x)^2 \, dx_i\right) \, d\pi_i(x)\right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{R^{3(N-1)}} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla_i v(x)\|_2^2 \, dx_i\right) \, d\pi_i(x)\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{116}{=} 2Z\|u\|_{\mathcal{L}^2} \sum_{i=1}^{N} \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla_i v(x)\|_2^2 \, dx\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{115}{\leq} 2Z\|u\|_{\mathcal{L}^2} N^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{i=1}^{N} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla_i v(x)\|_2^2 \, dx\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= 2ZN^{\frac{1}{2}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla v(x)\|_2^2 \, dx\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= 2ZN^{\frac{1}{2}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} |v|_{\mathcal{H}^1}
\end{aligned}
$$

□

Beweis von 4.8. (i) Es werden die einzelnen Potentialanteile zunächst separat betrachtet und dann mit dem Satz von Fubini-Tonelli zusammengefügt.
Seien $i, j \in \{1, \dots, N\}$ mit $i \neq j$. Betrachte zunächst den Fall $i, j \in I$ und setze $J := I \setminus \{i, j\}$ sowie $D_\gamma := \prod_{l \in J} \partial_{l,\gamma(l)}$ für alle $\gamma \in J^*$.
Weiter seien vorerst $x_k \in \mathbb{R}^3$ für alle $k \in \{1, \dots, N\} \setminus \{i, j\}$ fest gewählt. Setze $\tilde{u}_\gamma := \iota_{i,j}^*(D_\gamma u)$ und $\tilde{v}_\gamma := \iota_{i,j}^*(D_\gamma v)$ für alle $\gamma \in J^*$. Nach 4.2 und 4.3 gilt $\tilde{u}_\gamma|_D = 0$ für alle $\gamma \in J^*$ und somit liefert 3.6:

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} D_\alpha(f_{i,j} u)(x) D_\alpha v(x) \, dx_i \, dx_j \\
&= \sum_{\gamma \in J^*} \sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \partial_{i,\alpha} \partial_{j,\beta} D_\gamma (f_{i,j} \cdot u)(x) \cdot \partial_{i,\alpha} \partial_{j,\beta} D_\gamma v(x) \, dx_i \, dx_j \\
&= \sum_{\gamma \in J^*} \sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \partial_{i,\alpha} \partial_{j,\beta} \left(f_{i,j} \cdot D_\gamma u\right)(x) \cdot \partial_{i,\alpha} \partial_{j,\beta} D_\gamma v(x) \, dx_i \, dx_j \\
&= \sum_{\gamma \in J^*} \sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha} \partial_{2,\beta} \left(\iota_{i,j}^*(f_{i,j}) \cdot \iota_{i,j}^*\left(D_\gamma u\right)\right)(x_i, x_j) \cdot \partial_{1,\alpha} \partial_{2,\beta} \iota_{i,j}^*\left(D_\gamma v\right)(x_i, x_j) \, dx_i \, dx_j \\
&= \sum_{\gamma \in J^*} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \partial_{1,\alpha} \partial_{2,\beta} (f \cdot \tilde{u}_\gamma)(x_i, x_j) \cdot \partial_{1,\alpha} \partial_{2,\beta} \tilde{v}_\gamma(x_i, x_j) \, dx_i \, dx_j\right) \\
&\overset{26}{\leq} \sum_{\gamma \in J^*} (5 + 4\sqrt{6})\sqrt{2} \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} \|\partial_{1,\alpha} \partial_{2,\beta} \tilde{u}_\gamma\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(\sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} |\partial_{1,\alpha} \partial_{2,\beta} \tilde{v}_\gamma|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{114}{\leq} (5 + 4\sqrt{6})\sqrt{2} \left(\sum_{\gamma \in J^*} \sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} \|\partial_{1,\alpha} \partial_{2,\beta} \tilde{u}_\gamma\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(\sum_{\gamma \in J^*} \sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} |\partial_{1,\alpha} \partial_{2,\beta} \tilde{v}_\gamma|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= (5+4\sqrt{6})\sqrt{2}\left(\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\partial_{1,\alpha(i)}\partial_{2,\alpha(j)}\iota_{i,j}^*\left(\left(\prod_{l\in J}\partial_{l,\alpha(l)}\right)u\right)(x_i,x_j)^2\,dx_i\,dx_j\right)^{\frac{1}{2}}\\
&\quad\cdot\left(\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\left\|\nabla\partial_{1,\alpha(i)}\partial_{2,\alpha(j)}\iota_{i,j}^*\left(\left(\prod_{l\in J}\partial_{l,\alpha(l)}\right)v\right)(x_i,x_j)\right\|_2^2\,dx_i\,dx_j\right)^{\frac{1}{2}}\\
&= (5+4\sqrt{6})\sqrt{2}\left(\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}D_\alpha u(x)^2\,dx_i\,dx_j\right)^{\frac{1}{2}}\\
&\quad\cdot\left(\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\|\nabla_i D_\alpha v(x)\|_2^2+\|\nabla_j D_\alpha v(x)\|_2^2\,dx_i\,dx_j\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}
$$

Nun seien $i \in I$ und $j \notin I$ (oder umgekehrt). Dann folgt analog mit 3.7:

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}D_\alpha(f_{i,j}u)(x)D_\alpha v(x)\,dx_i\,dx_j\\
&\overset{27,28}{\leq} 3\sqrt{2}\left(\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}D_\alpha u(x)^2\,dx_i\,dx_j\right)^{\frac{1}{2}}\\
&\quad\cdot\left(\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\|\nabla_i D_\alpha v(x)\|_2^2+\|\nabla_j D_\alpha v(x)\|_2^2\,dx_i\,dx_j\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}
$$

Im verbleibenden Fall $i, j \notin I$ erhält man mit 3.8:

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}D_\alpha(f_{i,j}u)(x)D_\alpha v(x)\,dx_i\,dx_j\\
&= \sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}(f_{i,j}\cdot D_\alpha u)(x)D_\alpha v(x)\,dx_i\,dx_j\\
&= \sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}(\iota_{i,j}^*(f_{i,j})\cdot\iota_{i,j}^*(D_\alpha u))(x_i,x_j)\cdot\iota_{i,j}^*(D_\alpha v)(x_i,x_j)\,dx_i\,dx_j\\
&= \sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}f(x_i,x_j)\cdot\iota_{i,j}^*(D_\alpha u)(x_i,x_j)\cdot\iota_{i,j}^*(D_\alpha v)(x_i,x_j)\,dx_i\,dx_j\\
&\overset{30}{\leq} \sqrt{2}\sum_{\alpha\in I^*}\|\iota_{i,j}^*(D_\alpha u)\|_{\mathcal{L}^2}\cdot|\iota_{i,j}^*(D_\alpha v)|_{\mathcal{H}^1}\\
&\overset{114}{\leq} \sqrt{2}\left(\sum_{\alpha\in I^*}\|\iota_{i,j}^*(D_\alpha u)\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}}\cdot\left(\sum_{\alpha\in I^*}|\iota_{i,j}^*(D_\alpha v)|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}}\\
&= \sqrt{2}\left(\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\iota_{i,j}^*(D_\alpha u)(x_i,x_j)^2\,dx_i\,dx_j\right)^{\frac{1}{2}}\cdot\left(\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\|\nabla\iota_{i,j}^*(D_\alpha v)(x_i,x_j)\|_2^2\,dx_i\,dx_j\right)^{\frac{1}{2}}\\
&= \sqrt{2}\left(\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}D_\alpha u(x)^2\,dx_i\,dx_j\right)^{\frac{1}{2}}\\
&\quad\cdot\left(\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\|\nabla_i D_\alpha v(x)\|_2^2+\|\nabla_j D_\alpha v(x)\|_2^2\,dx_i\,dx_j\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}
$$

Wegen $\sqrt{2} < 3\sqrt{2} < (5+4\sqrt{6})\sqrt{2}$ gilt also in allen drei Fällen:

$$\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} D_\alpha (f_{i,j} u)(x) D_\alpha v(x)\, dx_i\, dx_j \le (5+4\sqrt{6})\sqrt{2} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} (D_\alpha u(x))^2\, dx_i\, dx_j \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \|\nabla_i D_\alpha v(x)\|_2^2 + \|\nabla_j D_\alpha v(x)\|_2^2\, dx_i\, dx_j \right)^{\frac{1}{2}} \tag{55}$$

Mit dem Satz von Fubini-Tonelli und der Hölder-Ungleichung ergibt sich nun:

$$\begin{aligned}
&\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha (V_{ee} u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \\
=\; & \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha \left(\left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \in J_i} f_{i,j} \right) \cdot u \right)(x) D_\alpha v(x)\, dx \\
=\; & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \in J_i} \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha (f_{i,j} \cdot u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \\
\overset{116}{=}\; & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \in J_i} \int_{\mathbb{R}^{3(N-2)}} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} D_\alpha (f_{i,j} \cdot u)(x) D_\alpha v(x)\, dx_i\, dx_j \right) d\pi_{i,j}(x) \\
\overset{55}{\le}\; & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \in J_i} \int_{\mathbb{R}^{3(N-2)}} \Bigg((5+4\sqrt{6})\sqrt{2} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} (D_\alpha u(x))^2\, dx_i\, dx_j \right)^{\frac{1}{2}} \\
& \qquad \cdot \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \|\nabla_i D_\alpha v(x)\|_2^2 + \|\nabla_j D_\alpha v(x)\|_2^2\, dx_i\, dx_j \right)^{\frac{1}{2}} \Bigg)\, d\pi_{i,j}(x) \\
\overset{112}{\le}\; & \frac{5+4\sqrt{6}}{\sqrt{2}} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \in J_i} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3(N-2)}} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} D_\alpha u(x)^2\, dx_i\, dx_j\, d\pi_{i,j}(x) \right)^{\frac{1}{2}} \\
& \qquad \cdot \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3(N-2)}} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \|\nabla_i D_\alpha v(x)\|_2^2 + \|\nabla_j D_\alpha v(x)\|_2^2\, dx_i\, dx_j\, d\pi_{i,j}(x) \right)^{\frac{1}{2}} \\
\overset{116}{=}\; & \frac{5+4\sqrt{6}}{\sqrt{2}} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \in J_i} |u|_{\mathcal{L}_I^2} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla_i D_\alpha v(x)\|_2^2 + \|\nabla_j D_\alpha v(x)\|_2^2\, dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
\le\; & \frac{5+4\sqrt{6}}{\sqrt{2}} |u|_{\mathcal{L}_I^2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla_i D_\alpha v(x)\|_2^2 + \|\nabla_j D_\alpha v(x)\|_2^2\, dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
\overset{151}{\le}\; & \frac{5+4\sqrt{6}}{\sqrt{2}} |u|_{\mathcal{L}_I^2} \sqrt{2} N^{\frac{3}{2}} \left(\sum_{i=1}^{N} \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla_i D_\alpha v(x)\|_2^2\, dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
=\; & (5+4\sqrt{6}) N^{\frac{3}{2}} |u|_{\mathcal{L}_I^2} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla D_\alpha v(x)\|_2^2\, dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
=\; & (5+4\sqrt{6}) N^{\frac{3}{2}} |u|_{\mathcal{L}_I^2} |v|_{\mathcal{R}_I^1}
\end{aligned}$$

(ii) Wieder werden die einzelnen Anteile des Nucleus-Elektron-Potentials zunächst separat be-

trachtet.
Seien zunächst $i \in \{1, \dots, N\}$ und $c \in \mathbb{R}^3$ sowie $x_k \in \mathbb{R}^3$ für alle $k \in \{1, \dots, N\} \setminus \{i\}$ fest gewählt.
Gilt $i \in I$, so erhält man wie in (i) nach 3.7:

$$\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3} D_\alpha(-g_{c,i}u)(x) D_\alpha v(x)\, dx_i \overset{29}{\leq} 6 \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3} D_\alpha u(x)^2\, dx_i \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla_i D_\alpha v(x)\|_2^2\, dx_i \right)^{\frac{1}{2}}$$

Für $i \notin I$ folgt ebenfalls analog zu (i) nach 3.8:

$$\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3} D_\alpha(-g_{c,i}u)(x) D_\alpha v(x)\, dx_i \overset{32}{\leq} 2 \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3} D_\alpha u(x)^2\, dx_i \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla_i D_\alpha v(x)\|_2^2\, dx_i \right)^{\frac{1}{2}}$$

Wegen $2 < 6$ gilt also in beiden Fällen:

$$\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3} D_\alpha(-g_{c,i}u)(x) D_\alpha v(x)\, dx_i \leq 6 \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3} D_\alpha u(x)^2\, dx_i \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla_i D_\alpha v(x)\|_2^2\, dx_i \right)^{\frac{1}{2}} \tag{56}$$

Der Satz von Fubini-Tonelli, die Cauchy-Schwarz- und die Hölder-Ungleichung liefern folglich:

$$\begin{aligned}
&\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(V_{ne}u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \\
=\ & \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha \left(\left(\sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K -Z_k g_{c_k,i} \right) \cdot u \right)(x) D_\alpha v(x)\, dx \\
=\ & \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K Z_k \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(-g_{c_k,i} \cdot u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \\
\overset{116}{=}\ & \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K Z_k \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3} D_\alpha(-g_{c_k,i} \cdot u)(x) D_\alpha v(x)\, dx_i \right) d\tilde{\pi}_i(x) \\
\overset{56}{\leq}\ & \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K Z_k \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} \left(6 \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3} D_\alpha u(x)^2\, dx_i \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla_i D_\alpha v(x)\|_2^2\, dx_i \right)^{\frac{1}{2}} \right) d\tilde{\pi}_i(x) \\
\overset{112}{\leq}\ & 6 \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K Z_k \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} \int_{\mathbb{R}^3} (D_\alpha u(x))^2\, dx_i\, d\tilde{\pi}_i(x) \right)^{\frac{1}{2}} \\
& \qquad \cdot \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} \int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla_i D_\alpha v(x)\|_2^2\, dx_i\, d\tilde{\pi}_i(x) \right)^{\frac{1}{2}} \\
\overset{116}{=}\ & 6Z|u|_{\mathcal{L}_I^2} \sum_{i=1}^N \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla_i D_\alpha v(x)\|_2^2\, dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
\overset{115}{\leq}\ & 6Z|u|_{\mathcal{L}_I^2} N^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{i=1}^N \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla_i D_\alpha v(x)\|_2^2\, dx \right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 6ZN^{\frac{1}{2}}|u|_{\mathcal{L}^2_I}\left(\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^{3N}}\|\nabla D_\alpha v(x)\|_2^2\,dx\right)^{\frac{1}{2}}\\
&= 6ZN^{\frac{1}{2}}|u|_{\mathcal{L}^2_I}|v|_{\mathcal{R}^1_I}
\end{aligned}$$

□

Beweis von 4.9. (i) Es wird die gleiche Beweisstrategie wie zuvor verwendet. Seien also zunächst $i,j\in I$ mit $i\neq j$ und $J:=I\setminus\{i,j\}$ sowie $\alpha\in I^*$ und $D_{\alpha,J}:=\prod_{l\in J}\partial_{l,\alpha(l)}$.
Weiter seien $x_k\in\mathbb{R}^3$ für alle $k\in\{1,\dots,N\}\setminus\{i,j\}$ fest gewählt. Setze $\tilde{u}_\alpha:=\iota^*_{i,j}(D_{\alpha,J}u)$ sowie $\tilde{v}_\alpha:=\iota^*_{i,j}(D_\alpha v)$. Dann gilt $\tilde{u}_\alpha|_D=0$ nach 4.2 und 4.3 und mit 3.10 folgt:

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} D_\alpha(f_{i,j}u)(x)D_\alpha v(x)\,dx_i\,dx_j\\
=&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\partial_{i,\alpha(i)}\partial_{j,\alpha(j)}D_{\alpha,J}(f_{i,j}\cdot u)(x)\cdot D_\alpha v(x)\,dx_i\,dx_j\\
=&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\partial_{i,\alpha(i)}\partial_{j,\alpha(j)}\left(f_{i,j}\cdot D_{\alpha,J}u\right)(x)\cdot D_\alpha v(x)\,dx_i\,dx_j\\
=&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\partial_{1,\alpha(i)}\partial_{2,\alpha(j)}\left(\iota^*_{i,j}(f_{i,j})\cdot\iota^*_{i,j}\left(D_{\alpha,J}u\right)\right)(x_i,x_j)\cdot\iota^*_{i,j}(D_\alpha v)(x_i,x_j)\,dx_i\,dx_j\\
=&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\partial_{1,\alpha(i)}\partial_{2,\alpha(j)}(f\cdot\tilde{u}_\alpha)(x_i,x_j)\cdot\tilde{v}_\alpha(x_i,x_j)\,dx_i\,dx_j\\
\overset{34}{=}&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}f(x_i,x_j)\cdot\tilde{u}_\alpha(x_i,x_j)\cdot\partial_{1,\alpha(i)}\partial_{2,\alpha(j)}\tilde{v}_\alpha(x_i,x_j)\,dx_i\,dx_j\\
=&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\iota^*_{i,j}(f_{i,j})(x_i,x_j)\cdot\iota^*_{i,j}\left(\prod_{l\in J}\partial_{l,\alpha(l)}u\right)(x_i,x_j)\cdot\partial_{1,\alpha(i)}\partial_{2,\alpha(j)}\iota^*_{i,j}(D_\alpha v)(x_i,x_j)\,dx_i\,dx_j\\
=&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}f_{i,j}(x)\cdot D_{\alpha,J}u(x)\cdot\partial_{i,\alpha(i)}\partial_{j,\alpha(j)}D_\alpha v(x)\,dx_i\,dx_j\\
=&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}D_{\alpha,J}(f_{i,j}\cdot u)(x)\cdot\partial_{i,\alpha(i)}\partial_{j,\alpha(j)}D_\alpha v(x)\,dx_i\,dx_j
\end{aligned}$$

Daraus folgt mit $|J|$-facher partieller Integration und dem Satz von Fubini-Tonelli:

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^{3N}}D_\alpha(f_{i,j}u)(x)D_\alpha v(x)\,dx\\
\overset{116}{=}&\int_{\mathbb{R}^{3(N-2)}}\left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}D_\alpha(f_{i,j}u)(x)D_\alpha v(x)\,dx_i\,dx_j\right)\,d\pi_{i,j}(x)\\
=&\int_{\mathbb{R}^{3(N-2)}}\left(\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}D_{\alpha,J}(f_{i,j}\cdot u)(x)\cdot\partial_{i,\alpha(i)}\partial_{j,\alpha(j)}D_\alpha v(x)\,dx_i\,dx_j\right)\,d\pi_{i,j}(x)\\
\overset{116}{=}&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\left(\int_{\mathbb{R}^{3(N-2)}}f_{i,j}(x)\cdot D_{\alpha,J}u(x)\cdot\partial_{i,\alpha(i)}\partial_{j,\alpha(j)}D_\alpha v(x)\,d\pi_{i,j}(x)\right)\,dx_i\,dx_j\\
\overset{122}{=}&\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\left((-1)^{|J|}\int_{\mathbb{R}^{3(N-2)}}f_{i,j}(x)u(x)\cdot D_{\alpha,J}\partial_{i,\alpha(i)}\partial_{j,\alpha(j)}D_\alpha v(x)\,d\pi_{i,j}(x)\right)\,dx_i\,dx_j\\
=&(-1)^{|I|-2}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\left(\int_{\mathbb{R}^{3(N-2)}}f_{i,j}(x)u(x)D^2_\alpha v(x)\,d\pi_{i,j}(x)\right)\,dx_i\,dx_j\\
\overset{116}{=}&(-1)^{|I|}\int_{\mathbb{R}^{3N}}f_{i,j}(x)u(x)D^2_\alpha v(x)\,dx
\end{aligned}$$

Der Fall $i\in I$ und $j\notin I$ (oder umgekehrt) liefert mit 3.11 und $J:=I\setminus\{i\}$ (bzw. $J:=I\setminus\{j\}$) bei

analoger Rechnung das gleiche Ergebnis.
Für $i, j \notin I$ folgt die gleiche Aussage durch einfache $|I|$-fache partielle Integration.
Also gilt in allen drei Fällen:

$$\int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(f_{i,j}u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \;=\; (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} f_{i,j}(x) u(x) D_\alpha^2 v(x)\, dx \tag{57}$$

Insgesamt erhält man folglich:

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(V_{ee}u)(x) D_\alpha v(x)\, dx &= \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha \left(\left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \in J_i} f_{i,j} \right) \cdot u \right) (x) D_\alpha v(x)\, dx \\
&= \sum_{\alpha \in I^*} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \in J_i} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(f_{i,j} \cdot u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \\
&\overset{57}{=} \sum_{\alpha \in I^*} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \in J_i} (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} f_{i,j}(x) u(x) D_\alpha^2 v(x)\, dx \\
&= (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \in J_i} f_{i,j} \right) (x) u(x) \left(\sum_{\alpha \in I^*} D_\alpha^2 v(x) \right) dx \\
&= (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} V_{ee}(x) u(x) \Delta_I v(x)\, dx
\end{aligned}$$

(ii) Seien $i \in \{1, \ldots, N\}$ und $c \in \mathbb{R}^3$. Wie in (i) erhält man für $i \in I$ durch $|I| - 1$-fache partielle Integration und Anwendung von 3.11 bzw. für $i \notin I$ durch gewöhnliche $|I|$-fache partielle Integration für alle $\alpha \in I^*$:

$$\int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(-g_{c,i}u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \;=\; (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} -g_{c,i}(x) u(x) D_\alpha^2 v(x)\, dx \tag{58}$$

Insgesamt folgt also:

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(V_{ne}u)(x) D_\alpha v(x)\, dx &= \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha \left(\left(\sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} -Z_k g_{c_k,i} \right) \cdot u \right) (x) D_\alpha v(x)\, dx \\
&= \sum_{\alpha \in I^*} \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} Z_k \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(-g_{c_k,i} \cdot u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \\
&\overset{58}{=} \sum_{\alpha \in I^*} \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} Z_k (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} -g_{c_k,i}(x) u(x) D_\alpha^2 v(x)\, dx \\
&= (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \left(\sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} -Z_k g_{c_k,i} \right) (x) u(x) \left(\sum_{\alpha \in I^*} D_\alpha^2 v(x) \right) dx \\
&= (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} V_{ne}(x) u(x) \Delta_I v(x)\, dx
\end{aligned}$$

$\square$

4.3 Formulierung und Lösbarkeit des Variationsproblems

Zurück zum anvisierten Variationsproblem

$$\forall v \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \qquad a(u,v) \;=\; \hat{b}(v)$$

Um die Existenz einer eindeutigen Lösung $u \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ dieses Problems zu garantieren, müssen gewisse Regularitätsanforderungen an die rechte Seite b gestellt werden. Den formalen Rahmen dafür bietet die folgende Definition:

Definition 4.13.
Für alle $b \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ setze:

$$\|b\|_{\mathcal{H}^{-1}} := \sup_{v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})\setminus\{0\}} \frac{1}{\|v\|_{\mathcal{H}^1}} \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x)v(x)\, dx \right|$$

$$\|b\|_{\mathcal{R}_I^{-1}} := \left(\|b\|^2_{\mathcal{H}^{-1}} + \sum_{\alpha \in I^*} \|D_\alpha b\|^2_{\mathcal{H}^{-1}} \right)^{\frac{1}{2}}$$

Seien $\mathcal{H}^{-1}(\mathbb{R}^{3N})$ und $\mathcal{H}_I^{-1}(\mathbb{R}^{3N})$ die Abschlüsse von $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ bzw. $\mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ unter der Norm[12] $\|\cdot\|_{\mathcal{H}^{-1}}$ sowie $\mathcal{R}_I^{-1}(\mathbb{R}^{3N})$ der Abschluss von $\mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ unter der Norm $\|\cdot\|_{\mathcal{R}_I^{-1}}$.

Bemerkung 4.14 *zu 4.13*: Für alle $b \in \mathcal{R}_I^{-1}(\mathbb{R}^{3N})$ gilt die folgende Ungleichung:

$$\|b\|_{\mathcal{H}^{-1}} \;=\; \left(\|b\|^2_{\mathcal{H}^{-1}}\right)^{\frac{1}{2}} \;\le\; \left(\|b\|^2_{\mathcal{H}^{-1}} + \sum_{\alpha \in I^*} \|D_\alpha b\|^2_{\mathcal{H}^{-1}} \right)^{\frac{1}{2}} \;=\; \|b\|_{\mathcal{R}_I^{-1}} \tag{59}$$

Damit sind nun alle technischen Voraussetzungen gegeben, um das Variationsproblem aufzustellen. Hierfür werden zunächst die Abbildungen a und $\hat{b}$ auf der dichten Teilmenge $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N}) \subseteq \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ definiert und anschließend stetig fortgesetzt. Dabei wird aus technischen Gründen ein Verschiebungsparameter μ eingeführt, der bei geeigneter Wahl zunächst die gewünschten Systemeigenschaften sicherstellt. Mit einer verfeinerten Argumentation kann später die Regularität des Problems von μ unabhängig gemacht werden.

Definition 4.15.
Es seien im Folgenden stets $\mu \in \mathbb{R}$ und $b \in \mathcal{H}^{-1}(\mathbb{R}^{3N})$.
Für alle $u, v \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ und $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}, (v_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ mit

$$\lim_{n\to\infty} \|u - u_n\|_{\mathcal{H}^1} \;=\; 0 \;=\; \lim_{n\to\infty} \|v - v_n\|_{\mathcal{H}^1}$$

setze

$$\forall n \in \mathbb{N} \quad a(u_n, v_n) := \int_{\mathbb{R}^{3N}} (Hu_n + \mu u_n)(x) v_n(x)\, dx$$

$$\forall n \in \mathbb{N} \quad \hat{b}(v_n) := \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x) v_n(x)\, dx$$

[12] Die Definitheit folgt aus der der $\mathcal{L}^2$-Norm durch die Wahl $v = b$.

$$
\begin{aligned}
a(u,v) &:= \lim_{n\to\infty} a(u_n, v_n) \\
\hat{b}(v) &:= \lim_{n\to\infty} \hat{b}(v_n)
\end{aligned}
$$

Es ist noch zu zeigen, dass a und $\hat{b}$ damit wohldefiniert sind; genauer muss sichergestellt sein, dass die Definition von $a(u,v)$ und $\hat{b}(v)$ unabhängig von den gewählten Folgen $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}$ und $(v_n)_{n\in\mathbb{N}}$ ist. Diese und weitere Eigenschaften sind Gegenstand des folgenden Lemmas.

Lemma 4.16: [YSERENTANT (4.5), (4.9)].

(i) Es ist $a : \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \times \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \to \mathbb{R}$ eine stetige, symmetrische Bilinearform. Falls $\mu \geq \frac{1}{4} + 9N^3$ gilt, so ist a auch koerziv.

(ii) Es ist $\hat{b} : \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \to \mathbb{R}$ eine stetige, lineare Abbildung, d. h. $\hat{b} \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})^*$.

Beweis. (i) Die Aussage wird zunächst für die Einschränkung $a|_{\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})\times\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})}$ gezeigt. Dann ist a nach 1.11 und 1.13 als stetige Fortsetzung eindeutig definiert und Bilinearität, Symmetrie und Koerzivität übertragen sich auf a, weil die Grenzwertbildung linear ist und schwache Ungleichungen erhält.
Seien also $u, v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$. Die Bilinearität folgt unmittelbar aus der Linearität von Differential- und Integraloperatoren. Damit gilt auch $|a(u,v)| < \infty$, weil unter Bezugnahme auf 4.10 alle auftretenden Integrale endlich sind.
Mit mehrdimensionaler partieller Integration folgt:

$$
\begin{aligned}
a(u,v) &= \int_{\mathbb{R}^{3N}} (Hu(x) + \mu u(x)) \cdot v(x)\, dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^{3N}} (V(x)u(x))v(x)\, dx - \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \Delta u(x)v(x)\, dx + \int_{\mathbb{R}^{3N}} (\mu u(x))v(x)\, dx \\
&\overset{121}{=} \int_{\mathbb{R}^{3N}} (V(x)v(x))u(x)\, dx - \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \Delta v(x)u(x)\, dx + \int_{\mathbb{R}^{3N}} (\mu v(x))u(x)\, dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^{3N}} (Hv(x) + \mu v(x)) \cdot u(x)\, dx \\
&= a(v,u)
\end{aligned}
$$

also ist a symmetrisch.
Die Cauchy-Schwarz- und die Hölder-Ungleichung sowie 4.10 liefern nun mit der Stetigkeitskonstante $\xi_S := 3N^{\frac{3}{2}} + \frac{1}{2} + |\mu|$ die Stetigkeit von a gemäß 1.12:

$$
\begin{aligned}
|a(u,v)| &= \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)u(x)v(x)\, dx - \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \Delta u(x)v(x)\, dx + \mu \int_{\mathbb{R}^{3N}} u(x)v(x)\, dx \right| \\
&\overset{121}{=} \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)u(x)v(x)\, dx + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \langle \nabla u(x), \nabla v(x)\rangle_2\, dx + \mu \int_{\mathbb{R}^{3N}} u(x)v(x)\, dx \right| \\
&\leq \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)u(x)v(x)\, dx \right| + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \sum_{i=1}^{N}\sum_{\alpha=1}^{3} |\partial_{i,\alpha} u(x) \cdot \partial_{i,\alpha} v(x)|\, dx \\
&\quad + |\mu| \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} u(x)v(x)\, dx \right|
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\overset{114}{\leq} \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)u(x)v(x)\,dx \right| + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla u(x)\|_2 \|\nabla v(x)\|_2\,dx + |\mu| \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} u(x)v(x)\,dx \right| \\
&\overset{112}{\leq} \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)u(x)v(x)\,dx \right| + \frac{1}{2} |u|_{\mathcal{H}^1} |v|_{\mathcal{H}^1} + |\mu| \|u\|_{\mathcal{L}^2} \|v\|_{\mathcal{L}^2} \\
&\overset{52}{\leq} 3N^{\frac{3}{2}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} |v|_{\mathcal{H}^1} + \frac{1}{2} |u|_{\mathcal{H}^1} |v|_{\mathcal{H}^1} + |\mu| \|u\|_{\mathcal{L}^2} \|v\|_{\mathcal{L}^2} \\
&\overset{1,2}{\leq} 3N^{\frac{3}{2}} \|u\|_{\mathcal{H}^1} \|v\|_{\mathcal{H}^1} + \frac{1}{2} \|u\|_{\mathcal{H}^1} \|v\|_{\mathcal{H}^1} + |\mu| \|u\|_{\mathcal{H}^1} \|v\|_{\mathcal{H}^1} \\
&= \left(3N^{\frac{3}{2}} + \frac{1}{2} + |\mu| \right) \|u\|_{\mathcal{H}^1} \|v\|_{\mathcal{H}^1}
\end{aligned}
$$

Unter der Voraussetzung $\mu \geq \frac{1}{4} + 9N^3$ folgt aus 4.10 mit der Koerzivitätskonstante $\xi_C := \frac{1}{4}$ die Koerzivität von a:

$$
\begin{aligned}
a(u,u) &= \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)u(x)u(x)\,dx - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \Delta u(x)u(x)\,dx + \mu \int_{\mathbb{R}^{3N}} u(x)^2\,dx \\
&\overset{121}{=} \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)u(x)u(x)\,dx + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \langle \nabla u(x), \nabla u(x) \rangle_2\,dx + \mu \|u\|_{\mathcal{L}^2}^2 \\
&= \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)u(x)u(x)\,dx + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla u(x)\|_2^2\,dx + \mu \|u\|_{\mathcal{L}^2}^2 \\
&= \frac{1}{2} |u|_{\mathcal{H}^1}^2 + \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)u(x)u(x)\,dx + \mu \|u\|_{\mathcal{L}^2}^2 \\
&\geq \frac{1}{2} |u|_{\mathcal{H}^1}^2 - \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)u(x)u(x)\,dx \right| + \mu \|u\|_{\mathcal{L}^2}^2 \\
&\overset{52}{\geq} \frac{1}{2} |u|_{\mathcal{H}^1}^2 - 3N^{\frac{3}{2}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} |u|_{\mathcal{H}^1} + \mu \|u\|_{\mathcal{L}^2}^2 \\
&= \left(\frac{1}{2} |u|_{\mathcal{H}^1} - 3N^{\frac{3}{2}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} \right)^2 + \frac{1}{4} (|u|_{\mathcal{H}^1}^2 + \|u\|_{\mathcal{L}^2}^2) + \left(\mu - \frac{1}{4} - 9N^3 \right) \|u\|_{\mathcal{L}^2}^2 \\
&\geq \frac{1}{4} (|u|_{\mathcal{H}^1}^2 + \|u\|_{\mathcal{L}^2}^2) \\
&= \frac{1}{4} \|u\|_{\mathcal{H}^1}^2
\end{aligned}
$$

(ii) Die Abbildung $\hat{b}|_{\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})}$ ist offensichtlich linear und für alle $v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N}) \setminus \{0\}$ gilt

$$
\begin{aligned}
|\hat{b}(v)| = \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x)v(x)\,dx \right| &= \frac{1}{\|v\|_{\mathcal{H}^1}} \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x)v(x)\,dx \right| \cdot \|v\|_{\mathcal{H}^1} \\
&\leq \sup_{\tilde{v} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N}) \setminus \{0\}} \frac{1}{\|\tilde{v}\|_{\mathcal{H}^1}} \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x)\tilde{v}(x)\,dx \right| \cdot \|v\|_{\mathcal{H}^1} \\
&= \|b\|_{\mathcal{H}^{-1}} \|v\|_{\mathcal{H}^1}
\end{aligned}
$$

also ist $\hat{b}|_{\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})}$ nach 1.12 stetig mit der Stetigkeitskonstante $\xi_S := \|b\|_{\mathcal{H}^{-1}}$ und somit ist $\hat{b}$ nach 1.13 als stetige, lineare Fortsetzung wohldefiniert und eindeutig. □

Satz 4.17: [YSERENTANT (4.7)].
Es seien $\mu \geq \frac{1}{4} + 9N^3$ und $b \in \mathcal{H}^{-1}(\mathbb{R}^{3N})$. Dann folgen:

(i) Das Variationsproblem

$$\forall v \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \qquad a(u,v) \;=\; \hat{b}(v) \tag{60}$$

besitzt eine eindeutige Lösung $u \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$.

(ii) Gilt $b \in \mathcal{H}_I^{-1}(\mathbb{R}^{3N})$, so folgt $u \in \mathcal{H}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$ und das Variationsproblem 60 ist äquivalent zum Variationsproblem

$$\forall v \in \mathcal{H}_I^1(\mathbb{R}^{3N}) \qquad a(u,v) \;=\; \hat{b}(v) \tag{61}$$

Beweis. (i) Nach 4.16 sind a koerziv und $\hat{b} \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})^*$, weshalb 1.21 die Existenz einer eindeutigen Lösung $u \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ von 60 garantiert, weil $\mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ laut 1.11 ein $\mathbb{R}$-Hilbert-Raum ist.
(ii) Es seien $i,j \in I$ mit $i \neq j$. Da $\varphi_{i,j}$ nach A.20 ein C^∞-Diffeomorphismus ist, ist für alle $v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ auch $v \circ \varphi_{i,j} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ und für alle $v \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ auch $v \circ \varphi_{i,j} \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$.
Seien $u \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ die nach (i) eindeutige Lösung von 60 und $v \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$. Dann existieren $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}, (v_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ mit

$$\lim_{n\to\infty} \|u - u_n\|_{\mathcal{H}^1} \;=\; 0 \;=\; \lim_{n\to\infty} \|v - v_n\|_{\mathcal{H}^1}$$

Mit dem Transformationssatz (beachte dazu A.20) folgt:

$$\begin{aligned}
\|u_n \circ \varphi_{i,j} - u \circ \varphi_{i,j}\|_{\mathcal{H}^1} &= \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} ((u_n - u) \circ \varphi_{i,j})(x)^2 \, dx + \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla((u_n - u) \circ \varphi_{i,j})(x)\|_2^2 \, dx\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{153}{=} \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} (u_n - u)(\varphi_{i,j}(x))^2 \, dx + \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla(u_n - u)(\varphi_{i,j}(x))\|_2^2 \, dx\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{117}{=} \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} (u_n - u)(x)^2 \, dx + \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla(u_n - u)(x)\|_2^2 \, dx\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \|u_n - u\|_{\mathcal{H}^1}
\end{aligned}$$

und somit

$$\lim_{n\to\infty} \|u \circ \varphi_{i,j} - u_n \circ \varphi_{i,j}\|_{\mathcal{H}^1} \;=\; 0$$

sowie analog

$$\lim_{n\to\infty} \|v \circ \varphi_{i,j} - v_n \circ \varphi_{i,j}\|_{\mathcal{H}^1} \;=\; 0$$

Sei $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$. Nach Wahl von u und Definition von a bzw. $\hat{b}$ existiert $n_0 \in \mathbb{N}$, sodass für alle $n \in \mathbb{N}_{\geq n_0}$ gelten:

$$|a(u_n, v_n \circ \varphi_{i,j}) - a(u, v \circ \varphi_{i,j})| \;<\; \frac{\epsilon}{4} \tag{62}$$

$$|a(u_n, v_n) - a(u,v)| \;<\; \frac{\epsilon}{4} \tag{63}$$

$$\begin{aligned}\left|\hat{b}(v \circ \varphi_{i,j}) - \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x) \cdot (v_n \circ \varphi_{i,j})(x)\, dx\right| &< \frac{\epsilon}{4} \qquad (64)\\ \left|\hat{b}(v) - \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x) \cdot v_n(x)\, dx\right| &< \frac{\epsilon}{4} \qquad (65)\end{aligned}$$

Deswegen gelten:

$$\begin{aligned}&\left|a(u_n, v_n \circ \varphi_{i,j}) - \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x) \cdot (v_n \circ \varphi_{i,j})(x)\, dx\right|\\ =\ &\left|a(u_n, v_n \circ \varphi_{i,j}) - a(u, v \circ \varphi_{i,j}) + \hat{b}(v \circ \varphi_{i,j}) - \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x) \cdot (v_n \circ \varphi_{i,j})(x)\, dx\right|\\ \leq\ &\left|a(u_n, v_n \circ \varphi_{i,j}) - a(u, v \circ \varphi_{i,j})\right| + \left|\hat{b}(v \circ \varphi_{i,j}) - \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x) \cdot (v_n \circ \varphi_{i,j})(x)\, dx\right| \qquad (66)\\ \overset{62,64}{<}\ &\frac{\epsilon}{4} + \frac{\epsilon}{4}\\ =\ &\frac{\epsilon}{2}\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}\left|a(u_n, v_n) - \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x) \cdot v_n(x)\, dx\right| &= \left|a(u_n, v_n) - a(u, v) + \hat{b}(v) - \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x) \cdot v_n(x)\, dx\right|\\ &\leq |a(u_n, v_n) - a(u, v)| + \left|\hat{b}(v) - \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x) \cdot v_n(x)\, dx\right| \qquad (67)\\ &\overset{63,65}{<} \frac{\epsilon}{4} + \frac{\epsilon}{4}\\ &= \frac{\epsilon}{2}\end{aligned}$$

Für alle $n \in \mathbb{N}_{\geq n_0}$ folgt also mit A.23 und dem Transformationssatz (beachte wieder A.20):

$$\begin{aligned}&|a(u_n \circ \varphi_{i,j}, v_n) - a(-u_n, v_n)|\\ =\ &\left|a(u_n \circ \varphi_{i,j}, v_n) - \int_{\mathbb{R}^{3N}} -b(x) v_n(x)\, dx + \int_{\mathbb{R}^{3N}} -b(x) v_n(x)\, dx - a(-u_n, v_n)\right|\\ \leq\ &\left|a(u_n \circ \varphi_{i,j}, v_n) - \int_{\mathbb{R}^{3N}} -b(x) v_n(x)\, dx\right| + \left|a(u_n, v_n) - \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x) v_n(x)\, dx\right|\\ =\ &\left|\int_{\mathbb{R}^{3N}} (H(u_n \circ \varphi_{i,j}) + \mu(u_n \circ \varphi_{i,j}))(x) v_n(x)\, dx - \int_{\mathbb{R}^{3N}} -b(x) v_n(x)\, dx\right|\\ &+ \left|a(u_n, v_n) - \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x) v_n(x)\, dx\right|\\ \overset{67}{<}\ &\left|\int_{\mathbb{R}^{3N}} (H(u_n \circ \varphi_{i,j}) + \mu(u_n \circ \varphi_{i,j}))(x) v_n(x)\, dx - \int_{\mathbb{R}^{3N}} -b(x) v_n(x)\, dx\right| + \frac{\epsilon}{2}\\ \overset{155}{=}\ &\left|\int_{\mathbb{R}^{3N}} ((Hu_n + \mu u_n) \circ \varphi_{i,j})(x) v_n(x)\, dx - \int_{\mathbb{R}^{3N}} -b(x) v_n(x)\, dx\right| + \frac{\epsilon}{2}\\ \overset{117}{=}\ &\left|\int_{\mathbb{R}^{3N}} ((Hu_n + \mu u_n) \circ \varphi_{i,j}^2)(x)(v_n \circ \varphi_{i,j})(x)\, dx - \int_{\mathbb{R}^{3N}} -(b \circ \varphi_{i,j})(x)(v_n \circ \varphi_{i,j})(x)\, dx\right| + \frac{\epsilon}{2}\\ =\ &\left|\int_{\mathbb{R}^{3N}} (Hu_n + \mu u_n)(x)(v_n \circ \varphi_{i,j})(x)\, dx - \int_{\mathbb{R}^{3N}} -(-b)(x)(v_n \circ \varphi_{i,j})(x)\, dx\right| + \frac{\epsilon}{2}\\ =\ &\left|a(u_n, v_n \circ \varphi_{i,j}) - \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x)(v_n \circ \varphi_{i,j})(x)\, dx\right| + \frac{\epsilon}{2}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\overset{66}{<} \frac{\epsilon}{2} + \frac{\epsilon}{2} \\ &= \epsilon \end{aligned}$$

Dies liefert

$$a(-u \circ \varphi_{i,j}, v) \;=\; \lim_{n\to\infty} a(-u_n \circ \varphi_{i,j}, v_n) \;=\; \lim_{n\to\infty} a(u_n, v_n) \;=\; a(u,v)$$

Da $v \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ beliebig war, bedeutet dies, dass auch $-u \circ \varphi_{i,j}$ eine Lösung von 60 ist. Nach (i) folgt dann bereits $-u \circ \varphi_{i,j} = u$. Also ergibt sich $u \in \mathcal{H}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ nach 4.4.
Wegen $\mathcal{H}^1_I(\mathbb{R}^{3N}) \subseteq \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ ist damit u aber auch eine Lösung von 61. Unter Betrachtung von $\hat{b}_I := \hat{b}|_{\mathcal{H}^1_I(\mathbb{R}^{3N})}$ erhält man analog zu (i) aus 1.21 die eindeutige Lösbarkeit von 61, weil $\mathcal{H}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ als abgeschlossener Teilraum des $\mathbb{R}$-Hilbert-Raums $\mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ wieder ein $\mathbb{R}$-Hilbert-Raum ist. Da beide Variationsprobleme also dieselbe eindeutige Lösung besitzen, sind sie äquivalent. □

Es wurde also eingesehen, dass das Variationsproblem 60 für hinreichend großes μ nicht nur eindeutig lösbar ist, vielmehr übertragen sich auch die Antisymmetrieeigenschaften der rechten Seite auf die Lösung und es genügt, über einen kleineren Testraum zu variieren. Wünschenswert wäre, dass mit höherer Regularität der rechten Seite auch höhere Differenzierbarkeit der Lösung einherginge. Dies nachzuweisen wird Gegenstand des nächsten Abschnitts sein.
Zunächst jedoch ist es sinnvoll, erst einmal die Verbindung zwischen dem Variationsproblem und den Eigenfunktionen des Schrödinger-Operators herzustellen. Mithilfe von 60 lässt sich nämlich der Begriff der Eigenfunktion verallgemeinern:

Definition 4.18: *(Schwache Eigenfunktionen des Schrödinger-Operators).*
Eine Funktion $u \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ wird eine *schwache Eigenfunktion* des Schrödinger-Operators genannt, wenn $\lambda \in \mathbb{R}$ existiert, sodass u für $b := (\lambda + \mu)u$ eine Lösung des Variationsproblems 60 ist; also

$$\forall v \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \qquad a(u,v) \;=\; \hat{b}(v) \;=\; (\lambda+\mu)\hat{u}(v)$$

Bemerkung 4.19 *(Klassische Eigenfunktionen)*: Es sei $u \in X$ eine klassische Eigenfunktion von H, es gebe also $\lambda \in \mathbb{R}$ mit $Hu|_Z = \lambda u|_Z$. Dann ist u auch eine schwache Eigenfunktion des Schrödinger-Operators.
Da $\mathbb{R}^{3N} \setminus Z$ eine Lebesgue-Nullmenge ist, gilt insbesondere $u \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$, also existiert eine Folge $(u_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ mit $\lim\limits_{n\to\infty} \|u_n - u\|_{\mathcal{H}^1} = 0$. Setze $b := (\lambda+\mu)u$. Weiter seien $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$ und $v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$. Dann existiert $n_0 \in \mathbb{N}$, sodass für alle $n \in \mathbb{N}_{\geq n_0}$ gilt:

$$\|u_n - u\|_{\mathcal{H}^1} \;<\; \min\left\{1, \frac{\epsilon}{3N^{\frac{3}{2}}|v|_{\mathcal{H}^1} + \frac{1}{2}\|v\|_{\mathcal{H}^1} + \left|\mu - \frac{1}{2}\right| \|v\|_{\mathcal{L}^2}}\right\} \tag{68}$$

Mit der Hölder-Ungleichung, der Cauchy-Schwarz-Ungleichung für das $\mathcal{H}^1$-Skalarprodukt und mehrdimensionaler partieller Integration folgt daher für alle $n \in \mathbb{N}_{\geq n_0}$:

$$\left|a(u_n, v) - \hat{b}(v)\right|$$

$$
\begin{aligned}
&= \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} (Hu_n + \mu u_n)(x)v(x)\,dx - \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x)v(x)\,dx \right| \\
&= \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} (Hu_n + \mu u_n)(x)v(x) - (\lambda + \mu)u(x)v(x)\,dx \right| \\
&= \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} (Hu_n + \mu u_n)(x)v(x) - (Hu + \mu u)(x)v(x)\,dx \right| \\
&= \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} H(u_n - u)(x)v(x)\,dx + \mu \int_{\mathbb{R}^{3N}} (u_n - u)(x)v(x)\,dx \right| \\
&= \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)(u_n - u)(x)v(x)\,dx - \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \Delta(u_n - u)(x)v(x)\,dx + \mu \int_{\mathbb{R}^{3N}} (u_n - u)(x)v(x)\,dx \right| \\
&\overset{121}{=} \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)(u_n - u)(x)v(x)\,dx + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \langle \nabla(u_n - u)(x), \nabla v(x)\rangle_2\,dx \right. \\
&\qquad \left. + \mu \int_{\mathbb{R}^{3N}} (u_n - u)(x)v(x)\,dx \right| \\
&= \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)(u_n - u)(x)v(x)\,dx + \frac{1}{2}\langle u_n - u, v\rangle_{\mathcal{H}^1} + \left(\mu - \frac{1}{2}\right) \int_{\mathbb{R}^{3N}} (u_n - u)(x)v(x)\,dx \right| \\
&\leq \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)(u_n - u)(x)v(x)\,dx \right| + \frac{1}{2}\left|\langle u_n - u, v\rangle_{\mathcal{H}^1}\right| + \left|\mu - \frac{1}{2}\right| \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} (u_n - u)(x)v(x)\,dx \right| \\
&\underset{112}{\overset{52,3}{\leq}} 3N^{\frac{3}{2}} \|u_n - u\|_{\mathcal{L}^2} |v|_{\mathcal{H}^1} + \frac{1}{2}\|u_n - u\|_{\mathcal{H}^1}\|v\|_{\mathcal{H}^1} + \left|\mu - \frac{1}{2}\right| \|u_n - u\|_{\mathcal{L}^2}\|v\|_{\mathcal{L}^2} \\
&\overset{1}{\leq} 3N^{\frac{3}{2}} \|u_n - u\|_{\mathcal{H}^1} |v|_{\mathcal{H}^1} + \frac{1}{2}\|u_n - u\|_{\mathcal{H}^1}\|v\|_{\mathcal{H}^1} + \left|\mu - \frac{1}{2}\right| \|u_n - u\|_{\mathcal{H}^1}\|v\|_{\mathcal{L}^2} \\
&= \|u_n - u\|_{\mathcal{H}^1} \left(3N^{\frac{3}{2}} |v|_{\mathcal{H}^1} + \frac{1}{2}\|v\|_{\mathcal{H}^1} + \left|\mu - \frac{1}{2}\right| \|v\|_{\mathcal{L}^2} \right) \\
&\overset{68}{<} \epsilon
\end{aligned}
$$

Also

$$a(u,v) \;=\; \lim_{n\to\infty} a(u_n, v) \;=\; \hat{b}(v)$$

Ist nun $\tilde{v} \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ und $(v_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ mit $\lim_{n\to\infty} \|v_n - \tilde{v}\|_{\mathcal{H}^1} = 0$, so ergibt sich mit dem eben Gezeigten:

$$a(u,\tilde{v}) \;=\; \lim_{n\to\infty} a(u, v_n) \;=\; \lim_{n\to\infty} \hat{b}(v_n) \;=\; \hat{b}(\tilde{v})$$

also ist u auch eine Lösung des Variationsproblems 60.

Wenn also jede klassische Eigenfunktion insbesondere eine schwache Eigenfunktion des elektronischen Schrödinger-Operators ist, genügt es, die gewünschte Differenzierbarkeit für alle schwachen Eigenfunktionen nachzuweisen. Dies rechtfertigt die nähere Untersuchung der Variationsprobleme 60 und 61.

5 Regularität der Lösungen

5.1 Vorläufiger Regularitätsbeweis

Im Folgenden wird ein modifiziertes Variationsproblem für rechte Seiten hoher Regularität betrachtet, dessen Lösung in $\mathcal{R}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$ liegt, also schwache Ableitungen der Ordnung $|I|+1$ besitzt. Indem man zeigt, dass diese Lösung mit der von 61 übereinstimmt, ist dann auch die Regularität des Originalproblems nachgewiesen. Wieder werden die beteiligten Abbildungen zunächst auf einer dichten Teilmenge definiert. Da für dieses Problem die Antisymmetrieeigenschaften von essentieller Bedeutung sind, stellen die antisymmetrischen Testfunktionen eine geeignete Wahl dar.

Definition 5.1.
Es sei im Folgenden stets $b \in \mathcal{R}_I^{-1}(\mathbb{R}^{3N}) \subseteq \mathcal{H}^{-1}(\mathbb{R}^{3N})$.
Für alle $u, v \in \mathcal{R}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$ und $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}, (v_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ mit

$$\lim_{n\to\infty} \|u - u_n\|_{\mathcal{R}_I^1} = 0 = \lim_{n\to\infty} \|v - v_n\|_{\mathcal{R}_I^1}$$

setze

$$\begin{aligned}
\forall n \in \mathbb{N} \quad \tilde{a}(u_n, v_n) &:= a(u_n, v_n) + \sum_{\alpha\in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Hu_n + \mu u_n)(x) D_\alpha v_n(x)\, dx \\
\forall n \in \mathbb{N} \quad \tilde{b}(v_n) &:= \hat{b}(v_n) + \sum_{\alpha\in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha b(x) D_\alpha v_n(x)\, dx \\
\tilde{a}(u, v) &:= \lim_{n\to\infty} \tilde{a}(u_n, v_n) \\
\tilde{b}(v) &:= \lim_{n\to\infty} \tilde{b}(v_n)
\end{aligned}$$

Wie schon für a und $\hat{b}$ ist auch hier die Wohldefiniertheit der Fortsetzung zu zeigen:

Lemma 5.2: [Ysérentant (4.12), (4.14)].

(i) Es ist $\tilde{a} : \mathcal{R}_I^1(\mathbb{R}^{3N}) \times \mathcal{R}_I^1(\mathbb{R}^{3N}) \to \mathbb{R}$ eine stetige Bilinearform.
Zudem ist $\tilde{a}$ koerziv, falls $\mu \geq \frac{1}{4} + (217 + 88\sqrt{6})N^3$.

(ii) Es ist $\tilde{b} : \mathcal{R}_I^1(\mathbb{R}^{3N}) \to \mathbb{R}$ eine stetige, lineare Abbildung, d. h. $\tilde{b} \in \mathcal{R}_I^1(\mathbb{R}^{3N})^*$.

Beweis. (i) Wieder wird die Aussage zunächst für die Einschränkung $\tilde{a}|_{\mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})\times\mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})}$ gezeigt. Da nach Definition $\mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ ein dichter Teilraum von $\mathcal{R}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$ ist, liefert dann 1.13 die Eindeutigkeit der stetigen Fortsetzung $\tilde{a}$, wobei sich wiederum Bilinearität und Koerzivität fortsetzen. Seien also $u, v \in \mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})$. Die Bilinearität folgt aus der Linearität der beteiligten Differential- und Integraloperatoren bzw. der Bilinearität von a. Damit folgt auch $|\tilde{a}(u, v)| < \infty$, weil unter Zuhilfenahme von 4.11 und 4.10 alle auftretenden Integrale endlich sind.
Die Cauchy-Schwarz- und die Hölder-Ungleichung sowie 4.11 liefern nun mit der Stetigkeits-

konstante $\xi_S := (14+4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}} + 1 + 2|\mu|$ die Stetigkeit von $\tilde{a}$ gemäß 1.12:

$$
\begin{aligned}
&|\tilde{a}(u,v)| \\
= &\left| \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x) D_\alpha v(x)\, dx - \frac{1}{2} \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(\Delta u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \right. \\
&\left. + \mu \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha u(x) D_\alpha v(x)\, dx + a(u,v) \right| \\
= &\left| \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x) D_\alpha v(x)\, dx - \frac{1}{2} \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \Delta(D_\alpha u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \right. \\
&\left. + \mu \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha u(x) D_\alpha v(x)\, dx + a(u,v) \right| \\
\overset{121}{=} &\left| \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x) D_\alpha v(x)\, dx + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \langle \nabla(D_\alpha u)(x), \nabla(D_\alpha v)(x) \rangle_2\, dx \right. \\
&\left. + \mu \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha u(x) D_\alpha v(x)\, dx + a(u,v) \right| \\
\leq &\left| \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x) D_\alpha v(x)\, dx \right| + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\alpha=1}^{3} |\partial_{i,\alpha} D_\alpha u(x) \cdot \partial_{i,\alpha} D_\alpha v(x)|\, dx \\
&+ |\mu| \sum_{\alpha \in I^*} \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha u(x) D_\alpha v(x)\, dx \right| + |a(u,v)| \\
\overset{114}{\leq} &\left| \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x) D_\alpha v(x)\, dx \right| + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla D_\alpha u(x)\|_2 \cdot \|\nabla D_\alpha v(x)\|_2\, dx \\
&+ |\mu| \sum_{\alpha \in I^*} \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha u(x) D_\alpha v(x)\, dx \right| + |a(u,v)| \\
\overset{112}{\leq} &\left| \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x) D_\alpha v(x)\, dx \right| + |\mu| \sum_{\alpha \in I^*} \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha u(x)^2\, dx \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha v(x)^2\, dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha \in I^*} \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla D_\alpha u(x)\|_2^2\, dx \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla D_\alpha v(x)\|_2^2\, dx \right)^{\frac{1}{2}} + |a(u,v)| \\
\overset{114}{\leq} &\left| \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x) D_\alpha v(x)\, dx \right| + |\mu| \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha u(x)^2\, dx \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha v(x)^2\, dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
&+ \frac{1}{2} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla D_\alpha u(x)\|_2^2\, dx \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla D_\alpha v(x)\|_2^2\, dx \right)^{\frac{1}{2}} + |a(u,v)| \\
= &\left| \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x) D_\alpha v(x)\, dx \right| + \frac{1}{2} |u|_{\mathcal{R}^1_I} |v|_{\mathcal{R}^1_I} + |\mu| |u|_{\mathcal{L}^2_I} |v|_{\mathcal{L}^2_I} + |a(u,v)| \\
\overset{53}{\leq} &(11+4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}} |u|_{\mathcal{L}^2_I} |v|_{\mathcal{R}^1_I} + \frac{1}{2} |u|_{\mathcal{R}^1_I} |v|_{\mathcal{R}^1_I} + |\mu| |u|_{\mathcal{L}^2_I} |v|_{\mathcal{L}^2_I} + \left(3N^{\frac{3}{2}} + \frac{1}{2} + |\mu| \right) \|u\|_{\mathcal{H}^1} \|v\|_{\mathcal{H}^1} \\
\underset{45}{\overset{41,42}{\leq}} &(11+4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}} \|u\|_{\mathcal{R}^1_I} \|v\|_{\mathcal{R}^1_I} + \frac{1}{2} \|u\|_{\mathcal{R}^1_I} \|v\|_{\mathcal{R}^1_I} + |\mu| \|u\|_{\mathcal{R}^1_I} \|v\|_{\mathcal{R}^1_I} \\
&+ \left(3N^{\frac{3}{2}} + \frac{1}{2} + |\mu| \right) \|u\|_{\mathcal{R}^1_I} \|v\|_{\mathcal{R}^1_I}
\end{aligned}
$$

$$= \left((14+4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}+1+2|\mu|\right)\|u\|_{\mathcal{R}^1_I}\|v\|_{\mathcal{R}^1_I}$$

Unter der Annahme $\mu \geq \frac{1}{4}+(217+88\sqrt{6})N^3$ impliziert 4.11 mit der Koerzivitätskonstante $\xi_C := \frac{1}{4}$ die Koerzivität von $\tilde{a}$:

$$\begin{aligned}
\tilde{a}(u,u) &= \sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x)D_\alpha u(x)\,dx - \frac{1}{2}\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(\Delta u)(x)D_\alpha u(x)\,dx\\
&\quad + \mu\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha u(x)^2\,dx + a(u,u)\\
&= \sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x)D_\alpha u(x)\,dx - \frac{1}{2}\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \Delta(D_\alpha u)(x)D_\alpha u(x)\,dx\\
&\quad + \mu|u|^2_{\mathcal{L}^2_I} + a(u,u)\\
&\overset{121}{=} \sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x)D_\alpha u(x)\,dx + \frac{1}{2}\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \langle\nabla D_\alpha u(x),\nabla D_\alpha u(x)\rangle_2\,dx\\
&\quad + \mu|u|^2_{\mathcal{L}^2_I} + a(u,u)\\
&= \sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)D_\alpha u(x)\,dx + \frac{1}{2}\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla D_\alpha u(x)\|_2^2\,dx + \mu|u|^2_{\mathcal{L}^2_I} + a(u,u)\\
&= \frac{1}{2}|u|^2_{\mathcal{R}^1_I} + \sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)D_\alpha u(x)\,dx + \mu|u|^2_{\mathcal{L}^2_I} + a(u,u)\\
&\geq \frac{1}{2}|u|^2_{\mathcal{R}^1_I} - \left|\sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x)u(x)\,dx\right| + \mu|u|^2_{\mathcal{L}^2_I} + a(u,u)\\
&\overset{53}{\geq} \frac{1}{2}|u|^2_{\mathcal{R}^1_I} - (11+4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}|u|_{\mathcal{L}^2_I}|u|_{\mathcal{R}^1_I} + \mu|u|^2_{\mathcal{L}^2_I} + \frac{1}{4}\|u\|^2_{\mathcal{H}^1}\\
&= \left(\frac{1}{2}|u|_{\mathcal{R}^1_I} - (11+4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}|u|_{\mathcal{L}^2_I}\right)^2 + \frac{1}{4}(|u|^2_{\mathcal{R}^1_I} + |u|^2_{\mathcal{L}^2_I} + \|u\|^2_{\mathcal{H}^1})\\
&\quad + \left(\mu - \frac{1}{4} - (217+88\sqrt{6})N^3\right)|u|^2_{\mathcal{L}^2_I}\\
&\geq \frac{1}{4}(|u|^2_{\mathbb{R}} + |u|^2_{\mathcal{L}^2_I} + \|u\|^2_{\mathcal{H}^1})\\
&= \frac{1}{4}\|u\|^2_{\mathcal{R}^1_I}
\end{aligned}$$

(ii) Die Abbildung $\tilde{b}|_{\mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})}$ ist offensichtlich linear und für alle $v \in \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N}) \setminus \{0\}$ gilt wegen $D_\alpha v \in \mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^{3N})$ mit der Cauchy-Schwarz-Ungleichung und der Ungleichung vom arithmetischen und geometrischen Mittel:

$$\begin{aligned}
|\tilde{b}(v)|^2 &= \left|\int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x)v(x)\,dx + \sum_{\alpha\in I^*}\int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha b(x)D_\alpha v(x)\,dx\right|^2\\
&\leq \left|\int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x)v(x)\,dx\right| + \sum_{\alpha\in I^*}\left|\int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha b(x)D_\alpha v(x)\,dx\right|^2\\
&= \left(\frac{1}{\|v\|_{\mathcal{H}^1}}\left|\int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x)v(x)\,dx\right|\|v\|_{\mathcal{H}^1}\right.
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
& \quad + \sum_{\substack{\alpha \in I^* \\ D_\alpha v \neq 0}} \frac{1}{\|D_\alpha v\|_{\mathcal{H}^1}} \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha b(x) D_\alpha v(x)\, dx \right| \|D_\alpha v\|_{\mathcal{H}^1} \Bigg)^2 \\
\leq & \left(\sup_{\tilde{v} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N}) \setminus \{0\}} \frac{1}{\|\tilde{v}\|_{\mathcal{H}^1}} \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} b(x) \tilde{v}(x)\, dx \right| \|v\|_{\mathcal{H}^1} \right. \\
& \quad \left. + \sum_{\alpha \in I^*} \sup_{\tilde{v} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N}) \setminus \{0\}} \frac{1}{\|\tilde{v}\|_{\mathcal{H}^1}} \left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha b(x) \tilde{v}(x)\, dx \right| \|D_\alpha v\|_{\mathcal{H}^1} \right)^2 \\
= & \left(\|b\|_{\mathcal{H}^{-1}} \|v\|_{\mathcal{H}^1} + \sum_{\alpha \in I^*} \|D_\alpha b\|_{\mathcal{H}^{-1}} \|D_\alpha v\|_{\mathcal{H}^1} \right)^2 \\
\overset{114}{\leq} & \left(\|b\|_{\mathcal{H}^{-1}} \|v\|_{\mathcal{H}^1} + \left(\sum_{\alpha \in I^*} \|D_\alpha b\|^2_{\mathcal{H}^{-1}} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \|D_\alpha v\|^2_{\mathcal{H}^1} \right)^{\frac{1}{2}} \right)^2 \\
= & \|b\|^2_{\mathcal{H}^{-1}} \|v\|^2_{\mathcal{H}^1} + 2\|b\|_{\mathcal{H}^{-1}} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \|D_\alpha v\|^2_{\mathcal{H}^1} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \|v\|_{\mathcal{H}^1} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \|D_\alpha b\|^2_{\mathcal{H}^{-1}} \right)^{\frac{1}{2}} \\
& \quad + \left(\sum_{\alpha \in I^*} \|D_\alpha b\|^2_{\mathcal{H}^{-1}} \right) \left(\sum_{\alpha \in I^*} \|D_\alpha v\|^2_{\mathcal{H}^1} \right) \\
\leq & \|b\|^2_{\mathcal{H}^{-1}} \|v\|^2_{\mathcal{H}^1} + \|b\|^2_{\mathcal{H}^{-1}} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \|D_\alpha v\|^2_{\mathcal{H}^1} \right) + \|v\|^2_{\mathcal{H}^1} \left(\sum_{\alpha \in I^*} \|D_\alpha b\|^2_{\mathcal{H}^{-1}} \right) \\
& \quad + \left(\sum_{\alpha \in I^*} \|D_\alpha b\|^2_{\mathcal{H}^{-1}} \right) \left(\sum_{\alpha \in I^*} \|D_\alpha v\|^2_{\mathcal{H}^1} \right) \\
= & \left(\|b\|^2_{\mathcal{H}^{-1}} + \sum_{\alpha \in I^*} \|D_\alpha b\|^2_{\mathcal{H}^{-1}} \right) \cdot \left(\|v\|^2_{\mathcal{H}^1} + \sum_{\alpha \in I^*} \|D_\alpha v\|^2_{\mathcal{H}^1} \right) \\
= & \|b\|^2_{\mathcal{R}_I^{-1}} \|v\|^2_{\mathcal{R}_I^1}
\end{aligned}
$$

weswegen die Monotonie der Wurzel liefert

$$|\tilde{b}(v)| \;\leq\; \|b\|_{\mathcal{R}_I^{-1}} \|v\|_{\mathcal{R}_I^1}$$

also ist $\tilde{b}|_{\mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})}$ gemäß 1.12 stetig mit der Stetigkeitskonstante $\xi_S := \|b\|_{\mathcal{R}_I^{-1}}$, und damit ist nach 1.13 die lineare, stetige Fortsetzung $\tilde{b}$ wohldefiniert und eindeutig. □

Satz 5.3: [YSERENTANT (4.15)].
Es gelte $\mu \geq \frac{1}{4} + (217 + 88\sqrt{6})N^3$. Dann besitzt das Variationsproblem

$$\forall v \in \mathcal{R}_I^1(\mathbb{R}^{3N}) \qquad \tilde{a}(u,v) \;=\; \tilde{b}(v) \tag{69}$$

eine eindeutige Lösung $u \in \mathcal{R}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$. Diese erfüllt:

$$\|u\|_{\mathcal{R}_I^1} \;\leq\; 4\|b\|_{\mathcal{R}_I^{-1}} \tag{70}$$

Beweis. Es ist $\mathcal{R}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$ ein $\mathbb{R}$-Hilbert-Raum. Nach 5.2 sind zudem $\tilde{a}$ koerziv und $\tilde{b} \in \mathcal{R}_I^1(\mathbb{R}^{3N})^*$,

sodass 1.21 die Existenz einer eindeutigen Lösung $u \in \mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ von 69 sicherstellt.
Weiter erhält man aus der Stetigkeit von $\tilde{b}$ und der Koerzivität von $\tilde{a}$:

$$\frac{1}{4}\|u\|^2_{\mathcal{R}^1_I} \;\leq\; \tilde{a}(u,u) \;=\; \tilde{b}(u) \;\leq\; \|b\|_{\mathcal{R}^{-1}_I}\|u\|_{\mathcal{R}^1_I}$$

Falls $\|u\|_{\mathcal{R}^1_I} \neq 0$, folgt 86 durch Multiplikation mit $\frac{4}{\|u\|_{\mathcal{R}^1_I}}$. Für $\|u\|_{\mathcal{R}^1_I} = 0$ ist 70 trivial erfüllt. □

Das Variationsproblem 69 hat bereits die gewünschte Regularität. Um diese auf 61 übertragen zu können, bedarf es zweier wesentlicher Faktoren: Der partiellen Integrationsformel 54 und der Bijektivität der Fourier-Transformation. Da Letztere nur auf dem Schwartz-Raum gilt, genügt die Betrachtuung antisymmetrischer Testfunktionen nicht mehr. Glücklicherweise verhalten sich jedoch die antisymmetrischen Schwartz-Funktionen hinreichend gutartig. Nicht nur liegen die antisymmetrischen Testfunktionen dicht darin, die Einschränkungen von Schwartz-Funktionen auf Kompakta sind sogar identisch mit solchen von Testfunktionen.

Lemma 5.4.
Sei $K \subseteq \mathbb{R}^{3N}$ eine kompakte Menge.

(i) Sei $v \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$. Dann existiert eine bzgl. der Norm $\|\cdot\|_{\mathcal{H}^1}$ gegen v konvergente Folge $(v_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ derart, dass für alle $n \in \mathbb{N}$ gilt $v_n|_K = v|_K$. Insbesondere ist $\mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N}) \subseteq \mathcal{H}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$.

(ii) Sei $v \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$. Dann existiert eine bzgl. der Norm $\|\cdot\|_{\mathcal{R}^1_I}$ gegen v konvergente Folge $(v_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ derart, dass für alle $n \in \mathbb{N}$ gilt $v_n|_K = v|_K$. Insbesondere ist $\mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N}) \subseteq \mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$.

Beweis. Wähle gemäß A.21 für alle $n \in \mathbb{N}$ Funktionen $f_n \in \mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^{3N})$ mit $f_n|_{\overline{B_n(0)}} = 1$. Setze nun $v_n := f_n \cdot v$ für alle $n \in \mathbb{N}$. Dann ist v_n für alle $n \in \mathbb{N}$ als Komposition beliebig oft differenzierbarer Funktionen beliebig oft differenzierbar und es ist

$$\operatorname{supp}(v_n) \;=\; \operatorname{supp}(v) \cap \operatorname{supp}(f_n) \subseteq \operatorname{supp}(f_n)$$

kompakt, also $v_n \in \mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^{3N})$.
Seien $i, j \in I$ mit $i \neq j$. Da die in A.21 definierten Funktion radialsymmetrisch sind, folgt für alle $n \in \mathbb{N}$:

$$v_n \circ \varphi_{i,j} \;=\; (v \cdot f_n) \circ \varphi_{i,j} \;=\; v \circ \varphi_{i,j} \cdot f_n \circ \varphi_{i,j} \;\overset{150}{=}\; v \circ \varphi_{i,j} \cdot f_n \;=\; -v \cdot f_n \;=\; -v_n$$

und folglich $v_n \in \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})$.
Es gilt für alle $n \in \mathbb{N}$:

$$v_n|_{B_n(0)} \;=\; (v \cdot f_n)|_{B_n(0)} \;=\; v|_{B_n(0)} \cdot f_n|_{B_n(0)} \;=\; v|_{B_n(0)} \cdot 1 \;=\; v|_{B_n(0)}$$

Ferner ist K kompakt, mithin existiert $m \in \mathbb{N}$ mit $K \subseteq B_m(0)$, und daher $v_n|_K = v|_K$ für alle $n \in \mathbb{N}_{\geq m}$.

Es bleibt noch die Konvergenz zu zeigen, dann folgt die Behauptung durch Betrachtung der Teilfolge $(v_{n+m})_{n\in\mathbb{N}}$.
Wegen $v, v_n \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N})$ folgt aus 1.10:

$$\begin{aligned}
&\lim_{n\to\infty} \|v - v_n\|_{\mathcal{R}_I^1} \\
=\ & \lim_{n\to\infty} \left(\|v - v_n\|_{\mathcal{H}^1}^2 + \sum_{\alpha\in I^*} \|D_\alpha v - D_\alpha v_n)\|_{\mathcal{H}^1}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\
=\ & \lim_{n\to\infty} \left(\|v - v_n\|_{\mathcal{L}^2}^2 + \sum_{k=1}^{N}\sum_{\gamma=1}^{3} \|\partial_{k,\gamma} v - \partial_{k,\gamma} v_n\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right. \\
& \qquad \left. + \sum_{\alpha\in I^*} \|D_\alpha v - D_\alpha v_n)\|_{\mathcal{L}^2}^2 + \sum_{k=1}^{N}\sum_{\gamma=1}^{3} \|\partial_{k,\gamma} D_\alpha v - \partial_{k,\gamma} D_\alpha v_n\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\
=\ & \left(\left(\lim_{n\to\infty} \|v - v_n\|_{\mathcal{L}^2}\right)^2 + \sum_{k=1}^{N}\sum_{\gamma=1}^{3} \left(\lim_{n\to\infty} \|\partial_{k,\gamma} v - \partial_{k,\gamma} v_n\|_{\mathcal{L}^2}\right)^2 \right. \\
& \left. + \sum_{\alpha\in I^*} \left(\lim_{n\to\infty} \|D_\alpha v - D_\alpha v_n\|_{\mathcal{L}^2}\right)^2 + \sum_{k=1}^{N}\sum_{\gamma=1}^{3} \left(\lim_{n\to\infty} \|\partial_{k,\gamma} D_\alpha v - \partial_{k,\gamma} D_\alpha v_n\|_{\mathcal{L}^2}\right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\
\overset{5}{=}\ & 0
\end{aligned}$$

Dies liefert unmittelbar (ii); (i) folgt dann aus der Ungleichung 45. □

Es folgt eine rein technische Hilfsaussage, die es ermöglicht, a und $\tilde{a}$ auf $\mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N}) \times \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$ in geschlossener Form ohne Grenzwertbildung anzugeben.

Lemma 5.5. (i) Seien $u \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ und $v \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N})$. Dann gilt:

$$a(u,v) = \int_{\mathbb{R}^{3N}} (Hu + \mu u)(x) v(x)\, dx \tag{71}$$

(ii) Seien $u \in \mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ und $v \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$. Dann gilt:

$$\tilde{a}(u,v) = a(u,v) + \sum_{\alpha\in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha (Hu + \mu u)(x) D_\alpha v(x)\, dx \tag{72}$$

Beweis. (i) Sei $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$. Nach 5.4 existieren eine Folge $(v_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ und $n_0 \in \mathbb{N}$ mit

$$\|v_n - v\|_{\mathcal{H}^1} < \min\left\{1, \frac{\epsilon}{\left(3N^{\frac{3}{2}} + \frac{1}{2} + \mu\right)\|u\|_{\mathcal{H}^1}}\right\} \tag{73}$$

$$v_n|_{\mathrm{supp}(u)} = v|_{\mathrm{supp}(u)} \tag{74}$$

für alle $n \in \mathbb{N}_{\geq n_0}$. Aus der Stetigkeit von a folgt dann für alle $n \in \mathbb{N}_{\geq n_0}$:

$$\left| a(u,v) - \int_{\mathbb{R}^{3N}} (Hu + \mu u)(x) v(x)\, dx \right| = \left| a(u,v) - \int_{\mathrm{supp}(u)} (Hu + \mu u)(x) v(x)\, dx \right|$$

$$
\begin{aligned}
&\stackrel{74}{=} \left| a(u,v) - \int_{\mathrm{supp}(u)} (Hu + \mu u)(x) v_n(x)\, dx \right| \\
&= |a(u,v) - a(u,v_n)| \\
&= |a(u, v - v_n)| \\
&\le \left(3N^{\frac{3}{2}} + \frac{1}{2} + \mu\right) \|u\|_{\mathcal{H}^1} \|v - v_n\|_{\mathcal{H}^1} \\
&\stackrel{73}{<} \epsilon
\end{aligned}
$$

Da ϵ beliebig war, folgt die Behauptung.
(ii) Dies folgt analog aus der Stetigkeit von $\tilde{a}$ mit einer gemäß 5.4 bzgl. der Norm $\|\cdot\|_{\mathcal{R}^1_I}$ konvergenten Folge $(v_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$. □

Nun kann eine erste Verbindung der Variationsprobleme 61 und 69 hergestellt werden: Es stellt sich heraus, dass die Lösung von 69 auch ein gewisses Teilproblem von 61 löst.

Lemma 5.6: [YSERENTANT Lemma 8].
Sei $u \in \mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ eine Lösung von 69. Dann gilt:

$$\forall v \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N}) \quad a(u, v + (-1)^{|I|}\Delta_I v) \;=\; \hat{b}(v + (-1)^{|I|}\Delta_I v) \tag{75}$$

Beweis. Seien $v \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$ und $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}, (b_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ mit

$$\lim_{n\to\infty} \|u - u_n\|_{\mathcal{R}^1_I} \;=\; 0 \;=\; \lim_{n\to\infty} \|b - b_n\|_{\mathcal{R}^{-1}}$$

Außerdem existieren nach 5.4 für alle $n \in \mathbb{N}$ Funktionen $v_n \in \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})$ mit

$$v_n|_{\mathrm{supp}(u_n)} \;=\; v|_{\mathrm{supp}(u_n)} \tag{76}$$

Für alle $n \in \mathbb{N}$ folgt mit 4.12 und $|I|$-facher partieller Integration:

$$
\begin{aligned}
& a(u_n, v + (-1)^{|I|}\Delta_I v) \\
=\;& a(u_n, v) + (-1)^{|I|} a(u_n, \Delta_I v) \\
\stackrel{71}{=}\;& a(u_n, v) + (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x) u_n(x) \Delta_I v(x)\, dx + (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \left(\mu u_n - \frac{1}{2}\Delta u_n\right)(x) \Delta_I v(x)\, dx \\
\stackrel{76}{=}\;& a(u_n, v) + (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x) u_n(x) \Delta_I v_n(x)\, dx + (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \left(\mu u_n - \frac{1}{2}\Delta u_n\right)(x) \Delta_I v_n(x)\, dx \\
\stackrel{54}{=}\;& a(u_n, v) + \sum_{\alpha\in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(V u_n)(x) D_\alpha v_n(x)\, dx \\
& + \sum_{\alpha\in I^*} (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \left(\mu u_n - \frac{1}{2}\Delta u_n\right)(x) D^2_\alpha v_n(x)\, dx \\
\stackrel{122}{=}\;& a(u_n, v) + \sum_{\alpha\in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(V u_n)(x) D_\alpha v_n(x)\, dx + \sum_{\alpha\in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha \left(\mu u_n - \frac{1}{2}\Delta u_n\right)(x) D_\alpha v_n(x)\, dx \\
=\;& a(u_n, v) + \sum_{\alpha\in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(H u_n + \mu u_n)(x) D_\alpha v_n(x)\, dx
\end{aligned}
$$

$$\begin{aligned}
&\overset{76}{=} \; a(u_n, v) + \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha (Hu_n + \mu u_n)(x) D_\alpha v(x) \; dx \\
&\overset{72}{=} \; \tilde{a}(u_n, v)
\end{aligned}$$

Aus der Stetigkeit von a bzgl. der Norm $\| \cdot \|_{\mathcal{H}^1}$ und der Ungleichung 45 folgt die Stetigkeit von a bzgl. der Norm $\| \cdot \|_{\mathcal{R}^1_I}$, also erhält man zusammen mit der Stetigkeit von $\tilde{a}$:

$$a(u, v + (-1)^{|I|} \Delta_I v) \;=\; \lim_{n \to \infty} a(u_n, v + (-1)^{|I|} \Delta_I v) \;=\; \lim_{n \to \infty} \tilde{a}(u_n, v) \;=\; \tilde{a}(u, v) \tag{77}$$

Betrachte nun die bilinearen Abbildungen

$$\begin{aligned}
\theta : \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N}) \times \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N}) &\longrightarrow \mathbb{R}, \quad (\eta, w) \longmapsto \int_{\mathbb{R}^{3N}} \eta(x) w(x) \; dx \\
\tilde{\theta} : \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N}) \times \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N}) &\longrightarrow \mathbb{R} \quad\; (\eta, w) \longmapsto \int_{\mathbb{R}^{3N}} \eta(x) w(x) \; dx + \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha \eta(x) D_\alpha w(x) \; dx
\end{aligned}$$

Wie die Beweise von 4.16(ii) und 5.2(ii) zeigen, gelten für alle $\eta, w \in \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})$

$$\begin{aligned}
\theta(\eta, w) &\leq \|\eta\|_{\mathcal{H}^{-1}} \|w\|_{\mathcal{H}^1} \overset{59,45}{\leq} \|\eta\|_{\mathcal{R}^{-1}_I} \|w\|_{\mathcal{R}^1_I} \\
\tilde{\theta}(\eta, w) &\leq \|\eta\|_{\mathcal{R}^{-1}_I} \|w\|_{\mathcal{R}^1_I}
\end{aligned}$$

also existieren nach 1.13 eindeutige stetige Fortsetzungen $\theta, \tilde{\theta} : \mathcal{R}^{-1}_I(\mathbb{R}^{3N}) \times \mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N}) \to \mathbb{R}$ und es gelten offensichtlich:

$$\forall w \in \mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N}) \qquad \theta(b, w) \;=\; \hat{b}(w) \tag{78}$$

$$\forall w \in \mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N}) \qquad \tilde{\theta}(b, w) \;=\; \tilde{b}(w) \tag{79}$$

Außerdem kann analog zu 5.5 geschlussfolgert werden:

$$\forall (\eta, w) \in \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N}) \times \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N}) \qquad \theta(\eta, w) \;=\; \int_{\mathbb{R}^{3N}} \eta(x) w(x) \; dx \tag{80}$$

$$\forall (\eta, w) \in \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N}) \times \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N}) \qquad \tilde{\theta}(\eta, w) \;=\; \int_{\mathbb{R}^{3N}} \eta(x) w(x) \; dx + \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha \eta(x) D_\alpha w(x) \; dx \tag{81}$$

Ferner liefert $|I|$-fache partielle Integration für alle $n \in \mathbb{N}$

$$\begin{aligned}
\theta(b_n, v + (-1)^{|I|} \Delta_I v) &\overset{80}{=} \int_{\mathbb{R}^{3N}} b_n(x)(v + (-1)^{|I|} \Delta_I v)(x) \; dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^{3N}} b_n(x) v(x) \; dx + \sum_{\alpha \in I^*} (-1)^{|I|} \int_{\mathbb{R}^{3N}} b_n(x) \cdot D^2_\alpha v(x) \; dx \\
&\overset{122}{=} \int_{\mathbb{R}^{3N}} b_n(x) v(x) \; dx + \sum_{\alpha \in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha b_n(x) \cdot D_\alpha v(x) \; dx \\
&\overset{81}{=} \tilde{\theta}(b_n, v)
\end{aligned}$$

und somit folgt:

$$\begin{aligned}
\hat{b}(v+(-1)^{|I|}\Delta_I v) &\overset{78}{=} \theta(b, v+(-1)^{|I|}\Delta_I v) \\
&= \lim_{n\to\infty} \theta(b_n, v+(-1)^{|I|}\Delta_I v) \\
&= \lim_{n\to\infty} \tilde{\theta}(b_n, v) \\
&= \tilde{\theta}(b, v) \\
&\overset{79}{=} \tilde{b}(v)
\end{aligned} \tag{82}$$

Insgesamt erhält man nun nach Wahl von u:

$$a(u, v+(-1)^{|I|}\Delta_I v) \overset{77}{=} \tilde{a}(u,v) = \tilde{b}(v) \overset{82}{=} \hat{b}(v+(-1)^{|I|}\Delta_I v)$$

□

Damit ist es gelungen, das Problem 69 in den Kontext von 61 einzubetten. Um nun sogar Gleichheit der Lösungen zu erhalten, muss noch mittels Fourier-Transformation eine Differentialgleichung auf dem Schwartz-Raum gelöst werden:

Lemma 5.7: [YSERENTANT Lemma 9].
Sei $\tilde{v} \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$. Dann existiert $v \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$ mit

$$\tilde{v} = v + (-1)^{|I|}\Delta_I v \tag{83}$$

Beweis. Setze

$$\hat{v} : \mathbb{R}^{3N} \longrightarrow \mathbb{C}, \ \xi \longmapsto \frac{1}{1+\prod_{l\in I}\|\xi_l\|_2^2}\mathcal{F}(\tilde{v})(\xi)$$

und bemerke, dass nach A.24 gilt $\hat{v} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$, weil

$$\forall \xi \in \mathbb{R}^{3N} \quad 1+\prod_{l\in I}\|\xi_l\|_2^2 \geq 1$$

Daher existiert $w := \mathcal{F}^{-1}(\hat{v}) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$. Es gilt für alle $\xi \in \mathbb{R}^{3N}$ nach 1.17:

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(\tilde{v})(\xi) &= \left(1+\prod_{l\in I}\|\xi_l\|_2^2\right)\mathcal{F}(w)(\xi) \\
&= \mathcal{F}(w)(\xi) + \prod_{l\in I}\left(\sum_{\alpha(l)=1}^{3}\xi_{l,\alpha(l)}^2\right)\mathcal{F}(w)(\xi) \\
&= \mathcal{F}(w)(\xi) + \sum_{\alpha\in I^*}\left(\prod_{l\in I}\xi_{l,\alpha(l)}^2\right)\mathcal{F}(w)(\xi) \\
&= \mathcal{F}(w)(\xi) + (-1)^{|I|}\sum_{\alpha\in I^*}\left(\mathrm{i}^{2|I|}\prod_{l\in I}\xi_{l,\alpha(l)}^2\right)\mathcal{F}(w)(\xi) \\
&\overset{7}{=} \mathcal{F}(w)(\xi) + (-1)^{|I|}\sum_{\alpha\in I^*}\mathcal{F}\left(\left(\prod_{l\in I}\partial_{l,\alpha(l)}^2\right)w\right)(\xi)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \mathcal{F}(w)(\xi) + (-1)^{|I|} \sum_{\alpha \in I^*} \mathcal{F}(D_\alpha^2 w)(\xi) \\
&= \mathcal{F}(w)(\xi) + (-1)^{|I|} \mathcal{F}\left(\sum_{\alpha \in I^*} D_\alpha^2 w\right)(\xi) \\
&= \mathcal{F}(w)(\xi) + (-1)^{|I|} \mathcal{F}(\Delta_I w)(\xi) \\
&= \mathcal{F}(w + (-1)^{|I|} \Delta_I w)(\xi)
\end{aligned}$$

woraus durch Anwendung von $\mathcal{F}^{-1}$ folgt:

$$\tilde{v} \;=\; w + (-1)^{|I|} \Delta_I w \tag{84}$$

Seien $j, k \in I$ mit $j \neq k$. Dann folgt mit A.24:

$$\begin{aligned}
& w \circ \varphi_{j,k} \;=\; -w \\
\overset{159}{\iff}\quad & \mathcal{F}(w) \circ \varphi_{j,k} \;=\; -\mathcal{F}(w) \\
\iff\quad & \forall \xi \in \mathbb{R}^{3N} \quad \frac{1}{1 + \prod\limits_{l \in I} \|\varphi_{j,k}(\xi_l)\|_2^2} (\mathcal{F}(\tilde{v}) \circ \varphi_{j,k})(\xi) \;=\; -\frac{1}{1 + \prod\limits_{l \in I} \|\varphi_{j,k}(\xi_l)\|_2^2} \mathcal{F}(\tilde{v})(\xi) \\
\iff\quad & \mathcal{F}(\tilde{v}) \circ \varphi_{j,k} \;=\; -\mathcal{F}(\tilde{v}) \\
\overset{159}{\iff}\quad & \tilde{v} \circ \varphi_{j,k} \;=\; -\tilde{v}
\end{aligned}$$

und die letzte Aussage ist wegen $\tilde{v} \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$ wahr, also:

$$w \circ \varphi_{j,k} \;=\; -w \tag{85}$$

Setze nun $v := \mathrm{Re}(w) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N})$. Dann folgen:

$$\tilde{v} \;=\; \mathrm{Re}(\tilde{v}) \;\overset{84}{=}\; \mathrm{Re}(w + (-1)^{|I|} \Delta_I w) \;=\; \mathrm{Re}(w) + (-1)^{|I|} \Delta_I \mathrm{Re}(w) \;=\; v + (-1)^{|I|} \Delta_I v$$

sowie

$$v \circ \varphi_{j,k} \;=\; \mathrm{Re}(w) \circ \varphi_{j,k} \;=\; \mathrm{Re}(w \circ \varphi_{j,k}) \;\overset{85}{=}\; \mathrm{Re}(-w) \;=\; -\mathrm{Re}(w) \;=\; -v$$

Insgesamt ist somit $v \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$ eine Lösung von 83. □

Damit wird nun gefolgert, dass unter geeigneten Voraussetzungen an μ und die rechte Seite b die Probleme 61 und 69 äquivalent sind. Insbesondere erbt das Problem 61 auch die Regularitätseigenschaften von 69.

Satz 5.8: [YSERENTANT Satz 4].
Seien $\mu \geq \frac{1}{4} + (217 + 88\sqrt{6})N^3 \geq \frac{1}{4} + 9N^3$ und $b \in \mathcal{R}_I^{-1}(\mathbb{R}^{3N})$. Weiter sei $u \in \mathcal{H}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$ die nach 4.17 existente und eindeutige Lösung des Variationsproblems

$$\forall v \in \mathcal{H}_I^1(\mathbb{R}^{3N}) \qquad a(u, v) \;=\; \hat{b}(v)$$

Dann ist $u \in \mathcal{R}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$ und es gilt:

$$\|u\|_{\mathcal{R}_I^1} \leq 4\|b\|_{\mathcal{R}_I^{-1}} \tag{86}$$

Beweis. Seien $v \in \mathcal{H}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$ und $\tilde{u} \in \mathcal{R}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$ die Lösung von 69. Da nach Definition $\mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ dicht in $\mathcal{H}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$ liegt und nach 5.4 gilt $\mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N}) \subseteq \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N}) \subseteq \mathcal{H}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$, liegt auch $\mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$ dicht in $\mathcal{H}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$. Somit existiert eine Folge $(\widetilde{v_n})_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ mit

$$\lim_{n\to\infty} \|v - \widetilde{v_n}\|_{\mathcal{H}^1} = 0$$

Ferner existiert nach 5.7 für jedes $n \in \mathbb{N}$ ein $v_n \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$ mit

$$\widetilde{v_n} = v_n + (-1)^{|I|}\Delta_I v_n$$

Es folgt:

$$\begin{aligned} a(\tilde{u}, v) &= \lim_{n\to\infty} a(\tilde{u}, \widetilde{v_n}) \\ &= \lim_{n\to\infty} a(\tilde{u}, v_n + (-1)^{|I|}\Delta_I v_n) \\ &\overset{75}{=} \lim_{n\to\infty} \hat{b}(v_n + (-1)^{|I|}\Delta_I v_n) \\ &= \lim_{n\to\infty} \hat{b}(\widetilde{v_n}) \\ &= \hat{b}(v) \end{aligned}$$

Aufgrund der Eindeutigkeit von u liefert dies $u = \tilde{u} \in \mathcal{R}_I^1(\mathbb{R}^{3N})$. Somit gilt 86 gemäß 70. □

Wählt man also den Verschiebungsparameter μ groß genug und ist $b \in \mathcal{R}_I^{-1}(\mathbb{R}^{3N})$, so sind die drei Probleme 60, 61 und 69 alle äquivalent, was insbesondere die gewünschte Regularität der Lösung liefert. Quantitativ ist dieses Ergebnis jedoch noch nicht optimal, denn zur Betrachtung der Eigenfunktionen ist $b = (\lambda + \mu)u$ zu wählen, sodass die rechte Seite von 86 ebenfalls größer wird, je weiter μ wächst. Die Bedingung $\mu \propto N^3$, die benötigt wird, um die Regularität des Problems zu erzwingen, wirkt sich somit äußerst ungünstig auf die Qualität dieser Abschätzung aus. Erstrebenswert wäre hingegen eine Abschätzung, die weitestgehend unabhängig von der Elektronenzahl Gültigkeit hat. Diesem Problem widmet sich der folgende Abschnitt. Der für den Beweis von 5.8 betriebene Aufwand ist aber nicht umsonst, weil die dort gebrauchten Beweismethoden größtenteils im nächsten Abschnitt wiederverwendet werden können.

5.2 Hoch- und niedrigfrequente Lösungsanteile

Die Grundidee für ein verbessertes Regularitätsresultat ist die Zerlegung der Ansatzräume in je zwei orthogonale Teilräume, die die niedrig- bzw. hochfrequenten Anteile der Funktionen enthalten. Es stellt sich dabei heraus, dass die niedrigfrequenten Anteile von Natur aus hinreichend glatt sind, während im hochfrequenten Bereich zumindest die Lösungen eines bestimmten Variationsproblems die gewünschten Differenzierbarkeitseigenschaften erfüllen.

Die Unterteilung in niedrig- und hochfrequente Funktionen geschieht dabei anhand einer zunächst willkürlich gewählten Grenzfrequenz Ω. Später muss Ω problemabhängig angepasst werden. Der Frequenzbegriff kann durch die Fourier-Transformation beschrieben werden. Die Fourier-Transformierte einer Funktion $v \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N})$ nimmt für solche Frequenzen große Beträge an, die das Oszillationsverhalten von v gut beschreiben. Zur Definition der Begriffe niedrig- und hochfrequent bietet sich also eine geeignete Wahl des Trägers von $\mathcal{F}(v)$ an.

Definition 5.9: *(Hoch- und niedrigfrequente Funktionen).*
Es seien $\Omega \in \mathbb{R}_{>0}$ und

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{I,l}(\mathbb{R}^{3N}) &:= \{v \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N}) \mid \operatorname{supp}(\mathcal{F}(v)) \subseteq \overline{B_\Omega(0)}\} \\ \mathcal{S}_{I,h}(\mathbb{R}^{3N}) &:= \{v \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N}) \mid \operatorname{supp}(\mathcal{F}(v)) \subseteq \mathbb{R}^{3N} \setminus B_\Omega(0)\} \end{aligned}$$

die Räume der *niedrig-* bzw. *hochfrequenten* antisymmetrischen Schwartz-Funktionen.
Weiter seien $\mathcal{H}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})$ und $\mathcal{R}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})$ die Abschlüsse von $\mathcal{S}_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})$ in $\mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ bzgl. der Normen $\|\cdot\|_{\mathcal{H}^1}$ bzw. $\|\cdot\|_{\mathcal{R}^1_I}$ sowie $\mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$ und $\mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$ die entsprechenden Abschlüsse von $\mathcal{S}_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$.

Im Sinne dieser Definition werden also alle solche Frequenzen als niedrig betrachtet, deren euklidische Norm nicht größer als Ω ist.
Es soll nun gezeigt werden, dass alle Funktionen der Räume $\mathcal{H}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ und $\mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ additiv in jeweils eindeutige niedrig- und hochfrequente Anteile zerfallen. Dies ermöglicht die gesonderte Betrachtung der niedrig- und hochfrequenten Lösungsanteile des zu untersuchenden Variationsproblems 61.

Lemma 5.10: [YSERENTANT (5.3)].
Es gelten:

(i)
$$\mathcal{H}^1_I(\mathbb{R}^{3N}) = \mathcal{H}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N}) \oplus \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N}) \tag{87}$$

(ii)
$$\mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N}) = \mathcal{R}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N}) \oplus \mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N}) \tag{88}$$

Diese Zerlegungen sind orthogonal bzgl. der Skalarprodukte $\langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathcal{H}^1}$ bzw. $\langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathcal{R}^1_I}$.

Beweis. (i) Setze für alle $\mathcal{F}(u), \mathcal{F}(v) \in \mathcal{F}(\mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N}))$

$$\langle \mathcal{F}(u), \mathcal{F}(v)\rangle_{\mathcal{F}} := \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1 + \|\xi\|_2^2)\mathcal{F}(u)(\xi)\overline{\mathcal{F}(v)(\xi)}\, d\xi$$

Dann gilt für alle $u, v \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N})$ nach 1.17:

$$\begin{aligned} \langle u, v\rangle_{\mathcal{H}^1} &= \int_{\mathbb{R}^{3N}} u(x)v(x)\, dx + \int_{\mathbb{R}^{3N}} \langle \nabla u(x), \nabla v(x)\rangle_2\, dx \\ &= \int_{\mathbb{R}^{3N}} u(x)v(x)\, dx + \sum_{k=1}^{N}\sum_{\gamma=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \partial_{k,\gamma}u(x)\partial_{k,\gamma}v(x)\, dx \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&\overset{9}{=} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \mathcal{F}(u)(\xi)\overline{\mathcal{F}(v)(\xi)}\, d\xi + \sum_{k=1}^{N}\sum_{\gamma=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \mathcal{F}(\partial_{k,\gamma}u)(\xi)\overline{\mathcal{F}(\partial_{k,\gamma}v)(\xi)}\, d\xi \\
&\overset{7}{=} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \mathcal{F}(u)(\xi)\overline{\mathcal{F}(v)(\xi)}\, d\xi + \sum_{k=1}^{N}\sum_{\gamma=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \mathrm{i}\bar{\mathrm{i}}\xi_{k,\gamma}\overline{\xi_{k,\gamma}}\mathcal{F}(u)(\xi)\overline{\mathcal{F}(v)(\xi)}\, d\xi \\
&= \int_{\mathbb{R}^{3N}} \left(1+\sum_{k=1}^{N}\sum_{\gamma=1}^{3}|\xi_{k,\gamma}|^2\right)\mathcal{F}(u)(\xi)\overline{\mathcal{F}(v)(\xi)}\, d\xi \\
&= \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2)\mathcal{F}(u)(\xi)\overline{\mathcal{F}(v)(\xi)}\, d\xi \\
&= \langle \mathcal{F}(u), \mathcal{F}(v)\rangle_{\mathcal{F}}
\end{aligned}
$$

Insbesondere ist $\langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathcal{F}}$ ein Skalarprodukt auf $\mathcal{F}(\mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N}))$ und induziert somit die durch

$$
\forall u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N}) \quad \|\mathcal{F}(u)\|_{\mathcal{F}} := \langle \mathcal{F}(u), \mathcal{F}(u)\rangle_{\mathcal{F}}^{\frac{1}{2}} = \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2)|\mathcal{F}(u)(\xi)|^2\, d\xi\right)^{\frac{1}{2}}
$$

gegebene Norm. Die obige Rechnung impliziert

$$
\forall u \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N}) \qquad \|u\|_{\mathcal{H}^1} = \|\mathcal{F}(u)\|_{\mathcal{F}} \tag{89}
$$

Wähle nun gemäß A.21 radialsymmetrische Abschneidefunktionen $f_{l,n}, f_{h,n} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ für alle $n \in \mathbb{N}$ mit [13]

$$
\begin{array}{lllllll}
\operatorname{supp}(f_{h,n}) = \overline{B_{\Omega+\frac{1}{n}}(0)} & & f_{h,n}|_{\overline{B_\Omega(0)}} = 1 & & \forall x \in \mathbb{R}^{3N} & |f_{h,n}(x)| \leq 1 \\
\operatorname{supp}(f_{l,n}) = \overline{B_\Omega(0)} & & f_{l,n}|_{\overline{B_{\Omega-\frac{1}{n}}(0)}} = 1 & & \forall x \in \mathbb{R}^{3N} & |f_{l,n}(x)| \leq 1
\end{array}
$$

Sei $u \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$ und setze

$$
\begin{array}{ll}
v_{l,n} := f_{l,n}\cdot\mathcal{F}(u) & \qquad v_{h,n} := (1-f_{h,n})\cdot\mathcal{F}(u) \\
u_{l,n} := \mathcal{F}^{-1}(v_{l,n}) & \qquad u_{h,n} := \mathcal{F}^{-1}(v_{h,n})
\end{array}
$$

Es ist zu zeigen, dass sich u in die Summe der Grenzwerte der Folgen $(u_{l,n})_{n\in\mathbb{N}}$ und $(u_{h,n})_{n\in\mathbb{N}}$ zerlegen lässt, dass diese in $\mathcal{H}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})$ bzw. $\mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$ liegen, und, dass diese Zerlegung eindeutig ist.
Nach 1.18 gilt für alle $\xi \in \mathbb{R}^{3N}$:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{F}(u_{l,n})(-\xi) &= v_{l,n}(-\xi) \\
&= f_{l,n}(-\xi)\mathcal{F}(u)(-\xi) \\
&= f_{l,n}(\xi)\mathcal{F}(u)(-\xi) \\
&\overset{11}{=} f_{l,n}(\xi)\overline{\mathcal{F}(u)(\xi)} \\
&= \overline{f_{l,n}(\xi)\mathcal{F}(u)(\xi)} \\
&= \overline{v_{l,n}(\xi)}
\end{aligned}
$$

[13] Zur Vereinfachung nehme $\Omega > 1$ an. Ansonsten müssen Teilfolgen $f_{l,kn}$ für geeignetes $k \in \mathbb{N}$ betrachtet werden.

$$= \overline{\mathcal{F}(u_{l,n})(\xi)}$$

und, wiederum laut 1.18, damit $u_{l,n} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N})$.
Seien weiter $j,k \in I$ mit $j \neq k$. Dann folgt mit A.24:

$$\begin{aligned} v_{l,n} \circ \varphi_{j,k} &= (f_{l,n} \cdot \mathcal{F}(u)) \circ \varphi_{j,k} \\ &= f_{l,n} \circ \varphi_{j,k} \cdot \mathcal{F}(u) \circ \varphi_{j,k} \\ &\overset{150}{=} f_{l,n} \cdot \mathcal{F}(u) \circ \varphi_{j,k} \\ &\overset{159}{=} f_{l,n} \cdot (-\mathcal{F}(u)) \\ &= -f_{l,n} \cdot \mathcal{F}(u) \\ &= -v_{l,n} \end{aligned}$$

und ebenfalls mit A.24 liefert dies

$$u_{l,n} \circ \varphi_{j,k} \;=\; \mathcal{F}^{-1}(v_{l,n}) \circ \varphi_{j,k} \;\overset{159}{=}\; -\mathcal{F}^{-1}(v_{l,n}) \;=\; -u_{l,n}$$

Insgesamt gilt also $u_{l,n} \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$. Da mit $f_{h,n}$ auch $1 - f_{h,n}$ radialsymmetrisch ist, folgt analog $u_{h,n} \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$.
Ferner gelten:

$$\begin{aligned} \operatorname{supp}(\mathcal{F}(u_{l,n})) = \operatorname{supp}(v_{l,n}) = \operatorname{supp}(f_{l,n} \cdot \mathcal{F}(u)) \subseteq \operatorname{supp}(f_{l,n}) = \overline{B_\Omega(0)} \\ \operatorname{supp}(\mathcal{F}(u_{h,n})) = \operatorname{supp}(v_{h,n}) = \operatorname{supp}((1 - f_{h,n}) \cdot \mathcal{F}(u)) \subseteq \operatorname{supp}(1 - f_{h,n}) \subseteq \mathbb{R}^{3N} \setminus B_\Omega(0) \end{aligned}$$

Also $u_{l,n} \in \mathcal{S}_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})$ und $u_{h,n} \in \mathcal{S}_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$.
Falls $\mathcal{F}(u)|_{\overline{B_{\Omega+1}(0)}} = 0$, gelten $v_{l,n} = 0$ und $\mathcal{F}(u) = v_{h,n}$ für alle $n \in \mathbb{N}$. Dann folgt für alle $n \in \mathbb{N}$:

$$u \;=\; \mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(u)) \;=\; \mathcal{F}^{-1}(v_{h,n}) \;=\; u_{h,n} \in \mathcal{S}_{I,h}(\mathbb{R}^{3N}) \subseteq \mathcal{H}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N}) + \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$$

Andernfalls sei nun $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$ und setze

$$\begin{aligned} C_1 &:= (1 + (\Omega + 1)^2) \max_{\xi \in \overline{B_{\Omega+1}(0)}} |\mathcal{F}(u)(\xi)|^2 \in \mathbb{R}_{>0} \\ C_2 &:= \frac{\pi^{\frac{3N}{2}}}{\Gamma\left(\frac{3N}{2} + 1\right)} \in \mathbb{R}_{>0} \\ \tilde{\epsilon} &:= \frac{\epsilon^2}{8 C_1 C_2} \in \mathbb{R}_{>0} \end{aligned}$$

Wegen

$$\lim_{n\to\infty} \left(\Omega + \frac{1}{n}\right)^{3N} \;=\; \left(\lim_{n\to\infty} \Omega + \frac{1}{n}\right)^{3N} \;=\; \Omega^{3N} \;=\; \left(\lim_{n\to\infty} \Omega - \frac{1}{n}\right)^{3N} \;=\; \lim_{n\to\infty} \left(\Omega - \frac{1}{n}\right)^{3N}$$

und der vorliegenden Monotonie der Folgen existiert $n_0 \in \mathbb{N}$ mit

$$\forall n \in \mathbb{N}_{\geq n_0} \qquad \left(\Omega + \frac{1}{n}\right)^{3N} < \Omega^{3N} + \tilde{\epsilon} \tag{90}$$

$$\forall n \in \mathbb{N}_{\geq n_0} \qquad \left(\Omega - \frac{1}{n}\right)^{3N} > \Omega^{3N} - \tilde{\epsilon} \tag{91}$$

Dann folgt für alle $n \in \mathbb{N}_{\geq n_0}$ (wobei λ_{3N} das $3N$-dimensionale Lebesgue-Maß bezeichne):

$$\begin{aligned}
\|\mathcal{F}(u) - (v_{l,n} + v_{h,n})\|_{\mathcal{F}}^2 &= \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1 + \|\xi\|_2^2)\, |(\mathcal{F}(u) - v_{l,n} - v_{h,n})(\xi)|^2 \; d\xi \\
&= \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1 + \|\xi\|_2^2)\, |\mathcal{F}(u)(\xi)(f_{h,n} - f_{l,n})(\xi)|^2 \; d\xi \\
&= \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1 + \|\xi\|_2^2)\, |\mathcal{F}(u)(\xi)|^2 \, |(f_{h,n} - f_{l,n})(\xi)|^2 \; d\xi \\
&= \int_{\overline{B_{\Omega+\frac{1}{n}}(0)} \setminus \overline{B_{\Omega-\frac{1}{n}}(0)}} (1 + \|\xi\|_2^2)\, |\mathcal{F}(u)(\xi)|^2 \, |(f_{h,n} - f_{l,n})(\xi)|^2 \; d\xi \\
&\leq \int_{\overline{B_{\Omega+\frac{1}{n}}(0)} \setminus \overline{B_{\Omega-\frac{1}{n}}(0)}} (1 + \|\xi\|_2^2)\, |\mathcal{F}(u)(\xi)|^2 \; d\xi \\
&\leq \int_{\overline{B_{\Omega+\frac{1}{n}}(0)} \setminus \overline{B_{\Omega-\frac{1}{n}}(0)}} C_1 \; d\xi \\
&= C_1 \lambda_{3N}(\overline{B_{\Omega+\frac{1}{n}}(0)} \setminus \overline{B_{\Omega-\frac{1}{n}}(0)}) \\
&= C_1 (\lambda_{3N}(\overline{B_{\Omega+\frac{1}{n}}(0)}) - \lambda_{3N}(\overline{B_{\Omega-\frac{1}{n}}(0)})) \\
&\overset{119}{=} C_1 C_2 \left(\left(\Omega + \frac{1}{n}\right)^{3N} - \left(\Omega - \frac{1}{n}\right)^{3N} \right) \\
&\overset{90,91}{<} C_1 C_2 (\Omega^{3N} + \tilde{\epsilon} - (\Omega^{3N} - \tilde{\epsilon})) \\
&= 2 C_1 C_2 \tilde{\epsilon} \\
&= \frac{\epsilon^2}{4}
\end{aligned}$$

Also:

$$\|\mathcal{F}(u) - (v_{l,n} + v_{h,n})\|_{\mathcal{F}} < \frac{\epsilon}{2} \tag{92}$$

sowie analog für alle $m, n \in \mathbb{N}_{\geq n_0}$

$$\|v_{l,n} - v_{l,m}\|_{\mathcal{F}} = \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} (1 + \|\xi\|_2^2)\, |\mathcal{F}(u)(\xi) \cdot (f_{l,n} - f_{l,m})(\xi)|^2 \; d\xi \right)^{\frac{1}{2}} \overset{91}{<} \frac{\epsilon}{2} \tag{93}$$

$$\|v_{h,n} - v_{h,m}\|_{\mathcal{F}} = \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} (1 + \|\xi\|_2^2)\, |\mathcal{F}(u)(\xi) \cdot (f_{h,m} - f_{h,n})(\xi)|^2 \; d\xi \right)^{\frac{1}{2}} \overset{90}{<} \frac{\epsilon}{2} \tag{94}$$

Damit folgt für alle $m, n \in \mathbb{N}_{\geq n_0}$:

$$\begin{aligned}
\|u_{l,n} - u_{l,m}\|_{\mathcal{H}^1} &\overset{89}{=} \|\mathcal{F}(u_{l,n} - u_{l,m})\|_{\mathcal{F}} = \|v_{l,n} - v_{l,m}\|_{\mathcal{F}} \overset{93}{<} \frac{\epsilon}{2} < \epsilon \\
\|u_{h,n} - u_{h,m}\|_{\mathcal{H}^1} &\overset{89}{=} \|\mathcal{F}(u_{h,n} - u_{h,m})\|_{\mathcal{F}} = \|v_{h,n} - v_{h,m}\|_{\mathcal{F}} \overset{94}{<} \frac{\epsilon}{2} < \epsilon
\end{aligned}$$

Folglich sind $(u_{l,n})_{n\in\mathbb{N}}$ und $(u_{h,n})_{n\in\mathbb{N}}$ Cauchy-Folgen in $\mathcal{H}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})$ bzw. $\mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$. Aufgrund der Abgeschlossenheit dieser Räume existieren dann $u_l \in \mathcal{H}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})$ und $u_h \in \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$ sowie $n_1 \in \mathbb{N}$ mit

$$\forall n \in \mathbb{N}_{\geq n_1} \quad \max\{\|u_{l,n} - u_l\|_{\mathcal{H}^1}, \|u_{h,n} - u_h\|_{\mathcal{H}^1}\} \ < \ \frac{\epsilon}{4} \tag{95}$$

Es folgt für alle $n \in \mathbb{N}$ mit $n \geq \max\{n_0, n_1\}$:

$$\begin{aligned}
\|u - (u_l + u_h)\|_{\mathcal{H}^1} &= \|u - (u_{l,n} + u_{h,n}) + (u_{l,n} - u_l) + (u_{h,n} - u_h)\|_{\mathcal{H}^1} \\
&\leq \|u - (u_{l,n} + u_{h,n})\|_{\mathcal{H}^1} + \|u_{l,n} - u_l\|_{\mathcal{H}^1} + \|u_{h,n} - u_h\|_{\mathcal{H}^1} \\
&\overset{89}{=} \|\mathcal{F}(u - (u_{l,n} + u_{h,n}))\|_{\mathcal{F}} + \|u_{l,n} - u_l\|_{\mathcal{H}^1} + \|u_{h,n} - u_h\|_{\mathcal{H}^1} \\
&= \|\mathcal{F}(u) - (v_{l,n} + v_{h,n})\|_{\mathcal{F}} + \|u_{l,n} - u_l\|_{\mathcal{H}^1} + \|u_{h,n} - u_h\|_{\mathcal{H}^1} \\
&\overset{92,95}{=} \frac{\epsilon}{2} + \frac{\epsilon}{4} + \frac{\epsilon}{4} \\
&= \epsilon
\end{aligned}$$

Da ϵ beliebig war, ergibt sich $u = u_l + u_h \in \mathcal{H}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N}) + \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$.
Nun seien ferner $w_l \in \mathcal{H}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})$ und $w_h \in \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$ sowie $(w_{l,n})_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{S}_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ und $(w_{h,n})_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{S}_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ mit

$$\lim_{n\to\infty} \|w_l - w_{l,n}\|_{\mathcal{H}^1} \ = \ 0 \ = \ \lim_{n\to\infty} \|w_h - w_{h,n}\|_{\mathcal{H}^1}$$

so folgt aufgrund der Stetigkeit von Skalarprodukten bzgl. der von ihnen erzeugten Normen:

$$\begin{aligned}
\langle w_l, w_h\rangle_{\mathcal{H}^1} &= \lim_{n\to\infty} \langle w_{l,n}, w_{h,n}\rangle_{\mathcal{H}^1} \\
&= \lim_{n\to\infty} \langle \mathcal{F}(w_{l,n}), \mathcal{F}(w_{h,n})\rangle_{\mathcal{F}} \\
&= \lim_{n\to\infty} \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1 + \|\xi\|_2^2)\mathcal{F}(w_{l,n})(\xi)\overline{\mathcal{F}(w_{h,n})(\xi)}\, d\xi \\
&= 0
\end{aligned}$$

Also ist die Zerlegung $\mathcal{H}^1$-orthogonal. Insgesamt folgt:

$$\mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N}) \subseteq \mathcal{H}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N}) + \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N}) = \mathcal{H}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N}) \oplus \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$$

Da $\mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N}) \subseteq \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N}) \subseteq \mathcal{H}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ und $\mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})$ bzgl. der $\mathcal{H}^1$-Norm dicht in $\mathcal{H}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ liegt, ist $\mathcal{H}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ der Abschluss von $\mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$ bzgl. der $\mathcal{H}^1$-Norm. Mit der Abgeschlossenheit von $\mathcal{H}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N}) \oplus \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$ liefert dies:

$$\mathcal{H}^1_I(\mathbb{R}^{3N}) \subseteq \mathcal{H}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N}) \oplus \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$$

und die umgekehrte Inklusion ist trivial.
(ii) Für alle $u, v \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N})$ gilt nach (i) und 1.17:

$$\langle u, v\rangle_{\mathcal{R}^1_I} \ = \ \langle u, v\rangle_{\mathcal{H}^1} + \sum_{\alpha\in I^*} \langle D_\alpha u, D_\alpha v\rangle_{\mathcal{H}^1}$$

$$
\begin{aligned}
&\stackrel{\text{(i)}}{=} \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2)\mathcal{F}(u)(\xi)\overline{\mathcal{F}(v)(\xi)}\, d\xi + \sum_{\alpha\in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2)\mathcal{F}(D_\alpha u)(\xi)\overline{\mathcal{F}(D_\alpha v)(\xi)}\, d\xi \\
&\stackrel{7}{=} \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2)\mathcal{F}(u)(\xi)\overline{\mathcal{F}(v)(\xi)}\, d\xi \\
&\quad + \sum_{\alpha\in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2) \mathrm{i}^{|I|} \left(\prod_{k\in I} \xi_{k,\alpha(k)}\right) \mathcal{F}(u)(\xi) \overline{\mathrm{i}^{|I|} \left(\prod_{k\in I} \xi_{k,\alpha(k)}\right) \mathcal{F}(v)(\xi)}\, d\xi \\
&= \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2)\mathcal{F}(u)(\xi)\overline{\mathcal{F}(v)(\xi)}\, d\xi \\
&\quad + \sum_{\alpha\in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2) \left(\prod_{k\in I} |\xi_{k,\alpha(k)}|^2\right) \mathcal{F}(u)(\xi)\overline{\mathcal{F}(v)(\xi)}\, d\xi \\
&= \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2) \left(1 + \sum_{\alpha\in I^*} \left(\prod_{k\in I} |\xi_{k,\alpha(k)}|^2\right)\right) \mathcal{F}(u)(\xi)\overline{\mathcal{F}(v)(\xi)}\, d\xi \\
&= \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2) \left(1 + \prod_{k\in I} \|\xi_k\|_2^2\right) \mathcal{F}(u)(\xi)\overline{\mathcal{F}(v)(\xi)}\, d\xi
\end{aligned}
$$

Definiert man nun

$$
\begin{aligned}
\langle \mathcal{F}(u), \mathcal{F}(v)\rangle_{\mathcal{F}} &:= \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2) \left(1 + \left(\prod_{k\in I} \|\xi_k\|_2^2\right)\right) \mathcal{F}(u)(\xi)\overline{\mathcal{F}(v)(\xi)}\, d\xi \\
\|\mathcal{F}(u)\|_{\mathcal{F}} &:= \langle \mathcal{F}(u), \mathcal{F}(u)\rangle_{\mathcal{F}}^{\frac{1}{2}} \\
C_1 &:= (1+(\Omega+1)^2)(1+(\Omega+1)^{2|I|}) \max_{\xi\in \overline{B_{\Omega+1}(0)}} |\mathcal{F}(u)(\xi)|^2
\end{aligned}
$$

so folgt die Behauptung analog zu (i), weil für alle $\xi \in \overline{B_{\Omega+1}(0)}$ gilt:

$$
1+\prod_{k\in I} \|\xi_k\|_2^2 \;\le\; 1+\prod_{k\in I} \|\xi\|_2^2 \;\le\; 1+\prod_{k\in I} (\Omega+1)^2 \;=\; 1+(\Omega+1)^{2|I|}
$$

□

Bemerkung 5.11 *(Fourier-transformierte Norm)*: Wie im Beweis gezeigt wurde, existiert für die $\mathcal{R}_I^1$-Norm die folgende Charakterisierung mittels Fourier-Transformation:

$$
\forall u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N}) \quad \|u\|_{\mathcal{R}_I^1} \;=\; \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2) \left(1+\prod_{k\in I} \|\xi_k\|_2^2\right) |\mathcal{F}(u)(\xi)|^2\, d\xi\right)^{\frac{1}{2}} \tag{96}
$$

Nachdem nun die direkte Zerlegung der Ansatzräume sichergestellt ist, können niedrig- und hochfrequente Anteile jeweils einzeln untersucht werden. Den schwierigeren Teil stellen die hochfrequenten Funktionen dar, die zuerst betrachtet werden. Als technische Hilfsmittel bedarf es zunächst zweier Normungleichungen:

Lemma 5.12: [YSERENTANT Lemma 10].

(i) Sei $u_h \in \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$. Dann gilt:

$$\|u_h\|_{\mathcal{L}^2} \leq \frac{1}{\Omega}|u_h|_{\mathcal{H}^1} \tag{97}$$

(ii) Sei $u_h \in \mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$. Dann gilt:

$$|u_h|_{\mathcal{L}^2_I} \leq \frac{1}{\Omega}|u_h|_{\mathcal{R}^1_I} \tag{98}$$

Beweis. (i) Nach Definition existiert eine Folge $(u_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{S}_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ mit

$$\lim_{n\to\infty} \|u_h - u_n\|_{\mathcal{H}^1} = 0 \overset{1,2}{\Longrightarrow} \lim_{n\to\infty} \|u_h - u_n\|_{\mathcal{L}^2} = 0 = \lim_{n\to\infty} |u_h - u_n|_{\mathcal{H}^1}$$

Weiter gilt für alle $n \in \mathbb{N}$ nach 1.17:

$$\begin{aligned}
|u_n|_{\mathcal{H}^1} &= \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla u_n(x)\|_2^2 \, dx\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\sum_{k=1}^{N}\sum_{\gamma=1}^{3} \|\partial_{k,\gamma} u_n\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{10}{=} \left(\sum_{k=1}^{N}\sum_{\gamma=1}^{3} \|\mathcal{F}(\partial_{k,\gamma} u_n)\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\sum_{k=1}^{N}\sum_{\gamma=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^{3N}} |\mathcal{F}(\partial_{k,\gamma} u_n)(\xi)|^2 \, d\xi\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{7}{=} \left(\sum_{k=1}^{N}\sum_{\gamma=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^{3N}} |\mathrm{i}\xi_{k,\gamma}\mathcal{F}(u_n)(\xi)|^2 \, d\xi\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\sum_{k=1}^{N}\sum_{\gamma=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^{3N}} |\xi_{k,\gamma}|^2|\mathcal{F}(u_n)(\xi)|^2 \, d\xi\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\xi\|_2^2|\mathcal{F}(u_n)(\xi)|^2 \, d\xi\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}\setminus\overline{B_\Omega(0)}} \|\xi\|_2^2|\mathcal{F}(u_n)(\xi)|^2 \, d\xi\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\geq \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}\setminus\overline{B_\Omega(0)}} \Omega^2|\mathcal{F}(u_n)(\xi)|^2 \, d\xi\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \Omega\left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} |\mathcal{F}(u_n)(\xi)|^2 \, d\xi\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \Omega\|\mathcal{F}(u_n)\|_{\mathcal{L}^2} \\
&\overset{10}{=} \Omega\|u_n\|_{\mathcal{L}^2}
\end{aligned}$$

und es folgt nach Wahl von $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}$:

$$\|u_h\|_{\mathcal{L}^2} = \lim_{n\to\infty} \|u_n\|_{\mathcal{L}^2} \leq \lim_{n\to\infty} \frac{1}{\Omega}|u_n|_{\mathcal{H}^1} = \frac{1}{\Omega}|u_h|_{\mathcal{H}^1}$$

(ii) Nach Definition existiert eine Folge $(u_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{S}_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$

$$\lim_{n\to\infty} \|u_h - u_n\|_{\mathcal{R}_I^1} = 0 \overset{41,42}{\Longrightarrow} \lim_{n\to\infty} |u_h - u_n|_{\mathcal{L}_I^2} = 0 = \lim_{n\to\infty} |u_h - u_n|_{\mathcal{R}_I^1}$$

Für alle $n \in \mathbb{N}$ gilt nach 1.17 für alle $\alpha \in I^*$ und alle $\xi \in \overline{B_\Omega(0)}$:

$$\mathcal{F}(D_\alpha u_n)(\xi) = \mathcal{F}\left(\left(\prod_{k\in I} \partial_{k,\alpha(k)}\right) u_n\right)(\xi) \overset{7}{=} \mathrm{i}^{|I|} \left(\prod_{k\in I} \xi_{k,\alpha(k)}\right) \mathcal{F}(u_n)(\xi) = 0$$

also ist auch $D_\alpha u_n \in \mathcal{S}_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$, und nach (i) folgt nun mit der Monotonie der Wurzelfunktion:

$$\begin{aligned}
|u_h|_{\mathcal{L}_I^2} &= \lim_{n\to\infty} |u_n|_{\mathcal{L}_I^2} \\
&= \lim_{n\to\infty} \left(\sum_{\alpha\in I^*} \|D_\alpha u_n\|_{\mathcal{L}^2}^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{(i)}{\leq} \lim_{n\to\infty} \left(\sum_{\alpha\in I^*} \frac{1}{\Omega^2}|D_\alpha u_n|_{\mathcal{H}^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \frac{1}{\Omega} \lim_{n\to\infty} |u_n|_{\mathcal{R}_I^1} \\
&= \frac{1}{\Omega}|u_h|_{\mathcal{R}_I^1}
\end{aligned}$$

□

Es wird nun ein geeignetes Teilproblem des Variationsproblems 61 auf dem hochfrequenten Anteil des Sobolev-Raums betrachtet. Bei geeigneter Wahl der rechten Seiten kann der hochfrequente Anteil der Lösung von 61, insbesondere der hochfrequente Anteil der Eigenfunktionen, als Lösung eines solchen hochfrequenten Problems aufgefasst werden. Um die Methoden aus dem vorherigen Abschnitt anwenden zu können, wird außerdem ein hochfrequentes Teilproblem des Variationsproblems 69 hinzugezogen. Die rechten Seiten der beiden neuen Variationsgleichungen werden wie gewohnt zunächst für Testfunktionen definiert und dann stetig fortgesetzt.

Definition 5.13.

(i) Für alle $u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N})$ und $v \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ und alle $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}, (v_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ mit

$$\lim_{n\to\infty} \|u - u_n\|_{\mathcal{L}^2} = 0 = \lim_{n\to\infty} \|v - v_n\|_{\mathcal{H}^1}$$

setze

$$\begin{aligned}\forall n \in \mathbb{N} \quad \theta(u_n, v_n) &:= \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x) u_n(x) v_n(x)\, dx \\ \theta(u, v) &:= \lim_{n\to\infty} \theta(u_n, v_n)\end{aligned}$$

(ii) Für alle $u \in \mathcal{L}^2_I(\mathbb{R}^{3N})$ und $v \in \mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ und alle $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}, (v_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ mit

$$\lim_{n\to\infty} \|u - u_n\|_{\mathcal{L}^2_I} \quad = \quad 0 \quad = \quad \lim_{n\to\infty} \|v - v_n\|_{\mathcal{R}^1_I}$$

setze

$$\begin{aligned}\forall n \in \mathbb{N} \quad \tilde\theta(u_n, v_n) &:= \theta(u_n, v_n) + \sum_{\alpha\in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(V \cdot u_n)(x) D_\alpha v_n(x)\, dx \\ \tilde\theta(u, v) &:= \lim_{n\to\infty} \tilde\theta(u_n, v_n)\end{aligned}$$

(iii) Es sei im Folgenden stets $b_h \in \mathcal{L}^2_I(\mathbb{R}^{3N}) \subseteq \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N})$. Setze ferner

$$\begin{aligned}\forall v \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \quad & \widehat{b_h}(v) := \theta(b_h, v) \\ \forall v \in \mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N}) \quad & \widetilde{b_h}(v) := \tilde\theta(b_h, v) \\ \|b_h\|_h &:= \sup_{v_h \in \mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})\setminus\{0\}} \frac{|\widetilde{b_h}(v_h)|}{\|v_h\|_{\mathcal{R}^1_I}}\end{aligned}$$

Wiederum ist zunächst die Wohldefiniertheit der Fortsetzungen zu überprüfen:

Lemma 5.14.

(i) Es ist $\theta : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N}) \times \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \to \mathbb{R}$ eine stetige Bilinearform.

(ii) Es ist $\tilde\theta : \mathcal{L}^2_I(\mathbb{R}^{3N}) \times \mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N}) \to \mathbb{R}$ eine stetige Bilinearform.

(iii) Es ist $\widehat{b_h} : \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \to \mathbb{R}$ eine stetige, lineare Abbildung, d. h. $\widehat{b_h} \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})^*$.

(iv) Es ist $\widetilde{b_h} : \mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N}) \to \mathbb{R}$ eine stetige, lineare Abbildung, d. h. $\widetilde{b_h} \in \mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N})^*$.

Beweis. (i) Die Bilinearität der Einschränkung $\theta|_{\mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^{3N})\times\mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^{3N})}$ ist trivial und ihre Stetigkeit folgt direkt aus 4.10 und 1.12. Nach 1.13 ist somit auch die bilineare stetige Fortsetzung θ wohldefiniert und eindeutig.
(ii) Die Einschränkung $\tilde\theta|_{\mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})\times\mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})}$ ist offensichtlich bilinear und für alle $u, v \in \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})$ gilt laut 4.10 und 4.11 mit der Ungleichung vom arithmetischen und geometrischen Mittel:

$$\begin{aligned}|\tilde\theta(u,v)|^2 &\leq \left(\left| \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x) u(x) v(x)\, dx \right| + \left| \sum_{\alpha\in I^*} \int_{\mathbb{R}^{3N}} D_\alpha(Vu)(x) D_\alpha v(x)\, dx \right| \right)^2 \\ &\overset{52,53}{\leq} \left(3N^{\frac{3}{2}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} |v|_{\mathcal{H}^1} + (11 + 4\sqrt{6}) N^{\frac{3}{2}} |u|_{\mathcal{L}^2_I} |v|_{\mathcal{R}^1_I} \right)^2\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&\le \left((11+4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}(\|u\|_{\mathcal{L}^2}|v|_{\mathcal{H}^1}+|u|_{\mathcal{L}^2_I}|v|_{\mathcal{R}^1_I})\right)^2 \\
&= (11+4\sqrt{6})^2N^3(\|u\|^2_{\mathcal{L}^2}|v|^2_{\mathcal{H}^1}+2|u|_{\mathcal{L}^2_I}|v|_{\mathcal{H}^1}\cdot\|u\|_{\mathcal{L}^2}|v|_{\mathcal{R}^1_I}+|u|^2_{\mathcal{L}^2_I}|v|^2_{\mathcal{R}^1_I}) \\
&\le (11+4\sqrt{6})^2N^3(\|u\|^2_{\mathcal{L}^2}|v|^2_{\mathcal{H}^1}+|u|^2_{\mathcal{L}^2_I}|v|^2_{\mathcal{H}^1}+\|u\|^2_{\mathcal{L}^2}|v|^2_{\mathcal{R}^1_I}+|u|^2_{\mathcal{L}^2_I}|v|^2_{\mathcal{R}^1_I}) \\
&= (11+4\sqrt{6})^2N^3((\|u\|^2_{\mathcal{L}^2}+|u|^2_{\mathcal{L}^2_I})|v|^2_{\mathcal{H}^1}+(\|u\|^2_{\mathcal{L}^2}+|u|^2_{\mathcal{L}^2_I})|v|^2_{\mathcal{R}^1_I}) \\
&= (11+4\sqrt{6})^2N^3\|u\|^2_{\mathcal{L}^2_I}(|v|^2_{\mathcal{H}^1}+|v|^2_{\mathcal{R}^1_I}) \\
&\le (11+4\sqrt{6})^2N^3\|u\|^2_{\mathcal{L}^2_I}(\|v\|^2_{\mathcal{L}^2}+|v|^2_{\mathcal{H}^1}+|v|^2_{\mathcal{L}^2_I}+|v|^2_{\mathcal{R}^1_I}) \\
&= (11+4\sqrt{6})^2N^3\|u\|^2_{\mathcal{L}^2_I}\|v\|^2_{\mathcal{R}^1_I}
\end{aligned}
$$

woraus durch Anwendung der Wurzelfunktion folgt

$$|\tilde{\theta}(u,v)| \le (11+4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}\|u\|_{\mathcal{L}^2_I}\|v\|_{\mathcal{R}^1_I}$$

Also ist $\tilde{\theta}|_{\mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})\times\mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})}$ gemäß 1.12 stetig mit der Stetigkeitskonstante $\xi_S := (11+4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}$. Nach 1.13 ist $\tilde{\theta}$ als bilineare stetige Fortsetzung wohldefiniert und eindeutig.
(iii) und (iv) folgen unmittelbar aus (i) bzw. (ii). □

Zur Lösung der neuen Variationsprobleme soll wieder der Satz von Lax-Milgram verwendet werden. Dazu ist die Koerzivität von a bzw. $\tilde{a}$ auf den jeweiligen hochfrequenten Teilräumen zu zeigen. Anstatt die Koerzivität auf $\mathcal{H}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ bzw. $\mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ zu nutzen, die nur für positive und hinreichend große μ gilt, kann Koerzivität auf $\mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$ bzw. $\mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$ durch geeignete Wahl der Grenzfrequenz Ω erreicht werden. Dies ist von entscheidender Bedeutung, weil so μ beliebig gewählt werden kann.

Lemma 5.15: [YSERENTANT (5.6), (5.12), (5.17)].

(i) Ist $\mu \ge 0$ und gilt $\Omega \ge 24N^{\frac{3}{2}}$, so ist $a|_{\mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})\times\mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})}$ koerziv.

(ii) Ist $\mu < 0$ und gilt $\Omega + 8\mu\Omega^{-1} \ge 24N^{\frac{3}{2}}$, so ist $a|_{\mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})\times\mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})}$ koerziv.

(iii) Ist $\mu \ge 0$ und gilt $\Omega - \Omega^{-1} \ge (44+16\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}$, so ist $\tilde{a}|_{\mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})\times\mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})}$ koerziv.

(iv) Ist $\mu < 0$ und gilt $\Omega - \Omega^{-1} + 8\mu\Omega^{-1} \ge (44+16\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}$, so ist $\tilde{a}|_{\mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})\times\mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})}$ koerziv.

Beweis. (i) Es gelte $\Omega \ge 24N^{\frac{3}{2}}$. Insbesondere $\Omega \ge 2$. Für alle $u \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ gilt, wie im Beweis von 4.16 gezeigt wurde:

$$a(u,u) \ge \frac{1}{2}|u|^2_{\mathcal{H}^1} - 3N^{\frac{3}{2}}\|u\|_{\mathcal{L}^2}|u|_{\mathcal{H}^1} + \mu\|u\|^2_{\mathcal{L}^2}$$

Mit 5.12 folgt daraus für alle $u_h \in \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N}) \subseteq \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ nach Wahl von Ω und mit $\mu \ge 0$:

$$a(u_h,u_h) \ge \frac{1}{2}|u_h|^2_{\mathcal{H}^1} - 3N^{\frac{3}{2}}\|u_h\|_{\mathcal{L}^2}|u_h|_{\mathcal{H}^1} + \mu\|u_h\|^2_{\mathcal{L}^2}$$

$$
\begin{aligned}
&\overset{97}{\geq} \left(\frac{1}{2} - \frac{3N^{\frac{3}{2}}}{\Omega}\right)|u_h|^2_{\mathcal{H}^1} + \mu\|u_h\|^2_{\mathcal{L}^2} \\
&\geq \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{8}\right)|u_h|^2_{\mathcal{H}^1} \\
&= \frac{1}{8}|u_h|^2_{\mathcal{H}^1} + \frac{1}{4}|u_h|^2_{\mathcal{H}^1} \\
&\overset{97}{\geq} \frac{1}{8}\Omega\|u_h\|^2_{\mathcal{L}^2} + \frac{1}{4}|u_h|^2_{\mathcal{H}^1} \\
&\geq \frac{1}{4}(\|u_h\|^2_{\mathcal{L}^2} + |u_h|^2_{\mathcal{H}^1}) \\
&= \frac{1}{4}\|u_h\|^2_{\mathcal{H}^1}
\end{aligned}
$$

also ist $a|_{\mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})\times\mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})}$ koerziv mit der Koerzivitätskonstante $\xi_C := \frac{1}{4}$.
(ii) Es gelte $\Omega + 8\mu\Omega^{-1} \geq 24N^{\frac{3}{2}}$. Dann folgt für alle $u_h \in \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$ analog zu (i) mit $\mu < 0$:

$$
\begin{aligned}
a(u_h, u_h) &\geq \frac{1}{2}|u_h|^2_{\mathcal{H}^1} - 3N^{\frac{3}{2}}\|u_h\|_{\mathcal{L}^2}|u_h|_{\mathcal{H}^1} + \mu\|u_h\|^2_{\mathcal{L}^2} \\
&\overset{97}{\geq} \frac{1}{2}|u_h|^2_{\mathcal{H}^1} - \frac{3N^{\frac{3}{2}}}{\Omega}|u_h|_{\mathcal{H}^1}|u_h|_{\mathcal{H}^1} + \frac{\mu}{\Omega^2}|u_h|^2_{\mathcal{H}^1} \\
&\geq \frac{1}{2}|u_h|^2_{\mathcal{H}^1} - \left(\frac{1}{8} + \frac{\mu}{\Omega^2}\right)|u_h|^2_{\mathcal{H}^1} + \frac{\mu}{\Omega^2}\|u_h\|^2_{\mathcal{L}^2} \\
&= \frac{3}{8}|u_h|^2_{\mathcal{H}^1} \\
&\geq \frac{1}{4}\|u_h\|^2_{\mathcal{H}^1}
\end{aligned}
$$

also ist $a|_{\mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})\times\mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})}$ koerziv mit der Koerzivitätskonstante $\xi_C := \frac{1}{4}$.
(iii) Es gelte $\Omega \geq (44 + 16\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}} + \Omega^{-1}$. Insbesondere $\Omega \geq 24N^{\frac{3}{2}}$. Wie aus dem Beweis von 5.2 hervorgeht, gilt für alle $u \in \mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$:

$$
\tilde{a}(u, u) \geq \frac{1}{2}|u|^2_{\mathcal{R}^1_I} - (11 + 4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}|u|_{\mathcal{L}^2_I}|u|_{\mathcal{R}^1_I} + \mu|u|^2_{\mathcal{L}^2_I} + a(u, u)
$$

Mit (i) und 5.12 folgt für alle $u_h \in \mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N}) \subseteq \mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ nach Wahl von Ω und mit $\mu \geq 0$ somit:

$$
\begin{aligned}
\tilde{a}(u_h, u_h) &\geq \frac{1}{2}|u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I} - (11 + 4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}|u_h|_{\mathcal{L}^2_I}|u_h|_{\mathcal{R}^1_I} + \mu|u_h|^2_{\mathcal{L}^2_I} + a(u_h, u_h) \\
&\geq \frac{1}{2}|u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I} - \frac{\Omega}{4}|u_h|_{\mathcal{L}^2_I}|u_h|_{\mathcal{R}^1_I} + \frac{1}{4\Omega}|u_h|_{\mathcal{L}^2_I}|u_h|_{\mathcal{R}^1_I} + a(u_h, u_h) \\
&\overset{98}{\geq} \frac{1}{2}|u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I} - \frac{1}{4}|u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I} + \frac{1}{4}|u_h|^2_{\mathcal{L}^2_I} + a(u_h, u_h) \\
&= \frac{1}{4}(|u_h|^2_{\mathcal{L}^2_I} + |u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I}) + a(u_h, u_h) \\
&\overset{(i)}{\geq} \frac{1}{4}(\|u_h\|^2_{\mathcal{H}^1} + |u_h|^2_{\mathcal{L}^2_I} + |u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I}) \\
&= \frac{1}{4}\|u_h\|^2_{\mathcal{R}^1_I}
\end{aligned}
$$

also ist $\tilde{a}|_{\mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})\times\mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})}$ koerziv mit der Koerzivitätskonstante $\xi_C := \frac{1}{4}$.
(iv) Es gelte $\Omega + 8\mu\Omega^{-1} \geq (44+16\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}} + \Omega^{-1}$. Insbesondere $\Omega + 8\mu\Omega^{-1} \geq 24N^{\frac{3}{2}}$. Mit $\mu < 0$ und (ii) folgt dann für alle $u_h \in \mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$:

$$\begin{aligned}
\tilde{a}(u_h,u_h) &\geq \frac{1}{2}|u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I} - (11+4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}|u_h|_{\mathcal{L}^2_I}|u_h|_{\mathcal{R}^1_I} + \mu|u_h|^2_{\mathcal{L}^2_I} + a(u_h,u_h) \\
&\geq \frac{1}{2}|u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I} - \left(\frac{\Omega}{4} - \frac{1}{4\Omega} + \frac{2\mu}{\Omega}\right)|u_h|_{\mathcal{L}^2_I}|u_h|_{\mathcal{R}^1_I} + \mu|u_h|^2_{\mathcal{L}^2_I} + a(u_h,u_h) \\
&\overset{98}{\geq} \frac{1}{2}|u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I} - \frac{1}{4}|u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I} + \frac{1}{4}|u_h|^2_{\mathcal{L}^2_I} - 2\mu|u_h|^2_{\mathcal{L}^2_I} + \mu|u_h|^2_{\mathcal{L}^2_I} + a(u_h,u_h) \\
&= \frac{1}{4}(|u_h|^2_{\mathcal{L}^2_I} + |u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I}) - \mu|u_h|^2_{\mathcal{L}^2_I} + a(u_h,u_h) \\
&\geq \frac{1}{4}(|u_h|^2_{\mathcal{L}^2_I} + |u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I}) + a(u_h,u_h) \\
&\overset{(ii)}{\geq} \frac{1}{4}(\|u_h\|^2_{\mathcal{H}^1} + |u_h|^2_{\mathcal{L}^2_I} + |u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I}) \\
&= \frac{1}{4}\|u_h\|^2_{\mathcal{R}^1_I}
\end{aligned}$$

also ist $\tilde{a}|_{\mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})\times\mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})}$ koerziv mit der Koerzivitätskonstante $\xi_C := \frac{1}{4}$. □

Wählt man also Ω groß genug (ggfs. abhängig von μ), und verkleinert damit den Teilraum der hochfrequenten Funktionen ausreichend, so erhält man die Koerzivität von a und $\tilde{a}$ auf $\mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$ bzw. $\mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$. Nun können wie im vorangegangenen Abschnitt zwei Variationsprobleme von a priori unterschiedlicher Regularität betrachtet werden und mit einem Eindeutigkeitsargument erhält man wie dort das gewünschte Regularitätsresultat.

Satz 5.16: [YSERENTANT Satz 5].
Es gelte

$$\begin{cases} \Omega - \Omega^{-1} \geq (44+16\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}, & \text{falls } \mu \geq 0 \\ \Omega - \Omega^{-1} + 8\mu\Omega^{-1} \geq (44+16\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}, & \text{falls } \mu < 0 \end{cases} \tag{99}$$

Dann hat das Variationsproblem

$$\forall v_h \in \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N}) \qquad a(u_h,v_h) = \widehat{b_h}(v_h) \tag{100}$$

eine eindeutige Lösung $u_h \in \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$.
Es gelten sogar $u_h \in \mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$ und

$$\|u_h\|_{\mathcal{R}^1_I} \leq 4\|b_h\|_h \tag{101}$$

Beweis. Nach 5.15 und 5.14 sind $a|_{\mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})\times\mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})}$ koerziv und $\widehat{b_h}|_{\mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})} \in \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})^*$. Deswegen liefert 1.21 eine eindeutige Lösung $u_h \in \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$ von 100.
Ferner sind laut 5.15 und 5.14 auch $\tilde{a}|_{\mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})\times\mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})}$ koerziv und $\widetilde{b_h}|_{\mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})} \in \mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})^*$.
Also liefert 1.21 ebenfalls eine eindeutige Lösung $\widetilde{u_h} \in \mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$ des modifizierten Variationsproblems:

$$\forall v_h \in \mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N}) \qquad \tilde{a}(\widetilde{u_h},v_h) = \widetilde{b_h}(v_h) \tag{102}$$

Es bleibt $u_h = \widetilde{u_h}$ zu zeigen. Seien dazu $v_h \in \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$ und $(\widetilde{v_n})_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{S}_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ mit

$$\lim_{n\to\infty} \|v_h - \widetilde{v_n}\|_{\mathcal{H}^1} = 0$$

Nach 5.7 existiert für jedes $n \in \mathbb{N}$ eine Abbildung $v_n \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$ mit

$$\widetilde{v_n} = v_n + (-1)^{|I|}\Delta_I v_n$$

Weiter gilt nach Definition von v_n (vgl. Beweis von 5.7) und $\widetilde{v_n}$ für alle $\xi \in B_\Omega(0)$:

$$\mathcal{F}(v_n)(\xi) = \frac{1}{1+\prod\limits_{k\in I}\|\xi_k\|_2^2}\mathcal{F}(\widetilde{v_n})(\xi) = 0$$

und somit folgt $v_n \in \mathcal{S}_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$ für alle $n \in \mathbb{N}$.
Wie im Beweis von 5.6 für $\hat{b}$ und $\tilde{b}$ lässt sich nun analog auch für $\widehat{b_h}$ und $\widetilde{b_h}$ zeigen:

$$\forall v \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N}) \quad \widetilde{b_h}(v) = \widehat{b_h}(v + (-1)^{|I|}\Delta_I v) \tag{103}$$

Dabei wird anstatt $|I|$-facher gewöhnlicher partieller Integration 4.12 benutzt, indem v auf $\operatorname{supp}(b_n)$ gemäß 5.4 durch eine Testfunktion ersetzt wird.
Außerdem gilt analog zu 77 auch:

$$\forall v \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N}) \quad a(\widetilde{u_h}, v + (-1)^{|I|}\Delta_I v) = \tilde{a}(\widetilde{u_h}, v) \tag{104}$$

Insgesamt folgt nun nach Wahl von $\widetilde{u_h}$:

$$\begin{aligned}
a(\widetilde{u_h}, v_h) &= \lim_{n\to\infty} a(\widetilde{u_h}, \widetilde{v_n}) \\
&= \lim_{n\to\infty} a(\widetilde{u_h}, v_n + (-1)^{|I|}\Delta_I v_n) \\
&\overset{104}{=} \lim_{n\to\infty} \tilde{a}(\widetilde{u_h}, v_n) \\
&\overset{102}{=} \lim_{n\to\infty} \widetilde{b_h}(v_n) \\
&\overset{103}{=} \lim_{n\to\infty} \widehat{b_h}(v_n + (-1)^{|I|}\Delta_I v_n) \\
&= \lim_{n\to\infty} \widehat{b_h}(\widetilde{v_n}) \\
&= \widehat{b_h}(v_h)
\end{aligned}$$

Folglich ist auch $\widetilde{u_h}$ eine Lösung von 100 und die Eindeutigkeit liefert $u_h = \widetilde{u_h} \in \mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$.
Weiter folgt aus der Koerzivität von $\tilde{a}$:

$$\frac{1}{4}\|u_h\|^2_{\mathcal{R}^1_I} \leq \tilde{a}(u_h, u_h) = \tilde{a}(\widetilde{u_h}, \widetilde{u_h}) = \widetilde{b_h}(\widetilde{u_h}) = \widetilde{b_h}(u_h)$$

Falls $u_h \neq 0$, folgt:

$$\|u_h\|_{\mathcal{R}^1_I} \;\leq\; 4\frac{\widetilde{b_h}(u_h)}{\|u_h\|_{\mathcal{R}^1_I}} \;\leq\; \sup_{v_h\in\mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})\setminus\{0\}} \frac{|\widetilde{b_h}(v_h)|}{\|v_h\|_{\mathcal{R}^1_I}} \;\leq\; 4\|b_h\|_h$$

Für $u_h = 0$ hingegen ist die Abschätzung 101 trivial erfüllt. □

Bemerkung 5.17 *(Umgekehrte Abschätzung)*: Die Abschätzung 101 ist (für hinreichend großes Ω) scharf; es gilt nämlich näherungsweise:

$$\|u_h\|_{\mathcal{R}^1_I} \;\leq\; 4\|b_h\|_h \;\lessapprox\; 3\|u_h\|_{\mathcal{R}^1_I}$$

Hierfür bemerke zunächst, dass nach den Beweisen von 4.16(i) und 5.2(i) für alle $u, v \in \mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ gelten:

$$\begin{aligned}
|\tilde{a}(u,v)| &\leq (11+4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}|u|_{\mathcal{L}^2_I}|v|_{\mathcal{R}^1_I} + \frac{1}{2}|u|_{\mathcal{R}^1_I}|v|_{\mathcal{R}^1_I} + |\mu||u|_{\mathcal{L}^2_I}|v|_{\mathcal{L}^2_I} + |a(u,v)| \\
|a(u,v)| &\leq 3N^{\frac{3}{2}}\|u\|_{\mathcal{L}^2}|v|_{\mathcal{H}^1} + \frac{1}{2}|u|_{\mathcal{H}^1}|v|_{\mathcal{H}^1} + |\mu|\|u\|_{\mathcal{L}^2}\|v\|_{\mathcal{L}^2}
\end{aligned}$$

Daraus folgt mit 5.12 unter den Voraussetzungen von 5.16 für alle $v_h \in \mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$:

$$\begin{aligned}
|\tilde{a}(u_h,v_h)| &\leq (11+4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}|u_h|_{\mathcal{L}^2_I}|v_h|_{\mathcal{R}^1_I} + \frac{1}{2}|u_h|_{\mathcal{R}^1_I}|v_h|_{\mathcal{R}^1_I} + |\mu||u_h|_{\mathcal{L}^2_I}|v_h|_{\mathcal{L}^2_I} \\
&\quad + 3N^{\frac{3}{2}}\|u_h\|_{\mathcal{L}^2}|v_h|_{\mathcal{H}^1} + \frac{1}{2}|u_h|_{\mathcal{H}^1}|v_h|_{\mathcal{H}^1} + |\mu|\|u_h\|_{\mathcal{L}^2}\|v_h\|_{\mathcal{L}^2} \\
&\overset{97,98}{\leq} \frac{(11+4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}}{\Omega}|u_h|_{\mathcal{R}^1_I}|v_h|_{\mathcal{R}^1_I} + \frac{1}{2}|u_h|_{\mathcal{R}^1_I}|v_h|_{\mathcal{R}^1_I} + \frac{|\mu|}{\Omega^2}|u_h|_{\mathcal{R}^1_I}|v_h|_{\mathcal{R}^1_I} \\
&\quad + \frac{3N^{\frac{3}{2}}}{\Omega}|u_h|_{\mathcal{H}^1}|v_h|_{\mathcal{H}^1} + \frac{1}{2}|u_h|_{\mathcal{H}^1}|v_h|_{\mathcal{H}^1} + \frac{|\mu|}{\Omega^2}|u_h|_{\mathcal{H}^1}|v_h|_{\mathcal{H}^1} \\
&\leq \left(\frac{(11+4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}}{\Omega} + \frac{1}{2} + \frac{|\mu|}{\Omega^2}\right)(|u_h|_{\mathcal{R}^1_I}|v_h|_{\mathcal{R}^1_I} + |u_h|_{\mathcal{H}^1}|v_h|_{\mathcal{H}^1}) \\
&\leq \left(\frac{(11+4\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}}{\Omega-\Omega^{-1}} + \frac{1}{2} + \frac{|\mu|}{\Omega^2}\right)(|u_h|_{\mathcal{R}^1_I}|v_h|_{\mathcal{R}^1_I} + |u_h|_{\mathcal{H}^1}|v_h|_{\mathcal{H}^1}) \\
&\overset{99}{\leq} \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{2} + \frac{|\mu|}{\Omega^2}\right)(|u_h|_{\mathcal{R}^1_I}|v_h|_{\mathcal{R}^1_I} + |u_h|_{\mathcal{H}^1}|v_h|_{\mathcal{H}^1}) \\
&= \left(\frac{3}{4} + \frac{|\mu|}{\Omega^2}\right)(|u_h|_{\mathcal{R}^1_I}|v_h|_{\mathcal{R}^1_I} + |u_h|_{\mathcal{H}^1}|v_h|_{\mathcal{H}^1})
\end{aligned}$$

also nach der Ungleichung vom arithmetischen und geometrischen Mittel

$$\begin{aligned}
|\tilde{a}(u_h,v_h)|^2 &\leq \left(\frac{3}{4} + \frac{|\mu|}{\Omega^2}\right)^2(|u_h|_{\mathcal{R}^1_I}|v_h|_{\mathcal{R}^1_I} + |u_h|_{\mathcal{H}^1}|v_h|_{\mathcal{H}^1})^2 \\
&= \left(\frac{3}{4} + \frac{|\mu|}{\Omega^2}\right)^2(|u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I}|v_h|^2_{\mathcal{R}^1_I} + 2|u_h|_{\mathcal{R}^1_I}|v_h|_{\mathcal{H}^1}\cdot|u_h|_{\mathcal{H}^1}|v_h|_{\mathcal{R}^1_I} + |u_h|^2_{\mathcal{H}^1}|v_h|^2_{\mathcal{H}^1}) \\
&\leq \left(\frac{3}{4} + \frac{|\mu|}{\Omega^2}\right)^2(|u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I}|v_h|^2_{\mathcal{R}^1_I} + |u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I}|v_h|^2_{\mathcal{H}^1} + |u_h|^2_{\mathcal{H}^1}|v_h|^2_{\mathcal{R}^1_I} + |u_h|^2_{\mathcal{H}^1}|v_h|^2_{\mathcal{H}^1})
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \left(\frac{3}{4}+\frac{|\mu|}{\Omega^2}\right)^2 (|u_h|^2_{\mathcal{H}^1}+|u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I})(|v_h|^2_{\mathcal{H}^1}+|v_h|^2_{\mathcal{R}^1_I})\\
&\leq \left(\frac{3}{4}+\frac{|\mu|}{\Omega^2}\right)^2 (\|u_h\|^2_{\mathcal{L}^2}+|u_h|^2_{\mathcal{H}^1}+|u_h|^2_{\mathcal{L}^2_I}+|u_h|^2_{\mathcal{R}^1_I})\\
&\quad\cdot (\|v_h\|^2_{\mathcal{L}^2}+|v_h|^2_{\mathcal{H}^1}+|v_h|^2_{\mathcal{L}^2_I}+|v_h|^2_{\mathcal{R}^1_I})\\
&= \left(\frac{3}{4}+\frac{|\mu|}{\Omega^2}\right)^2 \|u_h\|^2_{\mathcal{R}^1_I}\|v_h\|^2_{\mathcal{R}^1_I}
\end{aligned}
$$

und somit

$$
|\widetilde{b_h}(v_h)| \;=\; |\tilde{a}(\widetilde{u_h},v_h)| \;=\; |\tilde{a}(u_h,v_h)| \;\leq\; \left(\frac{3}{4}+\frac{|\mu|}{\Omega^2}\right)\|u_h\|_{\mathcal{R}^1_I}\|v_h\|_{\mathcal{R}^1_I}
$$

Es folgt:

$$
4\|b_h\|_h \;=\; 4\sup_{v_h\in\mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})\setminus\{0\}}\frac{|\widetilde{b_h}(v_h)|}{\|v_h\|_{\mathcal{R}^1_I}} \;\leq\; 4\left(\frac{3}{4}+\frac{|\mu|}{\Omega^2}\right)\|u_h\|_{\mathcal{R}^1_I} \;=\; \left(3+\frac{4|\mu|}{\Omega^2}\right)\|u_h\|_{\mathcal{R}^1_I}
$$

Für $\Omega \ggg |\mu|$ ergibt sich folglich die obige Näherung.

Die hochfrequenten Lösungsanteile sind damit hinreichend erforscht. Es bleiben noch die niedrigfrequenten Anteile zu betrachten. Dafür sind keine weiteren Voraussetzungen zu erfüllen; denn unabhängig von der Wahl von Ω sind im niedrigfrequenten Bereich die sonst unterschiedlich starken Normen $\|\cdot\|_{\mathcal{H}^1}$ und $\|\cdot\|_{\mathcal{R}^1_I}$ äquivalent. Dies liegt daran, dass die Fourier-Transformierten der niedrigfrequenten Schwartz-Funktionen einen kompakten Träger haben, was mithilfe der $\mathcal{L}^2$-Isometrie der Fourier-Transformation die Beschränkung der im Allgemeinen stärkeren $\mathcal{R}^1_I$-Norm durch die schwächere $\mathcal{H}^1$-Norm ermöglicht.

Satz 5.18: [YSERENTANT (5.4)].
Auf $\mathcal{S}_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})$ sind die Normen $\|\cdot\|_{\mathcal{H}^1}$ und $\|\cdot\|_{\mathcal{R}^1_I}$ äquivalent. Insbesondere sind $\mathcal{H}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})$ und $\mathcal{R}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})$ identisch.

Beweis. Seien $u_l \in \mathcal{S}_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})$ und $\alpha \in I^*$. Dann gelten nach 1.17:

$$
\begin{aligned}
\|D_\alpha u_l\|_{\mathcal{L}^2} &\overset{10}{=} \|\mathcal{F}(D_\alpha u_l)\|_{\mathcal{L}^2}\\
&= \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} |\mathcal{F}(D_\alpha u_l)(\xi)|^2\, d\xi\right)^{\frac{1}{2}}\\
&\overset{7}{=} \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} \left| \mathrm{i}^{|I|}\left(\prod_{k\in I}\xi_{k,\alpha(k)}\right)\mathcal{F}(u_l)(\xi)\right|^2 d\xi\right)^{\frac{1}{2}}\\
&= \left(\int_{\overline{B_\Omega(0)}} \left(\prod_{k\in I}|\xi_{k,\alpha(k)}|^2\right)|\mathcal{F}(u_l)(\xi)|^2\, d\xi\right)^{\frac{1}{2}}\\
&\leq \left(\int_{\overline{B_\Omega(0)}} \Omega^{2|I|}|\mathcal{F}(u_l)(\xi)|^2\, d\xi\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \Omega^{|I|} \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} |\mathcal{F}(u_l)(\xi)|^2 \, d\xi \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \Omega^{|I|} \|\mathcal{F}(u_l)\|_{\mathcal{L}^2} \\
&\overset{10}{=} \Omega^{|I|} \|u_l\|_{\mathcal{L}^2}
\end{aligned}
$$

sowie

$$
\begin{aligned}
|D_\alpha u_l|_{\mathcal{H}^1} &= \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla (D_\alpha u_l)(x)\|_2^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\sum_{j=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} \|\partial_{j,\gamma} D_\alpha u_l\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{10}{=} \left(\sum_{j=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} \|\mathcal{F}(\partial_{j,\gamma} D_\alpha u_l)\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\sum_{j=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^{3N}} |\mathcal{F}(\partial_{j,\gamma} D_\alpha u_l)(\xi)|^2 \, d\xi \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{7}{=} \left(\sum_{j=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \left| \mathrm{i}^{|I|+1} \xi_{j,\gamma} \left(\prod_{k \in I} \xi_{k,\alpha(k)} \right) \mathcal{F}(u_l)(\xi) \right|^2 \, d\xi \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\sum_{j=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} \int_{\overline{B_\Omega(0)}} \left(\prod_{k \in I} |\xi_{k,\alpha(k)}|^2 \right) |\mathrm{i}\xi_{j,\gamma} \mathcal{F}(u_l)(\xi)|^2 \, d\xi \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq \left(\sum_{j=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} \int_{\overline{B_\Omega(0)}} \Omega^{2|I|} |\mathrm{i}\xi_{j,\gamma} \mathcal{F}(u_l)(\xi)|^2 \, d\xi \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \Omega^{|I|} \left(\sum_{j=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^{3N}} |\mathrm{i}\xi_{j,\gamma} \mathcal{F}(u_l)(\xi)|^2 \, d\xi \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{7}{=} \Omega^{|I|} \left(\sum_{j=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} \int_{\mathbb{R}^{3N}} |\mathcal{F}(\partial_{j,\gamma} u_l)(\xi)|^2 \, d\xi \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \Omega^{|I|} \left(\sum_{j=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} \|\mathcal{F}(\partial_{j,\gamma} u_l)\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\overset{10}{=} \Omega^{|I|} \left(\sum_{j=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} \|\partial_{j,\gamma} u_l\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \Omega^{|I|} \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} \|\nabla u_l(x)\|_2^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \Omega^{|I|} |u_l|_{\mathcal{H}^1}
\end{aligned}
$$

also folgt wegen $|I^*| = 3^{|I|}$:

$$
\|u_l\|_{\mathcal{R}_I^1} = (\|u_l\|_{\mathcal{H}^1}^2 + |u_l|_{\mathcal{L}_I^2}^2 + |u_l|_{\mathcal{R}_I^1}^2)^{\frac{1}{2}}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \left(\|u_l\|^2_{\mathcal{H}^1} + \sum_{\alpha \in I^*} \|D_\alpha u_l\|^2_{\mathcal{L}^2} + \sum_{\alpha \in I^*} |D_\alpha u_l|^2_{\mathcal{H}^1} \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq \left(\|u_l\|^2_{\mathcal{H}^1} + \sum_{\alpha \in I^*} \Omega^{|I|} \|u_l\|^2_{\mathcal{L}^2} + \sum_{\alpha \in I^*} \Omega^{|I|} |u_l|^2_{\mathcal{H}^1} \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\|u_l\|^2_{\mathcal{H}^1} + \Omega^{|I|} \sum_{\alpha \in I^*} (\|u_l\|^2_{\mathcal{L}^2} + |u_l|^2_{\mathcal{H}^1}) \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\|u_l\|^2_{\mathcal{H}^1} + \Omega^{|I|} \sum_{\alpha \in I^*} \|u_l\|^2_{\mathcal{H}^1} \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= (\|u_l\|^2_{\mathcal{H}^1} + \Omega^{|I|} 3^{|I|} \|u_l\|^2_{\mathcal{H}^1})^{\frac{1}{2}} \\
&= (1 + (3\Omega)^{|I|})^{\frac{1}{2}} \|u_l\|_{\mathcal{H}^1}
\end{aligned}
$$

Zusammen mit der Ungleichung 45 folgt die Äquivalenz der beiden Normen. Der Zusatz ergibt sich daraus, dass Folgen bzgl. äquivalenter Normen das gleiche Konvergenzverhalten haben, und somit die Abschlüsse von $\mathcal{S}_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})$ bzgl. beider Normen identisch sind. □

5.3 Eigenfunktionen und das Pauli-Prinzip

Nun werden die bisherigen Resultate auf die schwache Eigenwertgleichung spezialisiert. Gemäß Definition ist eine schwache Eigenfunktion $u \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ des Schrödinger-Operators zum Eigenwert $\lambda \in \mathbb{R}$ für $b := (\lambda + \mu)u$ eine Lösung des Variationsproblems

$$\forall v \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \quad a(u, v) \;=\; \hat{b}(v)$$

Es stellt sich heraus, dass dieses Problem für antisymmetrische schwache Eigenfunktionen bei geeigneter Wahl von μ auf ein Problem im hochfrequenten Teil des Sobolev-Raumes reduziert werden kann. Dieses und der korrespondierende niedrigfrequente Anteil werden dann mit den Methoden des vorangegangenen Abschnitts untersucht.

Satz 5.19: [YSERENTANT Satz 6].
Sei $u \in \mathcal{H}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ eine schwache Eigenfunktion von H zum Eigenwert $\lambda \in \mathbb{R}$. Weiter gelte:

$$
\begin{cases}
\Omega - \Omega^{-1} \geq (44 + 16\sqrt{6}) N^{\frac{3}{2}}, & \text{falls } \lambda \leq 0 \\
\Omega - \Omega^{-1} - 8\lambda\Omega^{-1} \geq (44 + 16\sqrt{6}) N^{\frac{3}{2}}, & \text{falls } \lambda > 0
\end{cases}
$$

Dann ist $u \in \mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$.
Es sei weiter $u = u_l + u_h$ gemäß 5.10 die Zerlegung von u in den niedrigfrequenten Anteil $u_l \in \mathcal{H}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})$ und den hochfrequenten Anteil $u_h \in \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$. Dann gilt zwischen diesen die folgende Beziehung:

$$\|u_h\|_{\mathcal{R}^1_I} \;\leq\; 4\|u_l\|_h \;\leq\; \left(3 + \frac{4|\lambda|}{\Omega^2}\right) \|u_h\|_{\mathcal{R}^1_I} \tag{105}$$

Beweis. Betrachte die Bilinearform

$$\zeta : \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \times \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N}) \longrightarrow \mathbb{R}, \ (w,v) \longmapsto \mu \int_{\mathbb{R}^{3N}} w(x)v(x)\ dx + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \langle \nabla w(x), \nabla v(x)\rangle_2\ dx$$

Es gilt für alle $w, v \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^{3N})$ nach der Hölder-Ungleichung und der Cauchy-Schwarz-Ungleichung für das $\mathcal{H}^1$-Skalarprodukt:

$$\begin{aligned}
|\zeta(w,v)| &= \left|\frac{1}{2}\langle w,v\rangle_{\mathcal{H}^1} + \left(\mu - \frac{1}{2}\right)\int_{\mathbb{R}^{3N}} w(x)v(x)\ dx\right| \\
&\leq \frac{1}{2}|\langle w,v\rangle_{\mathcal{H}^1}| + \left|\mu - \frac{1}{2}\right| \left|\int_{\mathbb{R}^{3N}} w(x)v(x)\ dx\right| \\
&\overset{3,112}{\leq} \frac{1}{2}\|w\|_{\mathcal{H}^1}\|v\|_{\mathcal{H}^1} + \left|\mu - \frac{1}{2}\right| \|w\|_{\mathcal{L}^2}\|v\|_{\mathcal{L}^2} \\
&\overset{1}{\leq} \frac{1}{2}\|w\|_{\mathcal{H}^1}\|v\|_{\mathcal{H}^1} + \left|\mu - \frac{1}{2}\right| \|w\|_{\mathcal{H}^1}\|v\|_{\mathcal{H}^1} \\
&\leq (1+|\mu|)\|w\|_{\mathcal{H}^1}\|v\|_{\mathcal{H}^1}
\end{aligned}$$

Also ist ζ gemäß 1.12 stetig.
Nun seien $w \in \mathcal{S}_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})$ und $v \in \mathcal{S}_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$ sowie $(w_n)_{n\in\mathbb{N}}, (v_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}_I^\infty(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ mit

$$\lim_{n\to\infty} \|w - w_n\|_{\mathcal{H}^1} \ = \ 0 \ = \ \lim_{n\to\infty} \|v - v_n\|_{\mathcal{H}^1}$$

Dann folgt nach 1.17 aufgrund der $\mathcal{L}^2$-Orthogonalität von $\mathcal{F}(u)$ und $\mathcal{F}(v)$:

$$\begin{aligned}
a(w,v) &= \lim_{n\to\infty} a(u_n, v_n) \\
&= \lim_{n\to\infty} \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)u_n(x)v_n(x) - \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \Delta u_n(x)v_n(x)\ dx + \mu\int_{\mathbb{R}^{3N}} u_n(x)v_n(x)\ dx \\
&\overset{121}{=} \lim_{n\to\infty} \int_{\mathbb{R}^{3N}} V(x)u_n(x)v_n(x) + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \langle\nabla u_n(x), \nabla v_n(x)\rangle_2\ dx + \mu\int_{\mathbb{R}^{3N}} u_n(x)v_n(x)\ dx \\
&= \lim_{n\to\infty} \theta(u_n,v_n) + \zeta(u_n,v_n) \\
&= \theta(w,v) + \zeta(w,v) \\
&= \theta(w,v) + \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N}\sum_{\gamma=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \partial_{k,\gamma}w(x)\partial_{k,\gamma}v(x)\ dx + \mu\int_{\mathbb{R}^{3N}} w(x)v(x)\ dx \\
&\overset{9}{=} \theta(w,v) + \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N}\sum_{\gamma=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^{3N}} \mathcal{F}(\partial_{k,\gamma}w)(\xi)\overline{\mathcal{F}(\partial_{k,\gamma}v)(\xi)}\ d\xi + \mu\int_{\mathbb{R}^{3N}} \mathcal{F}(w)(\xi)\overline{\mathcal{F}(v)(\xi)}\ d\xi \\
&\overset{7}{=} \theta(w,v) + \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N}\sum_{\gamma=1}^{3}\int_{\mathbb{R}^{3N}} |\xi_{k,\gamma}|^2\mathcal{F}(w)(\xi)\overline{\mathcal{F}(v)(\xi)}\ d\xi + \mu\int_{\mathbb{R}^{3N}} \mathcal{F}(w)(\xi)\overline{\mathcal{F}(v)(\xi)}\ d\xi \\
&= \theta(w,v)
\end{aligned}$$

mithin

$$a|_{\mathcal{S}_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})\times\mathcal{S}_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})} \ = \ \theta|_{\mathcal{S}_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})\times\mathcal{S}_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})} \tag{106}$$

Es seien $(u_{h,n})_{n\in\mathbb{N}}, (v_{h,n})_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{S}_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ und $(u_{l,n})_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{S}_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ sowie $v_h \in \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$

gegeben mit

$$\lim_{n\to\infty} \|u_l - u_{l,n}\|_{\mathcal{H}^1} \;=\; \lim_{n\to\infty} \|u_h - u_{h,n}\|_{\mathcal{H}^1} \;=\; \lim_{n\to\infty} \|v_h - v_{h,n}\|_{\mathcal{H}^1} \;=\; 0$$

Außerdem setze

$$b := (\lambda + \mu)u \qquad\qquad b_h := -u_l \in \mathcal{H}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N}) \subseteq \mathcal{L}^2_I(\mathbb{R}^{3N})$$

Dann folgt nach Definition von u und $\widehat{b_h}$ aus der Stetigkeit von a und θ:

$$\begin{aligned}
a(u_h, v_h) &= a(u, v_h) - a(u_l, v_h) \\
&= \hat{b}(v_h) - a(u_l, v_h) \\
&= \hat{b}(v_h) - \lim_{n\to\infty} a(u_{l,n}, v_{h,n}) \\
&\overset{106}{=} \hat{b}(v_h) - \lim_{n\to\infty} \theta(u_{l,n}, v_{h,n}) \\
&= \hat{b}(v_h) - \theta(u_l, v_h) \\
&= \hat{b}(v_h) + \theta(b_h, v_h) \\
&= \hat{b}(v_h) + \widehat{b_h}(v_h)
\end{aligned}$$

Setzt man nun $\mu := -\lambda$, so folgt $b = 0$, also auch $\hat{b} = 0$, und damit:

$$\forall v_h \in \mathcal{H}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N}) \qquad a(u_h, v_h) \;=\; \hat{b}(v_h) + \widehat{b_h}(v_h) \;=\; \widehat{b_h}(v_h)$$

Also ist u_h eine Lösung des Variationsproblems 100 und 5.16 liefert $u_h \in \mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N})$.
Ferner gilt nach 5.18 auch $u_l \in \mathcal{R}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N})$ und beides fügt sich mit 5.10 zu:

$$u \;=\; u_l + u_h \in \mathcal{R}^1_{I,l}(\mathbb{R}^{3N}) + \mathcal{R}^1_{I,h}(\mathbb{R}^{3N}) \;\overset{88}{=}\; \mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$$

Zudem gilt

$$\|u_h\|_{\mathcal{R}^1_I} \;\overset{101}{\leq}\; 4\|b_h\|_h \;=\; 4\|-u_l\|_h \;=\; 4\|u_l\|_h$$

Die zweite Abschätzung folgt aus 5.17. □

Damit ist das wesentliche Ziel erreicht: Durch eine hinreichend große Wahl der Grenzfrequenz Ω kann sichergestellt werden, dass alle antisymmetrischen schwachen Eigenfunktionen des Schrödinger-Operators im hochregulären Raum $\mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ liegen. Zudem ist eine scharfe Abschätzung für die Norm des nicht a priori beschränkten hochfrequenten Anteils gefunden.
Allerdings sind sowohl die geforderte Antisymmetriebedingung der Eigenfunktionen als auch der Lösungsraum $\mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ noch von der eingangs gewählten Indexmenge I abhängig. Anders formuliert: Für jeden Satz von Spinquantenzahlen der N Elektronen des Systems liegt ein anderes Regularitätsresultat vor. Die verbleibende Aufgabe besteht also darin, eine vereinheitlichte Variante von 5.19 zu finden, die unabhängig von den Elektronenspins für jede nach dem Pauli-Prinzip zulässige Eigenfunktion Gültigkeit besitzt.
Dafür wird zunächst ein neuer Lösungsraum mit zugehöriger Norm definiert.

Definition 5.20: *($\mathcal{P}^{\frac{1}{2}}$- und $\mathcal{P}^1$-Norm).*
Definiere für alle $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N})$ die Normen

$$\|u\|_{\mathcal{P}^{\frac{1}{2}}} := \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2)\left(1+\prod_{i=1}^N \|\xi_i\|_2\right)|\mathcal{F}(u)(\xi)|^2\, d\xi\right)^{\frac{1}{2}}$$
$$\|u\|_{\mathcal{P}^1} := \left(\int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2)\left(1+\prod_{i=1}^N \|\xi_i\|_2^2\right)|\mathcal{F}(u)(\xi)|^2\, d\xi\right)^{\frac{1}{2}}$$

und bezeichne mit $\mathcal{P}^{\frac{1}{2}}(\mathbb{R}^{3N})$ und $\mathcal{P}^1(\mathbb{R}^{3N})$ jeweils den Abschluss von $\mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N})$ bzgl. der Normen $\|\cdot\|_{\mathcal{P}^{\frac{1}{2}}}$ bzw. $\|\cdot\|_{\mathcal{P}^1}$.

Bemerkung 5.21 *zu 5.20*: Seien $I, J \subseteq \{1,\dots,N\}$ mit $\{1,\dots,N\} = I \cup J$. Dann gilt für alle $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N})$ die folgende Ungleichung:

$$\|u\|_{\mathcal{P}^{\frac{1}{2}}} \leq \left(\frac{1}{2}\|u\|_{\mathcal{R}_I^1}^2 + \frac{1}{2}\|u\|_{\mathcal{R}_J^1}^2\right)^{\frac{1}{2}} \tag{107}$$

Für den Spezialfall $J = \emptyset$ gilt zudem:

$$\|u\|_{\mathcal{P}^1} = \|u\|_{\mathcal{R}_I^1} \tag{108}$$

Denn wegen

$$\prod_{i=1}^N \|\xi_i\|_2 = \left(\prod_{i\in I}\|\xi_i\|_2\right)\left(\prod_{j\in J}\|\xi_j\|_2\right) \tag{109}$$

gilt nach der Ungleichung vom arithmetischen und geometrischen Mittel:

$$\begin{aligned}
\|u\|_{\mathcal{P}^{\frac{1}{2}}}^2 &= \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2)\left(1+\prod_{i=1}^N \|\xi_i\|_2\right)|\mathcal{F}(u)(\xi)|^2\, d\xi \\
&\overset{109}{\leq} \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2)\left(1+\frac{1}{2}\left(\prod_{i\in I}\|\xi_i\|_2\right)^2+\frac{1}{2}\left(\prod_{j\in J}\|\xi_j\|_2\right)^2\right)|\mathcal{F}(u)(\xi)|^2\, d\xi \\
&= \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2)\left(1+\prod_{i\in I}\|\xi_i\|_2^2\right)|\mathcal{F}(u)(\xi)|^2\, d\xi \\
&\quad + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^{3N}} (1+\|\xi\|_2^2)\left(1+\prod_{j\in J}\|\xi_i\|_2^2\right)|\mathcal{F}(u)(\xi)|^2\, d\xi \\
&\overset{96}{=} \frac{1}{2}\|u\|_{\mathcal{R}_I^1}^2 + \frac{1}{2}\|u\|_{\mathcal{R}_J^1}^2
\end{aligned}$$

Der Zusatz folgt unmittelbar aus 96.

Satz 5.22: *(Hauptsatz über die schwachen Eigenfunktionen von H).*
Es seien $I_+, J_- \subseteq \{1,\dots,N\}$ mit $\{1,\dots,N\} = I_+ \cup I_-$ und $u \in \mathcal{H}_{I_+}^1(\mathbb{R}^{3N}) \cap \mathcal{H}_{I_-}^1(\mathbb{R}^{3N})$ eine

schwache Eigenfunktion von H zum Eigenwert $\lambda \in \mathbb{R}$. Weiter gelte:

$$\begin{cases} \Omega - \Omega^{-1} \geq (44 + 16\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}, & \text{falls } \lambda \leq 0 \\ \Omega - \Omega^{-1} - 8\lambda\Omega^{-1} \geq (44 + 16\sqrt{6})N^{\frac{3}{2}}, & \text{falls } \lambda > 0 \end{cases}$$

Dann ist $u \in \mathcal{P}^{\frac{1}{2}}(\mathbb{R}^{3N})$.
Gilt $I_+ = \emptyset$ oder $I_- = \emptyset$ (also $u \in \mathcal{H}^1_{\{1,\dots,N\}}(\mathbb{R}^{3N})$), so folgt sogar $u \in \mathcal{P}^1(\mathbb{R}^{3N})$.

Beweis. Zeige zunächst, dass für alle $k \in \{1, \dots, N\}$, $\gamma \in \{1, 2, 3\}$, $I \subseteq I_+$ und $\beta \in I^*$ die schwachen Ableitungen $D_\beta u,\ \partial_{k,\gamma} D_\beta u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N})$ existieren.
Aus $I \subseteq I_+$ folgt $\mathcal{H}^1_{I_+}(\mathbb{R}^{3N}) \subseteq \mathcal{H}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ nach 4.4. Also gilt $u \in \mathcal{H}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$ und nach 5.19 somit $u \in \mathcal{R}^1_I(\mathbb{R}^{3N})$. Demnach existiert eine Folge $(u_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{C}^\infty_I(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$ mit

$$\lim_{n\to\infty} \|u - u_n\|_{\mathcal{R}^1_I} \;=\; 0$$

Es gelten für alle $m, n \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned}
\|D_\beta u_n - D_\beta u_m\|_{\mathcal{L}^2} &= (\|D_\beta(u_n - u_m)\|^2_{\mathcal{L}^2})^{\frac{1}{2}} \\
&\leq \left(\sum_{\alpha \in I^*} \|D_\alpha(u_n - u_m)\|^2_{\mathcal{L}^2}\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= |u_n - u_m|_{\mathcal{L}^2_I} \\
&\overset{41}{\leq} \|u_n - u_m\|_{\mathcal{R}^1_I} \\
\|\partial_{k,\gamma} D_\beta u_n - \partial_{k,\gamma} D_\beta u_m\|_{\mathcal{L}^2} &= (\|\partial_{k,\gamma} D_\beta(u_n - u_m)\|^2_{\mathcal{L}^2})^{\frac{1}{2}} \\
&\leq \left(\sum_{l=1}^{N}\sum_{\delta=1}^{3} \|\partial_{l,\delta} D_\beta(u_n - u_m)\|^2_{\mathcal{L}^2}\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= (|D_\beta(u_n - u_m)|^2_{\mathcal{H}^1})^{\frac{1}{2}} \\
&\leq (\sum_{\alpha \in I^*} |D_\alpha(u_n - u_m)|^2_{\mathcal{H}^1})^{\frac{1}{2}} \\
&= |u_n - u_m|_{\mathcal{R}^1_I} \\
&\overset{42}{\leq} \|u_n - u_m\|_{\mathcal{R}^1_I}
\end{aligned}$$

und außerdem

$$\lim_{n\to\infty} \|u - u_n\|_{\mathcal{L}^2} \overset{1}{\leq} \lim_{n\to\infty} \|u - u_n\|_{\mathcal{H}^1} \overset{45}{\leq} \lim_{n\to\infty} \|u - u_n\|_{\mathcal{R}^1_I} \;=\; 0$$

Also sind $(D_\beta u_n)_{n\in\mathbb{N}}$ und $(\partial_{k,\gamma} D_\beta u_n)_{n\in\mathbb{N}}$ Cauchy-Folgen in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N})$ und ihre Grenzwerte nach 1.9 gerade die schwachen Ableitungen $D_\beta u,\ \partial_{k,\gamma} D_\beta u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N})$.
Analog erhält man auch die schwachen Ableitungen $D_\beta u,\ \partial_{k,\gamma} D_\beta u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3N})$ für alle $J \subseteq I_-$ und alle $\beta \in J^*$.
Sei nun gemäß A.21 für alle $n \in \mathbb{N}$ eine radialsymmetrische Abschneidefunktion $f_n \in \mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^{3N})$

mit $f_n|_{\overline{B_n(0)}} = 1$ gegeben und setze $v_n := f_n \cdot u$. Es gilt für alle $n \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned}
\|u - v_n\|_{\mathcal{R}^1_{I_+}} &= \left(\|u - v_n\|^2_{\mathcal{H}^1} + \sum_{\alpha \in I^*_+} \|D_\alpha u - D_\alpha v_n\|^2_{\mathcal{H}^1} \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \Bigg(\|u - v_n\|^2_{\mathcal{L}^2} + \sum_{k=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} \|\partial_{k,\gamma} u - \partial_{k,\gamma} v_n\|^2_{\mathcal{L}^2} \\
&\qquad + \sum_{\alpha \in I^*_+} \|D_\alpha u - D_\alpha v_n\|^2_{\mathcal{L}^2} + \sum_{k=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} \|\partial_{k,\gamma} D_\alpha u - \partial_{k,\gamma} D_\alpha v_n\|^2_{\mathcal{L}^2} \Bigg)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

Nach dem oben Gezeigten und 1.10 konvergieren alle Summanden gegen Null und somit erhält man (bei gleicher Vorgehensweise für I_-):

$$\lim_{n \to \infty} \|u - v_n\|_{\mathcal{R}^1_{I_+}} = 0 = \lim_{n \to \infty} \|u - v_n\|_{\mathcal{R}^1_{I_-}} \tag{110}$$

Weiter sei $J_{\frac{1}{n}} \in \mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^{3N})$ für alle $n \in \mathbb{N}$ ein radialsymmetrischer Mollifier gemäß 2.28 aus [1] und setze $u_n := J_{\frac{1}{n}} * v_n$. Nach 2.29 und 2.15 aus [1] folgt dann $(u_n)_{n \in \mathbb{N}} \in \mathcal{C}^\infty_0(\mathbb{R}^{3N})^{\mathbb{N}}$. Außerdem gilt für alle $n \in \mathbb{N}$ wie oben:

$$\begin{aligned}
\|v_n - u_n\|_{\mathcal{R}^1_{I_+}} &= \Bigg(\|v_n - u_n\|^2_{\mathcal{L}^2} + \sum_{k=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} \|\partial_{k,\gamma} v_n - \partial_{k,\gamma} u_n\|^2_{\mathcal{L}^2} \\
&\qquad + \sum_{\alpha \in I^*_+} \|D_\alpha v_n - D_\alpha u_n\|^2_{\mathcal{L}^2} + \sum_{k=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} \|\partial_{k,\gamma} D_\alpha v_n - \partial_{k,\gamma} D_\alpha u_n\|^2_{\mathcal{L}^2} \Bigg)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

Nach 3.16 aus [1] konvergiert jeder der Summanden gegen Null, also (bei gleicher Vorgehensweise für I_-):

$$\lim_{n \to \infty} \|v_n - u_n\|_{\mathcal{R}^1_{I_+}} = 0 = \lim_{n \to \infty} \|v_n - u_n\|_{\mathcal{R}^1_{I_-}} \tag{111}$$

Ferner erhält man mit 5.21 für alle $n \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned}
\|u - u_n\|_{\mathcal{P}^{\frac{1}{2}}} &\overset{107}{\leq} \left(\frac{1}{2}\|u - u_n\|^2_{\mathcal{R}^1_{I_+}} + \frac{1}{2}\|u - u_n\|^2_{\mathcal{R}^1_{I_-}} \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\frac{1}{2}\|u - v_n + v_n - u_n\|^2_{\mathcal{R}^1_{I_+}} + \frac{1}{2}\|u - v_n + v_n - u_n\|^2_{\mathcal{R}^1_{I_-}} \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq \left(\frac{1}{2}(\|u - v_n\|_{\mathcal{R}^1_{I_+}} + \|v_n - u_n\|_{\mathcal{R}^1_{I_+}})^2 + \frac{1}{2}(\|u - v_n\|_{\mathcal{R}^1_{I_-}} + \|v_n - u_n\|_{\mathcal{R}^1_{I_-}})^2 \right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

Dies impliziert wegen 110 und 111:

$$\lim_{n \to \infty} \|u - u_n\|_{\mathcal{P}^{\frac{1}{2}}} = 0$$

Also $u \in \mathcal{P}^{\frac{1}{2}}(\mathbb{R}^{3N})$.
Der Zusatz folgt direkt aus 5.19 und der Normäquivalenz 108. □

Als Spezialisierung auf die klassischen Eigenfunktionen von H, also die zeitunabhängigen Zustandsfunktionen des Mehrteilchensystems, kann nun das Endresultat gewonnen werden:

Korollar 5.23: [YSERENTANT Satz 7].
Jede reellwertige Eigenfunktion des Schrödinger-Operators, die mit dem Pauli-Prinzip kompatibel ist, liegt in $\mathcal{P}^{\frac{1}{2}}(\mathbb{R}^{3N})$. Jede vollständig antisymmetrische Eigenfunktion liegt sogar in $\mathcal{P}^1(\mathbb{R}^{3N})$.

Beweis. Seien wie in Abschnitt 2.2

$$I_+ := \left\{ i \in \{1, \ldots, N\} \mid \sigma_i = \frac{1}{2} \right\} \qquad I_- := \left\{ i \in \{1, \ldots, N\} \mid \sigma_i = -\frac{1}{2} \right\}$$

die Mengen der Indizes der Elektronen mit positiver bzw. negativer Spinquantenzahl und u eine Eigenfunktion von H, die das Pauli-Prinzip erfüllt. Nach 2.5 und 4.4 folgt

$$u \in \mathcal{H}^1_{I_+}(\mathbb{R}^{3N}) \cap \mathcal{H}^1_{I_-}(\mathbb{R}^{3N})$$

Da u nach 4.19 auch eine schwache Eigenfunktion von H ist, liefert 5.22 durch hinreichend große Wahl von Ω den ersten Teil der Behauptung.
Ist u vollständig antisymmetrisch bzgl. Elektronenvertauschungen, ist nach 4.4 offenbar

$$u \in \mathcal{H}^1_{\{1,\ldots,N\}}(\mathbb{R}^{3N})$$

und der zweite Teil folgt somit ebenfalls aus 4.19 und 5.22. □

A Anhang

Satz A.1: *(Hölder-Ungleichung).*
Seien $m \in \mathbb{N}$ und $X \subseteq \mathbb{R}^m$ ein Gebiet. Weiter seien $p \in \mathbb{R}_{>1}$ und $q := \frac{p}{p-1}$ sowie $f, g : X \to \mathbb{C}$ mit

$$\|f\|_{\mathcal{L}^p} := \left(\int_X |f(x)|^p \, dx \right)^{\frac{1}{p}} < \infty$$
$$\|g\|_{\mathcal{L}^q} := \left(\int_X |g(x)|^q \, dx \right)^{\frac{1}{q}} < \infty$$

Dann gilt:

$$\left| \int_X f(x)g(x) \, dx \right| \leq \int_X |f(x)g(x)| \, dx \leq \|f\|_{\mathcal{L}^p} \|g\|_{\mathcal{L}^q} \tag{112}$$

Beweis. Siehe [1], 2.4. □

Satz A.2: *(Cauchy-Schwarz-Ungleichung).*
Sei V ein $\mathbb{R}$-Vektorraum, $\langle \cdot, \cdot \rangle_V : V \times V \to \mathbb{R}$ ein Skalarprodukt und $\| \cdot \|_V : V \to \mathbb{R}$, $v \mapsto \langle v, v \rangle_V^{\frac{1}{2}}$ die von ihm erzeugte Norm. Dann gilt für alle $v, w \in V$:

$$|\langle v, w \rangle_V| \leq \|v\|_V \|w\|_V \tag{113}$$

Beweis. Siehe [14], V.1.2 und V.1.3. □

Bemerkung A.3 *zu A.2*: In der vorliegenden Arbeit wird die Cauchy-Schwarz-Ungleichung meistens im folgenden Kontext verwendet: Seien I eine endliche Indexmenge, $m := |I| \in \mathbb{N}$ und $V := \mathbb{R}^m$ sowie $\langle \cdot, \cdot \rangle_2$ das euklidische Skalarprodukt, dann gilt für alle $x, y \in \mathbb{R}^I$

$$\left| \sum_{k \in I} x_k \cdot y_k \right| = |\langle x, y \rangle_2| \overset{113}{\leq} \|x\|_2 \|y\|_2 = \left(\sum_{k \in I} x_k^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{k \in I} y_k^2 \right)^{\frac{1}{2}} \tag{114}$$

Wählt man speziell $x_k \geq 0$ und $y_k = 1$ für alle $k \in I$, so erhält man:

$$\sum_{k \in I} x_k^{\frac{1}{2}} \leq N^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{k \in I} x_k \right)^{\frac{1}{2}} \tag{115}$$

Satz A.4: *(Fubini-Tonelli).*
Seien $(X_1, \Sigma_1, \nu_1), (X_2, \Sigma_2, \nu_2)$ σ-endliche Maßräume und $f : (X_1 \times X_2, \Sigma_1 \otimes \Sigma_2) \to (\overline{\mathbb{R}}, \mathcal{B}(\overline{\mathbb{R}}))$ sei messbar. Ferner gelte eine der folgenden Bedingungen:

(i) Für alle $(x, y) \in X_1 \times X_2$ ist $f(x, y) \geq 0$.

(ii) Eines der folgenden Integrale ist endlich:

$$\int_{X_2} \left(\int_{X_1} |f(x,y)| \, d\nu_1(x) \right) d\nu_2(y) \qquad \int_{X_1} \left(\int_{X_2} |f(x,y)| \, d\nu_2(y) \right) d\nu_1(x)$$

$$\int_{X_1 \times X_2} |f(x,y)| \, d\nu_1 \otimes \nu_2(x,y)$$

Dann ist f $\nu_1 \otimes \nu_2$-integrierbar und es gilt:

$$\begin{aligned} \int_{X_1 \times X_2} f(x,y) \, d\nu_1 \otimes \nu_2(x,y) &= \int_{X_1} \left(\int_{X_2} f(x,y) \, d\nu_2(y) \right) \, d\nu_1(x) \\ &= \int_{X_2} \left(\int_{X_1} f(x,y) \, d\nu_1(x) \right) \, d\nu_2(y) \end{aligned} \tag{116}$$

Beweis. Siehe [2], V.2.1. □

Satz A.5: *(Transformationssatz).*
Seien $m \in \mathbb{N}$ sowie $U, V \subseteq \mathbb{R}^m$ offen und $\varphi : U \to V$ ein Diffeomorphismus sowie $D\varphi(x)$ für alle $x \in \mathbb{R}^m$ die Jacobi-Matrix von φ in x. Ferner gelte eine der beiden folgenden Bedingungen:

$$\begin{aligned} f :& (V, \mathcal{B}(\mathbb{R}^m)|_V) \to (\overline{\mathbb{R}}_{\geq 0}, \mathcal{B}(\overline{\mathbb{R}}_{\geq 0})) \text{ ist messbar} \\ f :& (V, \mathcal{B}(\mathbb{R}^m)|_V) \to (\overline{\mathbb{R}}, \mathcal{B}(\overline{\mathbb{R}})) \text{ ist Lebesgue-integrierbar} \end{aligned}$$

Dann ist auch $(f \circ \varphi) \cdot |\det D\varphi|$ messbar bzw. Lebesgue-integrierbar und es gilt:

$$\int_V f(x) \, dx = \int_U f(\varphi(x)) |\det D\varphi(x)| \, dx \tag{117}$$

Beweis. Siehe [2], V.4.2. □

Satz A.6: *(Kugelkoordinaten).*
Seien $m \in \mathbb{N}$ und $S^{m-1} := \{\omega \in \mathbb{R}^m \mid \|\omega\|_2 = 1\}$ die m-dimensionale Einheitssphäre. Dann gibt es ein Oberflächenmaß σ_{m-1} auf S^{m-1}, sodass für jede Lebesgue-integrierbare Funktion $u : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ gilt:

$$\int_{\mathbb{R}^m} u(x) \, dx = \int_0^\infty \int_{S^{m-1}} r^{m-1} u(r\omega) \, d\sigma_{m-1}(\omega) \, dr \tag{118}$$

Beweis. Siehe 20.13 in [11]. □

Korollar A.7: *(Kugelvolumen).*
Sei $m \in \mathbb{N}$. Das Volumen einer Kugel mit Radius $r \in \mathbb{R}_{>0}$ in $\mathbb{R}^m$ beträgt:

$$\lambda_m(\overline{B_r(0)}) = \frac{\pi^{\frac{m}{2}}}{\Gamma\left(\frac{m}{2} + 1\right)} r^m \tag{119}$$

Beweis. Siehe V.1.8 in [2]. □

Lemma A.8: *(Mehrdimensionale partielle Integration für Testfunktionen).*
Seien $m \in \mathbb{N}$ und $u \in C_0^\infty(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$ sowie $v \in C^1(\mathbb{R}^m, \mathbb{C}) \cap \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$. Dann gilt die folgende partielle Integrationsformel:

$$\int_{\mathbb{R}^m} \partial_i u(x) \overline{v(x)} \, dx = - \int_{\mathbb{R}^m} u(x) \overline{\partial_i v(x)} \, dx \tag{120}$$

Ferner gilt für alle $v \in C^2(\mathbb{R}^m, \mathbb{C}) \cap \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$:

$$\int_{\mathbb{R}^m} \Delta u(x)\overline{v(x)}\, dx \;=\; -\int_{\mathbb{R}^m} \langle \nabla u(x), \nabla v(x) \rangle_2\, dx \;=\; \int_{\mathbb{R}^m} u(x)\overline{\Delta v(x)}\, dx \tag{121}$$

Darüberhinaus folgt für alle $\alpha \in \mathbb{N}_0^m$ und alle $v \in C^{|\alpha|}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C}) \cap \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$:

$$\int_{\mathbb{R}^m} D^\alpha u(x)\overline{v(x)}\, dx \;=\; (-1)^{|\alpha|} \int_{\mathbb{R}^m} u(x)\overline{D^\alpha v(x)}\, dx \tag{122}$$

Insbesondere sind alle klassischen, quadratintegrierbaren Ableitungen von v auch schwache Ableitungen.

Beweis. Die Gleichung 120 folgt aus Satz 2 von Abschnitt 10 in [3], die Gleichung 121 aus dem darauffolgenden Beispiel. Die Gleichung 122 erhält man durch mehrfache Anwendung von 120. □

Satz A.9: *(Beppo Levi).*
Es sei (X, Σ, ν) ein Maßraum. Für alle $n \in \mathbb{N}$ sei $f_n : (X, \Sigma) \to (\overline{\mathbb{R}}_{\geq 0}, \mathcal{B}(\overline{\mathbb{R}}_{\geq 0}))$ eine messbare Abbildung mit

$$\forall x \in X \quad f_n(x) \;\leq\; f_{n+1}(x)$$

Dann ist $f : (X, \Sigma) \to (\overline{\mathbb{R}}_{\geq 0}, \mathcal{B}(\overline{\mathbb{R}}_{\geq 0})),\;\; x \mapsto \sup_{n \in \mathbb{N}} f_n(x)$ ebenfalls messbar und es gilt:

$$\int_X f\, d\nu \;=\; \sup_{n \in \mathbb{N}} \int_X f_n\, d\nu \tag{123}$$

Beweis. Siehe [2], IV.2.7. □

Satz A.10: *(Majorisierte Konvergenz).*
Es sei (X, Σ, ν) ein Maßraum. Für alle $n \in \mathbb{N}$ sei $f_n : (X, \Sigma) \to (\overline{\mathbb{R}}, \mathcal{B}(\overline{\mathbb{R}}))$ eine messbare Abbildung und $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ konvergiere ν-fast-überall gegen eine messbare Funktion $f : (X, \Sigma) \to (\overline{\mathbb{R}}, \mathcal{B}(\overline{\mathbb{R}}))$. Weiter sei $g : (X, \Sigma, \nu) \to (\overline{\mathbb{R}}_{\geq 0}, \mathcal{B}(\overline{\mathbb{R}}_{\geq 0}))$ integrierbar und für alle $n \in \mathbb{N}$ gelte $|f_n| \leq g$ ν-fast-überall.
Dann sind f und f_n für alle $n \in \mathbb{N}$ ν-integrierbar und es gilt:

$$\lim_{n \to \infty} \int_X f_n\, d\nu \;=\; \int_X f\, d\nu \tag{124}$$

Beweis. Siehe [2], IV.5.2. □

Bemerkung A.11 *(Beweis von 1.9)*: Seien $v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^m, \mathbb{K})$ und $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$. Dann existiert $n_0 \in \mathbb{N}$ mit

$$\begin{aligned} \forall n \in \mathbb{N}_{\geq n_0} \quad \|w - D^\alpha u_n\|_{\mathcal{L}^2} \;&<\; \min\left\{1, \frac{\epsilon}{2\|v\|_{\mathcal{L}^2}}\right\} \\ \forall n \in \mathbb{N}_{\geq n_0} \quad \|u - u_n\|_{\mathcal{L}^2} \;&<\; \min\left\{1, \frac{\epsilon}{2\|D^\alpha v\|_{\mathcal{L}^2}}\right\} \end{aligned} \tag{125}$$

Mit partieller Integration und der Hölder-Ungleichung folgt dann für alle $n \in \mathbb{N}_{\geq n_0}$:

$$\begin{aligned}
& \left| \int_{\mathbb{R}^m} w(x)\overline{v(x)}\, dx - (-1)^{|\alpha|} \int_{\mathbb{R}^m} u(x)\overline{D^\alpha v(x)}\, dx \right| \\
= & \left| \int_{\mathbb{R}^m} (w(x) - D^\alpha u_n(x))\overline{v(x)}\, dx + \int_{\mathbb{R}^m} D^\alpha u_n(x)\overline{v(x)}\, dx - (-1)^{|\alpha|} \int_{\mathbb{R}^m} u(x)\overline{D^\alpha v(x)}\, dx \right| \\
\overset{122}{=} & \left| \int_{\mathbb{R}^m} (w(x) - D^\alpha u_n(x))\overline{v(x)}\, dx + (-1)^{|\alpha|} \int_{\mathbb{R}^m} (u_n(x) - u(x))\overline{D^\alpha v(x)}\, dx \right| \\
\leq & \left| \int_{\mathbb{R}^m} (w(x) - D^\alpha u_n(x))\overline{v(x)}\, dx \right| + \left| \int_{\mathbb{R}^m} (u_n(x) - u(x))\overline{D^\alpha v(x)}\, dx \right| \\
\overset{112}{\leq} & \|w - D^\alpha u_n\|_{\mathcal{L}^2} \|v\|_{\mathcal{L}^2} + \|u_n - u\|_{\mathcal{L}^2} \|D^\alpha v\|_{\mathcal{L}^2} \\
\overset{125}{<} & \frac{\epsilon}{2} + \frac{\epsilon}{2} \\
= & \epsilon
\end{aligned}$$

Da ϵ beliebig war, impliziert dies

$$\int_{\mathbb{R}^m} w(x)\overline{v(x)}\, dx \;=\; (-1)^{|\alpha|} \int_{\mathbb{R}^m} u(x)\overline{D^\alpha v(x)}\, dx$$

also ist $w = D^\alpha u$.

Bemerkung A.12 *(Beweis von 1.10)*: Für alle $w \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^m, \mathbb{K})$ und $\beta \in \mathbb{N}_0^m$ definiere

$$|w|_{\beta,n} := \left(\int_{\mathbb{R}^m \setminus \overline{B_n(0)}} |D^\beta w(x)|^2\, dx \right)^{\frac{1}{2}} \;=\; \left(\int_{\mathbb{R}^m} \chi_{\mathbb{R}^m \setminus \overline{B_n(0)}}(x) |D^\beta w(x)|^2\, dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

Wie in 3.22 aus [1] (dort für die Normen $\|\cdot\|_{m,p,\Omega}$ und $\|\cdot\|_{m,p,\Omega_\epsilon}$) lässt sich zeigen, dass eine Konstante $C \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ existiert, sodass für alle $n \in \mathbb{N}$ gilt:

$$\|D^\alpha u_n - D^\alpha u\|_{\mathcal{L}^2}^2 \;\leq\; C \sum_{\substack{\beta \in \mathbb{N}_0^m, \\ \beta \leq \alpha}} |u|_{\beta,n}^2$$

Es bleibt zu zeigen: $\lim\limits_{n \to \infty} |u|_{\beta,n} = 0$ für alle $\beta \in \mathbb{N}_0^m$ mit $\beta \leq \alpha$.
Sei also $\beta \in \mathbb{N}_0^m$ mit $\beta \leq \alpha$. Dann gilt:

$$\forall n \in \mathbb{N} \quad \forall x \in \mathbb{R}^m \quad \left| \chi_{\mathbb{R}^m \setminus \overline{B_n(0)}}(x) |D^\beta u(x)|^2 \right| \;\leq\; |D^\beta u(x)|^2$$

und $|D^\beta u|^2$ ist nach Voraussetzung Lebesgue-integrierbar. Ferner konvergiert die Funktionenfolge $\left(\chi_{\mathbb{R}^m \setminus \overline{B_n(0)}} \cdot |D^\beta u|^2 \right)_{n \in \mathbb{N}}$ offenbar punktweise λ_m-fast-überall gegen die Nullfunktion. Nach dem Satz von der majorisierten Konvergenz folgt:

$$\lim_{n \to \infty} |u|_{\beta,n} \;=\; \lim_{n \to \infty} \int_{\mathbb{R}^m} \chi_{\mathbb{R}^m \setminus \overline{B_n(0)}}(x) |D^\beta u(x)|^2\, dx \;\overset{124}{=}\; \int_{\mathbb{R}^m} 0\, dx \;=\; 0$$

Bemerkung A.13 *(Beweis von 1.12)*: (ii) Sei zunächst a stetig. Insbesondere existiert aufgrund der Stetigkeit von a in $(0,0) \in U \times V$ eine Konstante $\delta \in \mathbb{R}_{>0}$, sodass für alle $(x,y) \in U \times V$

mit

$$\|x\|_U = \|x-0\|_U \leq \delta \qquad\qquad \|y\|_V = \|y-0\|_V \leq \delta$$

folgt:

$$1 \geq |a(x,y)-a(0,0)| \geq |a(x,y)|-|a(0,0)| \tag{126}$$

Daraus ergibt sich für alle $(x,y) \in U \times V$:

$$\begin{aligned} |a(x,y)| &= \left| \frac{\|x\|_U}{\delta}\frac{\|y\|_V}{\delta} a\left(\frac{\delta}{\|x\|_U}x, \frac{\delta}{\|y\|_V}y\right)\right| \\ &= \frac{\|x\|_U\|y\|_V}{\delta^2}\left|a\left(\frac{\delta}{\|x\|_U}x, \frac{\delta}{\|y\|_V}y\right)\right| \\ &\overset{126}{\leq} \frac{\|x\|_U\|y\|_V}{\delta^2}(1+|a(0,0)|) \\ &= \frac{1+|a(0,0)|}{\delta^2}\|x\|_U\|y\|_V \end{aligned}$$

Also ist $\xi_S := \frac{1+|a(0,0)|}{\delta^2} \in \mathbb{R}_{>0}$ die gesuchte Stetigkeitskonstante.
Nun sei umgekehrt $\xi_S \in \mathbb{R}_{>0}$ mit

$$\forall (u,v) \in U \times V \quad |a(u,v)| \leq \xi_S\|u\|_U\|v\|_V$$

Seien weiter $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$ und $(x_0,y_0) \in U \times V$. Setze

$$\delta := \min\left\{\sqrt{\frac{\epsilon}{2\xi_S}}, \frac{\epsilon}{2\xi_S(\|x_0\|_U+\|y_0\|_V)}\right\} \in \mathbb{R}_{>0} \tag{127}$$

Dann folgt für alle $(x,y) \in U \times V$ mit $\|x-x_0\|_U < \delta$ und $\|y-y_0\|_V < \delta$:

$$\begin{aligned} |a(x,y)-a(x_0,y_0)| &= |a(x-x_0,y)+a(x_0,y-y_0)| \\ &\leq |a(x-x_0,y)|+|a(x_0,y-y_0)| \\ &\leq \xi_S\|x-x_0\|_U\|y\|_V+\xi_S\|x_0\|_U\|y-y_0\|_V \\ &\leq \xi_S\|x-x_0\|_U(\|y-y_0\|_V+\|y_0\|_V)+\xi_S\|x_0\|_U\|y-y_0\|_V \\ &< \xi_S\delta(\delta+\|y_0\|_V)+\xi_S\|x_0\|_U\delta \\ &= \xi_S\delta^2+\xi_S\delta(\|x_0\|_U+\|y_0\|_V) \\ &\overset{127}{\leq} \frac{\epsilon}{2}+\frac{\epsilon}{2} \\ &= \epsilon \end{aligned}$$

Also ist a stetig in (x_0,y_0). Es folgt die Behauptung.

Bemerkung A.14 *(Beweis von 1.13)*: Seien $u \in U$, $v \in V$ und $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}, (u'_n)_{n\in\mathbb{N}} \in D_U^{\mathbb{N}}$ sowie $(v_n)_{n\in\mathbb{N}}, (v'_n)_{n\in\mathbb{N}} \in D_V^{\mathbb{N}}$ mit

$$\lim_{n\to\infty}\|u-u_n\|_U = 0 = \lim_{n\to\infty}\|u-u'_n\|_U$$

$$\lim_{n\to\infty} \|v - v_n\|_V \quad = \quad 0 \quad = \quad \lim_{n\to\infty} \|v - v'_n\|_V$$

Setze $a(u,v) := \lim_{n\to\infty} a(u_n, v_n)$. Weiter sei $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$. Setze

$$\tilde{\epsilon} := \min\left\{\sqrt{\frac{\epsilon}{8\xi_S}}, \frac{\epsilon}{4\xi_S(\|u\|_U + \|v\|_V)}\right\} \in \mathbb{R}_{>0} \tag{128}$$

wobei ξ_S die Stetigkeitskonstante von $a|_{D_U\times D_V}$ bezeichne. Nach Definition der Konvergenz existiert $n_0 \in \mathbb{N}$ mit

$$\forall n \in \mathbb{N}_{\geq n_0} \quad \max\{\|u - u_n\|_U, \|u - u'_n\|_U, \|v - v_n\|_V, \|v - v'_n\|_V\} \; < \; \tilde{\epsilon} \tag{129}$$

Die Stetigkeit und Bilinearität von $a|_{D_U\times D_V}$ implizieren nun:

$$|a(u,v)| \; = \; \left|\lim_{n\to\infty} a(u_n,v_n)\right| \; = \; \lim_{n\to\infty} |a(u_n,v_n)| \; \leq \; \lim_{n\to\infty} \xi_S \|u_n\|_U \|v_n\|_V \; = \; \xi_S \|u\|_U \|v\|_V$$

und

$$\begin{aligned}
& |a(u_n,v_n) - a(u'_n,v'_n)| \\
= \; & |a(u_n, v_n - v'_n) + a(u_n - u'_n, v'_n)| \\
\leq \; & |a(u_n, v_n - v'_n)| + |a(u_n - u'_n, v'_n)| \\
\leq \; & \xi_S \|u_n\|_U \|v_n - v'_n\|_V + \xi_S \|u_n - u'_n\|_U \|v'_n\|_V \\
= \; & \xi_S(\|u_n - u + u\|_U \|v_n - v + v - v'_n\|_V + \|u_n - u + u - u'_n\|_U \|v'_n - v + v\|_V) \\
\leq \; & \xi_S((\|u_n - u\|_U + \|u\|_U)(\|v_n - v\|_V + \|v - v'_n\|_V) \\
& \quad + (\|u_n - u\|_U + \|u - u'_n\|_U)(\|v'_n - v\|_V + \|v\|_V)) \\
\overset{129}{<} \; & \xi_S((\tilde{\epsilon} + \|u\|_U)(\tilde{\epsilon} + \tilde{\epsilon}) + (\tilde{\epsilon} + \tilde{\epsilon})(\tilde{\epsilon} + \|v\|_V)) \\
= \; & 4\xi_S\tilde{\epsilon}^2 + 2\xi_S(\|u\|_U + \|v\|_V)\tilde{\epsilon} \\
\overset{128}{\leq} \; & \frac{\epsilon}{2} + \frac{\epsilon}{2} \\
= \; & \epsilon
\end{aligned}$$

Es folgt $\lim_{n\to\infty} a(u_n,v_n) = \lim_{n\to\infty} a(u'_n,v'_n)$, also ist a wohldefiniert und damit als stetige Fortsetzung eindeutig.

Bemerkung A.15 *zu 3.3*: (i) Sei $\Phi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3,\; x \mapsto x + c$. Dann ist Φ eine lineare Abbildung mit $\ker(\Phi) = \{0\}$, also ein Diffeomorphismus, und es gilt für alle $x \in \mathbb{R}^3$:

$$|\det(D\Phi(x))| \; = \; |\det(I_3)| \; = \; 1$$

(ii) Es seien $u_c := u \circ \Phi$ und $\pi_\gamma : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R},\; x \mapsto x_\gamma$ für alle $\gamma \in \{1,2,3\}$ die Projektion auf die

Koordinate γ. Dann folgt mit der mehrdimensionalen Kettenregel für alle $\alpha \in \{1,2,3\}$:

$$\partial_{1,\alpha} u_c(x) = \sum_{\gamma=1}^{3} \partial_{1,\gamma} u(\Phi(x)) \partial_{1,\alpha}(\pi_\gamma \circ \Phi)(x) = \partial_{1,\alpha} u(\Phi(x)) \partial_{1,\alpha}(\pi_\alpha \circ \Phi)(x) = \partial_{1,\alpha} u(x+c) \tag{130}$$

Bemerkung A.16 *zu 3.5*: (i) Es seien

$$\begin{aligned} \Phi_1 : & \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3, \ (x,y) \longmapsto (x+y, y) \\ \Phi_2 : & \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3, \ (x,y) \longmapsto (x, x-y) \end{aligned}$$

Dann sind Φ_1 und Φ_2 als lineare Abbildungen mit trivialem Kern offensichtlich Diffeomorphismen und es gelten für alle $x, y \in \mathbb{R}^3$:

$$\begin{aligned} |\det(D\Phi_1(x,y))| &= \left| \det \begin{pmatrix} I_3 & I_3 \\ 0 & I_3 \end{pmatrix} \right| = |\det(I_3)^2| = 1 \\ |\det(D\Phi_2(x,y))| &= \left| \det \begin{pmatrix} I_3 & 0 \\ I_3 & -I_3 \end{pmatrix} \right| = |\det(I_3)\det(-I_3)| = 1 \end{aligned}$$

Im Beweis von (i) in 3.5 wird Φ_1 auf das vordere, Φ_2 auf das hintere Integral angewendet. Für (ii) wird zunächst Φ_1, dann nach Rücktransformation Φ_2 gebraucht.

(ii) Es seien

$$\begin{aligned} \forall y \in \mathbb{R}^3 \quad \varphi_y : & \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3, \ x \longmapsto (x+y, y) \\ \forall x \in \mathbb{R}^3 \quad \psi_x : & \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3, \ y \longmapsto (x, x-y) \end{aligned}$$

Dann gelten für alle $x, y \in \mathbb{R}^3$ und $\alpha \in \{1,2,3\}$:

$$v_x = u \circ \psi_x \qquad v_y = u \circ \varphi_y \qquad v_{\alpha,x} = \partial_{1,\alpha} u \circ \psi_x$$

Ferner sei $\pi_{l,\gamma} : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}, \ (x,y) \mapsto (x,y)_{l,\gamma}$ für alle $(l,\gamma) \in \{1,2\} \times \{1,2,3\}$ die Projektion auf die Koordinate (l,γ). Es folgt mit der mehrdimensionalen Kettenregel für alle $\alpha, \beta \in \{1,2,3\}$ und alle $x, y \in \mathbb{R}^3$:

$$\begin{aligned} \partial_{1,\alpha} v_y(x) &= \sum_{l=1}^{2} \sum_{\gamma=1}^{3} \partial_{l,\gamma} u(\varphi_y(x)) \partial_{1,\alpha}(\pi_{l,\gamma} \circ \varphi_y)(x) \\ &= \partial_{1,\alpha} u(\varphi_y(x)) \partial_{1,\alpha}(\pi_{1,\alpha} \circ \varphi_y)(x) \\ &= \partial_{1,\alpha} u(x+y, y) \end{aligned} \tag{131}$$

$$\begin{aligned} \partial_{1,\beta} v_x(y) &= \sum_{l=1}^{2} \sum_{\gamma=1}^{3} \partial_{l,\gamma} u(\psi_x(y)) \partial_{1,\beta}(\pi_{l,\gamma} \circ \psi_x)(y) \\ &= \partial_{2,\beta} u(\psi_x(y)) \partial_{1,\beta}(\pi_{2,\beta} \circ \psi_x)(y) \\ &= -\partial_{2,\beta} u(x, x-y) \end{aligned} \tag{132}$$

$$\begin{aligned}\partial_{1,\beta} v_{\alpha,x}(y) &= \sum_{l=1}^{2}\sum_{\gamma=1}^{3} \partial_{l,\gamma}\partial_{1,\alpha} u(\psi_x(y))\partial_{1,\beta}(\pi_{l,\gamma}\circ\psi_x)(y) \\ &= \partial_{2,\beta}\partial_{1,\alpha} u(\psi_x(y))\partial_{1,\beta}(\pi_{2,\beta}\circ\psi_x)(y) \\ &= -\partial_{2,\beta}\partial_{1,\alpha} u(x, x-y)\end{aligned} \tag{133}$$

Bemerkung A.17 *zu 3.6 und 3.7*: Es gelten fast überall die folgenden Identitäten:

$$\sum_{\beta=1}^{3}(\partial_{2,\beta} f)^2 = \sum_{\alpha=1}^{3}(\partial_{1,\alpha} f)^2 = f^4 \tag{134}$$

$$\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} f)^2 = 6f^{-6} \tag{135}$$

Seien $\alpha,\beta \in \{1,2,3\}$ und $(x,y) \in (\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)\setminus D$. Dann folgen mit der Quotientenregel:

$$\begin{aligned}\partial_{2,\beta} f(x,y) &= \frac{\partial}{\partial y_\beta}\frac{1}{((x_1-y_1)^2+(x_2-y_2)^2+(x_3-y_3)^2)^{\frac{1}{2}}} \\ &= \frac{0 - 1\cdot\frac{1}{2}((x_1-y_1)^2+(x_2-y_2)^2+(x_3-y_3)^2)^{-\frac{1}{2}}2(x_\beta-y_\beta)(-1)}{(x_1-y_1)^2+(x_2-y_2)^2+(x_3-y_3)^2} \\ &= \frac{x_\beta-y_\beta}{\|x-y\|_2^3}\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}\partial_{1,\alpha} f(x,y) &= \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\frac{1}{((x_1-y_1)^2+(x_2-y_2)^2+(x_3-y_3)^2)^{\frac{1}{2}}} \\ &= \frac{0 - 1\cdot\frac{1}{2}((x_1-y_1)^2+(x_2-y_2)^2+(x_3-y_3)^2)^{-\frac{1}{2}}2(x_\alpha-y_\alpha)}{(x_1-y_1)^2+(x_2-y_2)^2+(x_3-y_3)^2} \\ &= -\frac{x_\alpha-y_\alpha}{\|x-y\|_2^3}\end{aligned}$$

sowie für $\alpha \neq \beta$

$$\begin{aligned}\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} f(x,y) &= \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\frac{x_\beta-y_\beta}{\|x-y\|_2^3} \\ &= \frac{0-(x_\beta-y_\beta)\frac{3}{2}\|x-y\|_2 2(x_\alpha-y_\alpha)}{\|x-y\|_2^6} \\ &= -3\frac{(x_\alpha-y_\alpha)(x_\beta-y_\beta)}{\|x-y\|_2^5}\end{aligned}$$

und für $\alpha = \beta$

$$\begin{aligned}\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} f(x,y) &= \frac{\partial}{\partial x_\beta}\frac{x_\beta-y_\beta}{\|x-y\|_2^3} \\ &= \frac{1\|x-y\|_2^3-(x_\beta-y_\beta)\frac{3}{2}\|x-y\|_2 2(x_\beta-y_\beta)}{\|x-y\|_2^6}\end{aligned}$$

$$= \|x-y\|_2^{-3} - 3\frac{(x_\beta - y_\beta)^2}{\|x-y\|_2^5}$$

Also:

$$\begin{aligned}
\sum_{\beta=1}^{3}(\partial_{2,\beta} f(x,y))^2 &= \sum_{\beta=1}^{3}\frac{(x_\beta-y_\beta)^2}{\|x-y\|_2^6} = \frac{\|x-y\|_2^2}{\|x-y\|_2^6} = \|x-y\|_2^{-4} = f(x,y)^4 \\
\sum_{\alpha=1}^{3}(\partial_{1,\alpha} f(x,y))^2 &= \sum_{\beta=1}^{3}(\partial_{2,\beta} f(x,y))^2 = f(x,y)^4
\end{aligned}$$

Ferner:

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3}\left(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} f(x,y)\right)^2 &= \sum_{\alpha=1}^{3}(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\alpha} f(x,y))^2 + \sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta\in\{1,2,3\}\setminus\{\alpha\}}\left(\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} f(x,y)\right)^2 \\
&= \sum_{\alpha=1}^{3}\left(\|x-y\|_2^{-6} - 6\frac{(x_\alpha-y_\alpha)^2}{\|x-y\|_2^8} + \left(-3\frac{(x_\alpha-y_\alpha)^2}{\|x-y\|_2^5}\right)^2\right) \\
&\quad + \sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta\in\{1,2,3\}\setminus\{\alpha\}}\left(-3\frac{(x_\alpha-y_\alpha)(x_\beta-y_\beta)}{\|x-y\|_2^5}\right)^2 \\
&= 3\|x-y\|_2^{-6} - 6\sum_{\alpha=1}^{3}\frac{(x_\alpha-y_\alpha)^2}{\|x-y\|_2^8} + \sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} 9\frac{(x_\alpha-y_\alpha)^2(x_\beta-y_\beta)^2}{\|x-y\|_2^{10}} \\
&= 3\|x-y\|_2^{-6} - 6\frac{\|x-y\|_2^2}{\|x-y\|_2^8} + 9\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\frac{(x_\alpha-y_\alpha)^2}{\|x-y\|_2^5}\right)^2 \\
&= -3\|x-y\|_2^{-6} + 9\left(\frac{\|x-y\|_2^2}{\|x-y\|_2^5}\right)^2 \\
&= -3\|x-y\|_2^{-6} + 9\|x-y\|_2^{-6} \\
&= 6\|x-y\|_2^{-6} \\
&= 6f(x,y)^6
\end{aligned}$$

Bemerkung A.18 *zu 3.10*: (i) Die Abbildung

$$h : \mathbb{R}_{\geq 0} \longrightarrow \mathbb{R}, \qquad r \longmapsto \begin{cases} \frac{31}{24}, & r \in \left[0, \frac{1}{2}\right) \\ 6r^4 - \frac{52}{3}r^3 + 17r^2 - 7r + \frac{7}{3}, & r \in \left[\frac{1}{2}, 1\right] \\ \frac{1}{r}, & r \in (1, \infty) \end{cases}$$

ist zweimal stetig differenzierbar.
Es ist offenbar $h|_{[0,\frac{1}{2})\cup(\frac{1}{2},1)\cup(1,\infty)}$ zweimal stetig differenzierbar und es gilt für alle $r \in \mathbb{R}_{\geq 0}$:

$$h'(r) = \begin{cases} 0, & r \in \left[0, \frac{1}{2}\right) \\ 24r^3 - 52r^2 + 34r - 7, & r \in \left(\frac{1}{2}, 1\right) \\ -\frac{1}{r^2}, & r \in (1, \infty) \end{cases} \qquad h''(r) = \begin{cases} 0, & r \in \left[0, \frac{1}{2}\right) \\ 72r^2 - 104r + 34, & r \in \left(\frac{1}{2}, 1\right) \\ \frac{2}{r^3}, & r \in (1, \infty) \end{cases}$$

Außerdem gelten:

$$\begin{array}{rcl}
\lim\limits_{r\nearrow\frac{1}{2}} h(r) & = & \frac{31}{24} \;=\; 6\left(\frac{1}{2}\right)^4 - \frac{52}{3}\left(\frac{1}{2}\right)^3 + 17\left(\frac{1}{2}\right)^2 - 7\frac{1}{2} + \frac{7}{3} \;=\; \lim\limits_{r\searrow\frac{1}{2}} h(r) \\
\lim\limits_{r\nearrow 1} h(r) & = & 6\cdot 1^4 - \frac{52}{3}\cdot 1^3 + 17\cdot 1^2 - 7\cdot 1 + \frac{7}{3} \;=\; 1 \;=\; \frac{1}{1} \;=\; \lim\limits_{r\searrow 1} h(r) \\
\lim\limits_{r\nearrow\frac{1}{2}} h'(r) & = & 0 \;=\; 24\left(\frac{1}{2}\right)^3 - 52\left(\frac{1}{2}\right)^2 + 34\frac{1}{2} - 7 \;=\; \lim\limits_{r\searrow\frac{1}{2}} h'(r) \\
\lim\limits_{r\nearrow 1} h'(r) & = & 24\cdot 1^3 - 52\cdot 1^2 + 34\cdot 1 - 7 \;=\; -1 \;=\; -\frac{1}{1^2} \;=\; \lim\limits_{r\searrow 1} h'(r) \\
\lim\limits_{r\nearrow\frac{1}{2}} h''(r) & = & 0 \;=\; 72\left(\frac{1}{2}\right)^2 - 104\frac{1}{2} + 34 \;=\; \lim\limits_{r\searrow\frac{1}{2}} h''(r) \\
\lim\limits_{r\nearrow 1} h''(r) & = & 72\cdot 1^2 - 104\cdot 1 + 34 \;=\; 2 \;=\; \frac{2}{1^3} \;=\; \lim\limits_{r\searrow 1} h''(r)
\end{array}$$

Also ist h auf $[0,\infty)$ zweimal stetig differenzierbar.
(ii) Es seien $n \in \mathbb{N}$ sowie $\alpha, \beta \in \{1,2,3\}$, ferner $u, v \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$ mit $u|_D = 0$ und

$$f_n : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}, (x,y) \longmapsto nh(n\|x-y\|_2)$$

Dann existieren integrierbare Majoranten für die Abbildungen

$$\begin{array}{lll}
f_n \cdot \partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} u \cdot v & f_n \cdot u \cdot \partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} v & \\
\partial_{1,\alpha} f_n \cdot \partial_{2,\beta} u \cdot v & \partial_{2,\beta} f_n \cdot \partial_{1,\alpha} u \cdot v & \partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} f_n \cdot u \cdot v
\end{array}$$

Es sei $(x,y) \in (\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3) \setminus D$. Dann gelten:

$$\begin{array}{rcl}
\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\|x-y\|_2 & = & \frac{\partial}{\partial x_\alpha}((x_1-y_1)^2 + (x_2-y_2)^2 + (x_3-y_3)^2)^{\frac{1}{2}} \\
& = & \frac{1}{2} 2(x_\alpha - y_\alpha)((x_1-y_1)^2 + (x_2-y_2)^2 + (x_3-y_3)^2)^{-\frac{1}{2}} \\
& = & \frac{x_\alpha - y_\alpha}{\|x-y\|_2}
\end{array}$$

und

$$\frac{\partial}{\partial y_\alpha}\|x-y\|_2 \;=\; -\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\|x-y\|_2 \;=\; \frac{y_\alpha - x_\alpha}{\|x-y\|_2}$$

Es folgen:

$$\begin{array}{rcl}
\partial_{1,\alpha} f_n(x,y) & = & \frac{\partial}{\partial x_\alpha} nh(n\|x-y\|_2) \\
& = & nh'(n\|x-y\|_2)\frac{\partial}{\partial x_\alpha}(n\|x-y\|_2) \\
& = & n^2 \frac{x_\alpha - y_\alpha}{\|x-y\|_2} h'(n\|x-y\|_2)
\end{array} \tag{136}$$

bzw.

$$
\begin{aligned}
\partial_{2,\beta} f_n(x,y) &= \frac{\partial}{\partial x_\alpha} n h(n\|x-y\|_2) \\
&= n h'(n\|x-y\|_2) \frac{\partial}{\partial y_\beta}(n\|x-y\|_2) \\
&= n^2 \frac{y_\beta - x_\beta}{\|x-y\|_2} h'(n\|x-y\|_2)
\end{aligned} \tag{137}
$$

Aus der Produkt- und Quotientenregel ergeben sich für $\alpha = \beta$

$$
\begin{aligned}
&\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} f_n(x,y) \\
\overset{137}{=}\ & \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left(n^2 \frac{y_\alpha - x_\alpha}{\|x-y\|_2} h'(n\|x-y\|_2)\right) \\
=\ & n^2 \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left(\frac{y_\alpha - x_\alpha}{\|x-y\|_2}\right) h'(n\|x-y\|_2) + \frac{y_\alpha - x_\alpha}{\|x-y\|_2} h''(n\|x-y\|_2) \frac{\partial}{\partial x_\alpha}(n\|x-y\|_2)\right) \\
\overset{136}{=}\ & n^2 \left(\frac{-\|x-y\|_2 - (y_\alpha - x_\alpha)\frac{x_\alpha - y_\alpha}{\|x-y\|_2}}{\|x-y\|_2^2} h'(n\|x-y\|_2) + n \frac{(y_\alpha - x_\alpha)(x_\alpha - y_\alpha)}{\|x-y\|_2^2} h''(n\|x-y\|_2)\right) \\
=\ & n^2 \left(\frac{(x_\alpha - y_\alpha)^2 - \|x-y\|_2^2}{\|x-y\|_2^3} h'(n\|x-y\|_2) + n \frac{(x_\alpha - y_\alpha)^2}{\|x-y\|_2^2} h''(n\|x-y\|_2)\right)
\end{aligned} \tag{138}
$$

und für $\alpha \neq \beta$:

$$
\begin{aligned}
&\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} f_n(x,y) \\
\overset{137}{=}\ & \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left(n^2 \frac{y_\beta - x_\beta}{\|x-y\|_2} h'(n\|x-y\|_2)\right) \\
=\ & n^2 (y_\beta - x_\beta)\left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\frac{1}{\|x-y\|_2} h'(n\|x-y\|_2) + \frac{1}{\|x-y\|_2} h''(n\|x-y\|_2) \frac{\partial}{\partial x_\alpha}(n\|x-y\|_2)\right) \\
\overset{136}{=}\ & n^2 (y_\beta - x_\beta)\left(\frac{y_\alpha - x_\alpha}{\|x-y\|_2^3} h'(n\|x-y\|_2) + n \frac{x_\alpha - y_\alpha}{\|x-y\|_2^2} h''(n\|x-y\|_2)\right)
\end{aligned} \tag{139}
$$

Als Konsequenz gelten die folgenden Ungleichungen:

$$
\begin{aligned}
&|\partial_{1,\alpha} f_n(x,y)| \\
\overset{136}{=}\ & n^2 \frac{|x_\alpha - y_\alpha|}{\|x-y\|_2} |h'(n\|x-y\|_2)| \\
\leq\ & n^2 \frac{\|x-y\|_2}{\|x-y\|_2} |h'(n\|x-y\|_2)| \\
=\ & n^2 |h'(n\|x-y\|_2)|
\end{aligned} \tag{140}
$$

sowie für $\alpha = \beta$

$$\begin{aligned}
& \left|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} f_n(x,y)\right| \\
\overset{138}{=} & \left| n^2 \left(\frac{(x_\alpha - y_\alpha)^2 - \|x-y\|_2^2}{\|x-y\|_2^3} h'(n\|x-y\|_2) + n \frac{(x_\alpha - y_\alpha)^2}{\|x-y\|_2^2} h''(n\|x-y\|_2) \right) \right| \\
\leq & \; n^2 \frac{|(x_\alpha - y_\alpha)^2 - \|x-y\|_2^2|}{\|x-y\|_2^3} |h'(n\|x-y\|_2)| + n^3 \frac{(x_\alpha - y_\alpha)^2}{\|x-y\|_2^2} |h''(n\|x-y\|_2)| \\
\leq & \; n^2 \frac{\|x-y\|_2^2}{\|x-y\|_2^3} |h'(n\|x-y\|_2)| + n^3 \frac{\|x-y\|_2^2}{\|x-y\|_2^2} |h''(n\|x-y\|_2)| \\
= & \; \frac{n^2}{\|x-y\|_2} |h'(n\|x-y\|_2)| + n^3 |h''(n\|x-y\|_2)|
\end{aligned} \tag{141}$$

und für $\alpha \neq \beta$

$$\begin{aligned}
& \left|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} f_n(x,y)\right| \\
\overset{139}{=} & \left| n^2 (y_\beta - x_\beta) \left(\frac{y_\alpha - x_\alpha}{\|x-y\|_2^3} h'(n\|x-y\|_2) + n \frac{x_\alpha - y_\alpha}{\|x-y\|_2^2} h''(n\|x-y\|_2) \right) \right| \\
\leq & \; n^2 \frac{|y_\beta - x_\beta||y_\alpha - x_\alpha|}{\|x-y\|_2^3} |h'(n\|x-y\|_2)| + n^3 \frac{|x_\beta - y_\beta||x_\alpha - y_\alpha|}{\|x-y\|_2^2} |h''(n\|x-y\|_2)| \\
\leq & \; n^2 \frac{\max_{l \in \{1,2,3\}} |y_l - x_l|^2}{\|x-y\|_2^3} |h'(n\|x-y\|_2)| + n^3 \frac{\max_{l \in \{1,2,3\}} |x_l - y_l|^2}{\|x-y\|_2^2} |h''(n\|x-y\|_2)| \\
\leq & \; n^2 \frac{\|x-y\|_2^2}{\|x-y\|_2^3} |h'(n\|x-y\|_2)| + n^3 \frac{\|x-y\|_2^2}{\|x-y\|_2^2} |h''(n\|x-y\|_2)| \\
= & \; \frac{n^2}{\|x-y\|_2} |h'(n\|x-y\|_2)| + n^3 |h''(n\|x-y\|_2)|
\end{aligned} \tag{142}$$

Da h, h', h'' stetige Abbildungen sind, nehmen sie auf dem Kompaktum $\left[\frac{1}{2}, 1\right]$ Maximum und Minimum an, es existieren[14] also

$$\xi_0 := \max_{r \in \left[\frac{1}{2},1\right]} |h(r)| \in \mathbb{R} \qquad \xi_1 := \max_{r \in \left[\frac{1}{2},1\right]} |h'(r)| \in \mathbb{R} \qquad \xi_2 := \max_{r \in \left[\frac{1}{2},1\right]} |h''(r)| \in \mathbb{R}$$

Schreibe $r := n\|x-y\|_2$, dann gelten

$$r \in \left[0, \frac{1}{2}\right) \iff n < \frac{1}{2\|x-y\|_2} \tag{143}$$

$$r \in \left[\frac{1}{2}, 1\right] \iff \frac{1}{2\|x-y\|_2} \leq n \leq \frac{1}{\|x-y\|_2} \tag{144}$$

[14] Wie eine weitere Kurvendiskussion ergäbe, gelten tatsächlich $\xi_0 = \frac{31}{24}, \xi_1 = \frac{256}{243}$ und $\xi_2 = \frac{32}{9}$.

und somit folgen

$$
\begin{aligned}
|f_n(x,y)| &= n|h(r)|\chi_{[0,\frac{1}{2})}(r) + n|h(r)|\chi_{[\frac{1}{2},1]}(r) + n|h(r)|\chi_{(1,\infty)}(r) \\
&= n\frac{31}{24}\chi_{[0,\frac{1}{2})}(r) + n|h(r)|\chi_{[\frac{1}{2},1]}(r) + n\frac{1}{n\|x-y\|_2}\chi_{(1,\infty)}(r) \\
&\overset{143,144}{\leq} \frac{31}{48\|x-y\|_2}\chi_{[0,\frac{1}{2})}(r) + \frac{\xi_0}{\|x-y\|_2}\chi_{[\frac{1}{2},1]}(r) + \frac{1}{\|x-y\|_2}\chi_{(1,\infty)}(r) \\
&\leq \frac{\max\{\frac{31}{48},\xi_0,1\}}{\|x-y\|_2} = \frac{\max\{\xi_0,1\}}{\|x-y\|_2}
\end{aligned}
\tag{145}
$$

sowie

$$
\begin{aligned}
|\partial_{1,\alpha} f_n(x,y)| &\overset{140}{\leq} n^2|h'(r)|\chi_{[0,\frac{1}{2})}(r) + n^2|h'(r)|\chi_{[\frac{1}{2},1]}(r) + n^2|h'(r)|\chi_{(1,\infty)}(r) \\
&= n^2|h'(r)|\chi_{[\frac{1}{2},1]}(r) + n^2\frac{1}{(n\|x-y\|_2)^2}\chi_{(1,\infty)}(r) \\
&\overset{144}{\leq} \frac{\xi_1}{\|x-y\|_2^2}\chi_{[\frac{1}{2},1]}(r) + \frac{1}{\|x-y\|_2^2}\chi_{(1,\infty)}(r) \\
&\leq \frac{\max\{\xi_1,1\}}{\|x-y\|_2^2}
\end{aligned}
\tag{146}
$$

weiter

$$
|\partial_{2,\beta} f_n(x,y)| \overset{136,137}{=} |\partial_{1,\beta} f_n(x,y)| \overset{146}{\leq} \frac{\max\{\xi_1,1\}}{\|x-y\|_2^2}
\tag{147}
$$

und außerdem

$$
\begin{aligned}
&|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta} f_n(x,y)| \\
\overset{141,142}{\leq}& \left(\frac{n^2}{\|x-y\|_2}|h'(r)| + n^3|h''(r)|\right)\chi_{[0,\frac{1}{2})}(r) + \left(\frac{n^2}{\|x-y\|_2}|h'(r)| + n^3|h''(r)|\right)\chi_{[\frac{1}{2},1]}(r) \\
&+ \left(\frac{n^2}{\|x-y\|_2}|h'(r)| + n^3|h''(r)|\right)\chi_{(1,\infty)}(r) \\
=& \left(\frac{n^2}{\|x-y\|_2}|h'(r)| + n^3|h''(r)|\right)\chi_{[\frac{1}{2},1]}(r) \\
&+ \left(\frac{n^2}{\|x-y\|_2}\left|-\frac{1}{(n\|x-y\|_2)^2}\right| + n^3\left|\frac{2}{(n\|x-y\|_2)^3}\right|\right)\chi_{(1,\infty)}(r) \\
\leq& \left(\frac{n^2}{\|x-y\|_2}\xi_1 + n^3\xi_2\right)\chi_{[\frac{1}{2},1]}(r) + \left(\frac{1}{\|x-y\|_2^3} + \frac{2}{\|x-y\|_2^3}\right)\chi_{(1,\infty)}(r) \\
\overset{144}{\leq}& \frac{\xi_1+\xi_2}{\|x-y\|_2^3}\chi_{[\frac{1}{2},1]}(r) + \frac{3}{\|x-y\|_2^3}\chi_{(1,\infty)}(r) \\
\leq& \frac{\max\{\xi_1+\xi_2,3\}}{\|x-y\|_2^3}
\end{aligned}
\tag{148}
$$

Wegen $D \cap \operatorname{supp}(u) = \emptyset$ existiert

$$
\rho := \min_{(\tilde{x},\tilde{y})\in\operatorname{supp}(u)} \|\tilde{x}-\tilde{y}\|_2 \in \mathbb{R}_{>0}
$$

mithin erhält man

$$\begin{aligned}
|u(x,y)| &= |u(x,y)| \cdot \chi_{\mathrm{supp}(u)}(x,y) \\
&= \frac{|u(x,y)|}{\rho} \cdot \min_{(\tilde{x},\tilde{y})\in\mathrm{supp}(u)} \|\tilde{x}-\tilde{y}\|_2 \cdot \chi_{\mathrm{supp}(u)}(x,y) \\
&\leq \frac{|u(x,y)|}{\rho} \|x-y\|_2 \cdot \chi_{\mathrm{supp}(u)}(x,y) \\
&\leq \frac{|u(x,y)|}{\rho} \|x-y\|_2
\end{aligned} \tag{149}$$

Schließlich liefert dies fast überall die folgenden Majoranten für die im Beweis von 3.10 vorkommenden Integranden:

$$\begin{aligned}
\left|f_n(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u(x,y)v(x,y)\right| &\overset{145}{\leq} \frac{\max\{\xi_0,1\}}{\|x-y\|_2}|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u(x,y)||v(x,y)| \\
&= \max\{\xi_0,1\}|f(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}u(x,y)v(x,y)| \\
\left|f_n(x,y)u(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)\right| &\overset{145}{\leq} \frac{\max\{\xi_0,1\}}{\|x-y\|_2}|u(x,y)||\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)| \\
&= \max\{\xi_0,1\}|f(x,y)u(x,y)\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}v(x,y)| \\
\left|\partial_{1,\alpha}f_n(x,y)\partial_{2,\beta}u(x,y)v(x,y)\right| &\overset{146}{\leq} \frac{\max\{\xi_1,1\}}{\|x-y\|_2^2}|\partial_{2,\beta}u(x,y)||v(x,y)| \\
&= \max\{\xi_1,1\}|f(x,y)^2\partial_{2,\beta}u(x,y)v(x,y)| \\
\left|\partial_{2,\beta}f_n(x,y)\partial_{1,\alpha}u(x,y)v(x,y)\right| &\overset{147}{\leq} \frac{\max\{\xi_1,1\}}{\|x-y\|_2^2}|\partial_{1,\alpha}u(x,y)||v(x,y)| \\
&= \max\{\xi_1,1\}|f(x,y)^2\partial_{1,\alpha}u(x,y)v(x,y)| \\
\left|\partial_{1,\alpha}\partial_{2,\beta}f_n(x,y)u(x,y)v(x,y)\right| &\overset{148,149}{\leq} \frac{\max\{\xi_1+\xi_2,3\}}{\|x-y\|_2^3}\frac{|u(x,y)|}{\rho}\|x-y\|_2|v(x,y)| \\
&= \frac{\max\{\xi_1+\xi_2,3\}}{\rho}|f(x,y)^2u(x,y)v(x,y)|
\end{aligned}$$

Diese sind nach 3.8 integrierbar.

Bemerkung A.19 *zu 3.11*: Mit den gleichen Rechnungen wie in A.18 ergeben sich die Majoranten

$$\begin{aligned}
|f_n(x,y)\partial_{1,\alpha}u(x,y)v(x,y)| &\overset{145}{\leq} \max\{\xi_0,1\}|f(x,y)\partial_{1,\alpha}u(x,y)v(x,y)| \\
|f_n(x,y)u(x,y)\partial_{1,\alpha}v(x,y)| &\overset{145}{\leq} \max\{\xi_0,1\}|f(x,y)u(x,y)\partial_{1,\alpha}v(x,y)| \\
\left|f_n(x,y)\partial_{2,\beta}u(x,y)v(x,y)\right| &\overset{145}{\leq} \max\{\xi_0,1\}|f(x,y)\partial_{2,\beta}u(x,y)v(x,y)| \\
\left|f_n(x,y)u(x,y)\partial_{2,\beta}v(x,y)\right| &\overset{145}{\leq} \max\{\xi_0,1\}|f(x,y)u(x,y)\partial_{2,\beta}v(x,y)| \\
|\partial_{1,\alpha}f_n(x,y)u(x,y)v(x,y)| &\overset{146}{\leq} \max\{\xi_1,1\}|f(x,y)^2u(x,y)v(x,y)| \\
\left|\partial_{2,\beta}f_n(x,y)u(x,y)v(x,y)\right| &\overset{146}{\leq} \max\{\xi_1,1\}|f(x,y)^2u(x,y)v(x,y)|
\end{aligned}$$

und indem man in A.19 c für y einsetzt erhält man die Majoranten

$$\begin{aligned}
|-g_n(x)\partial_{1,\alpha}u(x)v(x)| &\leq \max\{\xi_0, 1\}|g(x)\partial_{1,\alpha}u(x)v(x)| \\
|-g_n(x)u(x)\partial_{1,\alpha}v(x)| &\leq \max\{\xi_0, 1\}|g(x)u(x)\partial_{1,\alpha}v(x)| \\
|-\partial_{1,\alpha}g_n(x)u(x)v(x)| &\leq \max\{\xi_1, 1\}|g(x)^2u(x)v(x)|
\end{aligned}$$

für die Integranden aus dem Beweis von 3.11, und diese sind nach 3.8 ebenfalls integrierbar. Also ist auch hier der Satz von der majorisierten Konvergenz anwendbar.

Bemerkung A.20 *zu 4.4*: Für alle $i, j \in I$ ist $\varphi_{i,j}$ eine lineare Abbildung mit trivialem Kern, also ein $\mathcal{C}^\infty$-Diffeomorphismus. Weiter gilt für alle $x \in \mathbb{R}^{3N}$:

$$|\det(D\varphi_{i,j}(x))| = \det\begin{pmatrix}
I_3 &&&&&&&&&& \\
& \ddots &&&&&&&&& \\
&& I_3 &&&&&&&& \\
&&& 0_3 &&&& I_3 &&& \\
&&&& I_3 &&&&&& \\
&&&&& \ddots &&&&& \\
&&&&&& I_3 &&&& \\
&&& I_3 &&&& 0_3 &&& \\
&&&&&&&& I_3 && \\
&&&&&&&&& \ddots & \\
&&&&&&&&&& I_3
\end{pmatrix} = 1$$

Bemerkung A.21 *(Radialsymmetrische Abschneidefunktionen)*: Für alle $\epsilon, r \in \mathbb{R}_{>0}$ existiert eine radialsymmetrische Abschneidefunktion $f \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ mit $\operatorname{supp}(f) = \overline{B_{r+\epsilon}(0)}$ und $f|_{\overline{B_r(0)}} = 1$ sowie $|f(x)| \leq 1$ für alle $x \in \mathbb{R}^{3N}$.
Wähle hierfür zunächst eine eindimensionale Abschneidefunktion $\tilde{f} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ derart, dass $\operatorname{supp}(\tilde{f}) = [-r-\epsilon, r+\epsilon]$, ferner $\tilde{f}|_{[-r-\epsilon,-r]}$ streng monoton fallend, $\tilde{f}|_{[-r,r]} = 1$ und $\tilde{f}|_{[r,r+\epsilon]}$ streng monoton fallend. (Ein Existenzbeweis für $\tilde{f}$ findet sich in [5].) Setze nun

$$f : \mathbb{R}^{3N} \longrightarrow \mathbb{R}, \;\; x \longmapsto \tilde{f}(\|x\|_2)$$

Dann ist f auf $\mathbb{R}^{3N} \setminus \{0\}$ als Komposition beliebig oft differenzierbarer Abbildungen beliebig oft differenzierbar. Weiter ist

$$f(B_r(0)) = \tilde{f}([0,r)) = \{1\}$$

womit $f|_{B_r(0)}$ als konstante Abbildung beliebig oft differenzierbar ist, insbesondere in 0. Folglich ist f beliebig oft differenzierbar. Ferner

$$\forall x \in \mathbb{R}^{3N} \qquad |f(x)| = |\tilde{f}(\|x\|_2)| \leq 1$$

Nach Wahl von $\tilde{f}$ gilt zudem

$$x \in \operatorname{supp}(f) \iff \|x\|_2 \in \operatorname{supp}(\tilde{f}) \iff \|x\|_2 \in [-r-\epsilon, r+\epsilon] \iff x \in \overline{B_{r+\epsilon}(0)}$$

Mithin ist $\operatorname{supp}(f) = \overline{B_{r+\epsilon}(0)}$ kompakt, also $f \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$.
Außerdem ist f symmetrisch bezüglich Koordinatenvertauschung; genauer: Sind $i, j \in I$ mit $i \neq j$, so folgt

$$\forall x \in \mathbb{R}^{3N} \quad (f \circ \varphi_{i,j})(x) = \tilde{f}(\|\varphi_{i,j}(x)\|_2) = \tilde{f}(\|x\|_2) = f(x) \tag{150}$$

Bemerkung A.22 *zu 4.7 und 4.8*: Seien $m \in \mathbb{N}$ und $\lambda_1, \ldots, \lambda_n \in \mathbb{R}_{\geq 0}$. Dann gilt

$$\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} (\lambda_i + \lambda_j)^{\frac{1}{2}} \leq \sqrt{2} m^{\frac{3}{2}} \left(\sum_{i=1}^{m} \lambda_i \right)^{\frac{1}{2}} \tag{151}$$

Denn für alle $a, b \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ gilt

$$0 \leq (\sqrt{a} - \sqrt{b})^2 = a - 2\sqrt{ab} + b \iff \sqrt{ab} \leq \frac{a+b}{2} \tag{152}$$

und es folgt somit:

$$\begin{aligned}
& \left(\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} (\lambda_i + \lambda_j)^{\frac{1}{2}} \right)^2 \\
= \; & \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \sum_{k=1}^{m} \sum_{l=1}^{m} (\lambda_i + \lambda_j)^{\frac{1}{2}} (\lambda_k + \lambda_l)^{\frac{1}{2}} \\
\overset{152}{\leq} \; & \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \sum_{k=1}^{m} \sum_{l=1}^{m} \frac{1}{2} \left((\lambda_i + \lambda_j) + (\lambda_k + \lambda_l) \right) \\
= \; & \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \sum_{k=1}^{m} \left(\sum_{l=1}^{m} \lambda_l \right) + \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \sum_{l=1}^{m} \left(\sum_{k=1}^{m} \lambda_k \right) + \sum_{i=1}^{m} \sum_{k=1}^{m} \sum_{l=1}^{m} \left(\sum_{j=1}^{m} \lambda_j \right) + \sum_{j=1}^{m} \sum_{k=1}^{m} \sum_{l=1}^{m} \left(\sum_{i=1}^{m} \lambda_i \right) \right) \\
= \; & \frac{1}{2} \left(m^3 \left(\sum_{l=1}^{m} \lambda_l \right) + m^3 \left(\sum_{k=1}^{m} \lambda_k \right) + m^3 \left(\sum_{j=1}^{m} \lambda_j \right) + m^3 \left(\sum_{i=1}^{m} \lambda_i \right) \right) \\
= \; & 2n^3 \left(\sum_{i=1}^{m} \lambda_i \right)
\end{aligned}$$

Damit folgt die Behauptung durch Anwendung der Wurzelfunktion, weil beide Seiten nichtnegativ sind.

Bemerkung A.23 *zu 4.17*: Es gelten für alle $i, j \in I$ mit $i \neq j$ und alle $u \in X$ fast überall die folgenden Identitäten:

$$\|\nabla(u \circ \varphi_{i,j})\|_2^2 = \|\nabla u \circ \varphi_{i,j}\|_2^2 \qquad \Delta(u \circ \varphi_{i,j}) = \Delta u \circ \varphi_{i,j} \tag{153}$$

$$V_{ee} \circ \varphi_{i,j} = V_{ee} \qquad V_{ne} \circ \varphi_{i,j} = V_{ne} \tag{154}$$

$$Hu \circ \varphi_{i,j} = H(u \circ \varphi_{i,j}) \tag{155}$$

Seien hierzu $k \in I$ und $\alpha \in \{1,2,3\}$. Nach der mehrdimensionalen Kettenregel gilt offenbar

$$\partial_{k,\alpha}(u \circ \varphi_{i,j}) \quad = \quad \begin{cases} \partial_{j,\alpha} u \circ \varphi_{i,j}, & k = i \\ \partial_{i,\alpha} u \circ \varphi_{i,j}, & k = j \\ \partial_{k,\alpha} u \circ \varphi_{i,j}, & i \neq k \neq j \end{cases} \tag{156}$$

woraus durch doppelte Anwendung sofort folgt:

$$\partial^2_{k,\alpha}(u \circ \varphi_{i,j}) \quad = \quad \partial^2_{k,\alpha} u \circ \varphi_{i,j}$$

Also:

$$\Delta(u \circ \varphi_{i,j}) \quad = \quad \sum_{k=1}^{N} \sum_{\alpha=1}^{3} \partial^2_{k,\alpha}(u \circ \varphi_{i,j}) \quad = \quad \sum_{k=1}^{N} \sum_{\alpha=1}^{3} \partial^2_{k,\alpha} u \circ \varphi_{i,j} \quad = \quad \Delta u \circ \varphi_{i,j}$$

Ferner gilt für alle $x \in \mathbb{R}^{3N}$:

$$\begin{aligned} \|\nabla(u \circ \varphi_{i,j})(x)\|_2^2 &= \sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{k=1}^{N} \partial_{k,\alpha}(u \circ \varphi_{i,j})(x)^2 \\ &= \sum_{\alpha=1}^{3} \partial_{i,\alpha}(u \circ \varphi_{i,j})(x)^2 + \partial_{j,\alpha}(u \circ \varphi_{i,j})(x)^2 + \sum_{k \in \{1,\dots,N\} \setminus \{i,j\}} \partial_{k,\alpha}(u \circ \varphi_{i,j})(x)^2 \\ &\overset{156}{=} \sum_{\alpha=1}^{3} (\partial_{j,\alpha} u \circ \varphi_{i,j})(x)^2 + (\partial_{i,\alpha} u \circ \varphi_{i,j})(x)^2 + \sum_{k \in \{1,\dots,N\} \setminus \{i,j\}} (\partial_{k,\alpha} u \circ \varphi_{i,j})(x)^2 \\ &= \sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{k=1}^{N} (\partial_{k,\alpha} u \circ \varphi_{i,j})(x)^2 \\ &= \|(\nabla u \circ \varphi_{i,j})(x)\|_2^2 \end{aligned}$$

und für alle $x \in Z$ unter Verwendung der gleichen Notation wie in Abschnitt 4.2

$$\begin{aligned} (V_{ne} \circ \varphi_{i,j})(x) &= -\sum_{k=1}^{K} Z_k \sum_{l=1}^{N} g_{c_k,l}(\varphi(x)) \\ &= -\sum_{k=1}^{K} Z_k \left(g_{c_k,i}(\varphi(x)) + g_{c_k,j}(\varphi(x)) + \sum_{l \in \{1,\dots,N\}\{i,j\}} g_{c_k,l}(\varphi(x)) \right) \\ &= -\sum_{k=1}^{K} Z_k \left(g_{c_k,j}(x) + g_{c_k,i}(x) + \sum_{l \in \{1,\dots,N\}\{i,j\}} g_{c_k,l}(x) \right) \\ &= -\sum_{k=1}^{K} Z_k \sum_{l=1}^{N} g_{c_k,l}(x) \\ &= V_{ne}(x) \end{aligned}$$

sowie

$$(V_{ee} \circ \varphi_{i,j})(x) \quad = \quad \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N} \sum_{l \in \{1,\dots,N\} \setminus \{k\}} f_{k,l}(\varphi(x))$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2}\Bigg(f_{i,j}(\varphi(x)) + f_{j,i}(\varphi(x)) + \sum_{k\in\{1,\ldots,N\}\setminus\{i,j\}} \sum_{l\in\{1,\ldots,N\}\setminus\{i,j,k\}} f_{k,l}(\varphi(x)) \\
&\qquad + \sum_{k\in\{1,\ldots,N\}\setminus\{i,j\}} \left(f_{i,k}(\varphi(x)) + f_{k,j}(\varphi(x)) + f_{j,k}(\varphi(x)) + f_{k,i}(\varphi(x))\right)\Bigg) \\
&= \frac{1}{2}\Bigg(f_{j,i}(x) + f_{i,j}(x) + \sum_{k\in\{1,\ldots,N\}\setminus\{i,j\}} \sum_{l\in\{1,\ldots,N\}\setminus\{i,j,k\}} f_{k,l}(x) \\
&\qquad + \sum_{k\in\{1,\ldots,N\}\setminus\{i,j\}} \left(f_{j,k}(x) + f_{k,i}(x) + f_{i,k}(x) + f_{k,j}(x)\right)\Bigg) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N} \sum_{l\in\{1,\ldots,N\}\setminus\{k\}} f_{k,l}(x) \\
&= V_{ee}(x)
\end{aligned}
$$

Insgesamt erhält man somit für alle $x \in Z$:

$$
\begin{aligned}
(Hu \circ \varphi_{i,j})(x) &= ((V_{ee} \circ \varphi_{i,j})(x) + (V_{ne} \circ \varphi_{i,j})(x)) \cdot (u \circ \varphi_{i,j})(x) - \frac{1}{2}(\Delta u \circ \varphi_{i,j})(x) \\
&\overset{154,153}{=} (V_{ee}(x) + V_{ne}(x)) \cdot (u \circ \varphi_{i,j})(x) - \frac{1}{2}\Delta(u \circ \varphi_{i,j})(x) \\
&= H(u \circ \varphi_{i,j})(x)
\end{aligned}
$$

Bemerkung A.24 *zu 5.7*: (i) Für jede Schwartz-Funktion $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$ und jedes Polynom $p \in \mathbb{R}[X_1, \ldots, X_{3N}]$, das die Bedingung

$$\exists \epsilon \in \mathbb{R}_{>0} \qquad \forall x \in \mathbb{R}^{3N} \qquad |p(x)| \;\geq\; \epsilon \tag{157}$$

erfüllt, ist auch $\tilde{u} := \frac{u}{p} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$.

Zeige dafür zunächst per Induktion über $|\alpha| = \sum\limits_{k=1}^{N}\sum\limits_{\gamma=1}^{3} \alpha_{k,\gamma}$, dass für jeden Multiindex $\alpha \in \mathbb{N}_0^{3N}$ ein Polynom $q \in \mathbb{R}[X_1, \ldots, X_{3N}]$ und eine Schwartz-Funktion $v \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$ existieren, sodass q die Bedingung 157 erfüllt und

$$\partial_\alpha \tilde{u} = \frac{v}{q} \tag{158}$$

Der Induktionsanfang $|\alpha| = 0$ gilt nach Voraussetzung. Sei nun $\alpha \in \mathbb{N}_0^{3N}$ und es gelte die Behauptung für dieses α. Nach der Quotientenregel folgt für alle $k \in \{1, \ldots, N\}$ und alle $\gamma \in \{1, 2, 3\}$:

$$\partial_{k,\gamma}\partial_\alpha \tilde{u} \overset{\text{I.V.}}{=} \partial_{k,\gamma}\frac{v}{q} \;=\; \frac{\partial_{k,\gamma}v \cdot q - v \cdot \partial_{k,\gamma}q}{q^2}$$

Da mit $v \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$ auch $\partial_{k,\gamma}v \cdot q - v \cdot \partial_{k,\gamma}q \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$ gilt und mit q offenbar auch q^2 die Bedingung 157 erfüllt, ist der Induktionsschritt abgeschlossen.
Seien nun $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^{3N}$ und v, q gemäß 157 und 158 gewählt. Wegen $v \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$ existiert eine

Konstante $C \in \mathbb{R}_{>0}$, sodass für alle $x \in \mathbb{R}^{3N}$ gilt $|x^\beta v(x)| < C$. Damit folgt für alle $x \in \mathbb{R}^{3N}$:

$$|x^\beta \partial_\alpha \tilde{u}(x)| \overset{158}{=} \left| x^\beta \frac{v(x)}{q(x)} \right| < \frac{C}{|q(x)|} \overset{157}{\leq} \frac{C}{\epsilon} \in \mathbb{R}_{>0}$$

Also ist $\tilde{u} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$.
(ii) Seien $j, k \in I$ mit $j \neq k$ und $u \in \mathcal{S}_I(\mathbb{R}^{3N})$. Dann gilt

$$u \circ \varphi_{j,k} = -u \iff \mathcal{F}(u) \circ \varphi_{j,k} = -\mathcal{F}(u) \tag{159}$$

Bemerke zunächst, dass $\varphi_{j,k}$ orthogonal bzgl. des euklidischen Skalarprodukts ist. Ist nämlich $\tau \in \mathrm{Sym}_N$ die Transposition mit $\tau(j) = k$, so gilt für alle $x, y \in \mathbb{R}^{3N}$:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{j,k}(x), \varphi_{j,k}(y) \rangle_2 &= \sum_{l=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} \varphi_{j,k}(x)_{l,\gamma} \varphi_{j,k}(y)_{l,\gamma} \\ &= \sum_{l=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} x_{\tau(l),\gamma} y_{\tau(l),\gamma} \\ &= \sum_{l=1}^{N} \sum_{\gamma=1}^{3} x_{l,\gamma} y_{l,\gamma} \\ &= \langle x, y \rangle_2 \end{aligned} \tag{160}$$

Es gelte nun $u \circ \varphi_{j,k} = -u$. Dann folgt für alle $\xi \in \mathbb{R}^{3N}$ mit dem Transformationssatz unter Verwendung von A.20:

$$\begin{aligned} (\mathcal{F}(u) \circ \varphi_{j,k})(\xi) &= (2\pi)^{-\frac{m}{2}} \int_{\mathbb{R}^{3N}} u(x) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\langle x, \varphi_{j,k}(\xi) \rangle_2} \, dx \\ &\overset{117}{=} (2\pi)^{-\frac{m}{2}} \int_{\mathbb{R}^{3N}} u(\varphi_{j,k}(x)) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\langle \varphi_{j,k}(x), \varphi_{j,k}(\xi) \rangle_2} \, dx \\ &\overset{160}{=} (2\pi)^{-\frac{m}{2}} \int_{\mathbb{R}^{3N}} (u \circ \varphi_{j,k})(x) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\langle x, \xi \rangle_2} \, dx \\ &= (2\pi)^{-\frac{m}{2}} \int_{\mathbb{R}^{3N}} -u(x) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\langle x, \xi \rangle_2} \, dx \\ &= -\mathcal{F}(u)(\xi) \end{aligned}$$

Gilt umgekehrt $\mathcal{F}(u) \circ \varphi_{j,k} = -\mathcal{F}(u)$, so folgt entsprechend für alle $x \in \mathbb{R}^{3N}$:

$$\begin{aligned} (u \circ \varphi_{j,k})(x) &= (\mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(u)) \circ \varphi_{j,k})(x) \\ &\overset{6}{=} (2\pi)^{-\frac{m}{2}} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \mathcal{F}(u)(\xi) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\langle \varphi_{j,k}(x), \xi \rangle_2} \, d\xi \\ &\overset{117}{=} (2\pi)^{-\frac{m}{2}} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \mathcal{F}(u)(\varphi_{j,k}(\xi)) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\langle \varphi_{j,k}(x), \varphi_{j,k}(\xi) \rangle_2} \, d\xi \\ &\overset{160}{=} (2\pi)^{-\frac{m}{2}} \int_{\mathbb{R}^{3N}} (\mathcal{F}(u) \circ \varphi_{j,k})(\xi) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\langle x, \xi \rangle_2} \, d\xi \\ &= (2\pi)^{-\frac{m}{2}} \int_{\mathbb{R}^{3N}} -\mathcal{F}(u)(\xi) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\langle x, \xi \rangle_2} \, d\xi \\ &= -\mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(u))(x) \\ &= -u(x) \end{aligned}$$

Literatur

[1] ADAMS, Robert A. ; FOURNIER, John J. F.: *Pure and applied Mathematics*. Bd. 140: *Sobolev spaces*. 2. Oxford : Academic Press, 2003

[2] ELSTRODT, Jürgen: *Maß- und Integrationstheorie*. 7. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2011 (Grundwissen Mathematik)

[3] FORSTER, Otto: *Analysis 3 - Maß- und Integrationstheorie, Integralsätze im $\mathbb{R}^n$ und Anwendungen*. 8. Wiesbaden : Springer Spektrum, 2017 (Aufbaukurs Mathematik)

[4] GUSTAFSON, Stephen J. ; SIGAL, Israel M.: *Mathematical concepts of quantum mechanics*. 2. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2011

[5] HAASE, Markus: *Graduate studies in mathematics*. Bd. 156: *Functional analysis - An elementary introduction*. 1. The American Mathematical Society, 2014

[6] HARDY, G. H. ; LITTLEWOOD, J. E. ; PÓLYA, G.: *Inequalities*. 2. London : Cambridge University Press, 1952

[7] KATO, Tosio: Fundamental properties of Hamiltonian operators of Schrödinger type. In: *Trans. Am. Math. Soc.* 70 (1951), Nr. 2, S. 195–211

[8] MAZ'YA, Vladimir: *Grundlehren der mathematischen Wissenschaft*. Bd. 342: *Sobolev spaces*. 2. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2011

[9] NEUMANN, Johann von: *Grundlehren der mathematischen Wissenschaften*. Bd. 38: *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. 2. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 1996

[10] SALSA, Sandro: *UNITEXT - La Matematica per il 3+2*. Bd. 86: *Partial differential equations in action - From modelling to theory*. 2. Springer International Publishing, 2015

[11] SCHILLING, René L.: *Maß und Integral - Eine Einführung für Bachelor-Studenten*. 1. Berlin, Boston : Walter de Gruyter GmbH, 2015

[12] SCHMIDTKE, Hans-Herbert: *Quantenchemie*. 2. Weinheim : VCH Verlagsgesellschaft mbH, 1994

[13] TESCHL, Gerald: *Graduate studies in mathematics*. Bd. 99: *Mathematical methods in in quantum mechanics - With applications to Schrödinger operators*. 1. Providence, Rhode Island : American Mathematical Society, 2009

[14] WERNER, Dirk: *Funktionalanalysis*. 7. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2011

[15] YSERENTANT, Harry: On the regularity of the electronic Schrödinger equation in Hilbert spaces of mixed derivatives. In: *Numerische Mathematik* 98 (2004), Oktober, Nr. 04, S. 731–759

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig und ohne fremde Hilfe angefertigt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Weiterhin versichere ich, dass diese Arbeit noch nicht als Abschlussarbeit an anderer Stelle vorgelegen hat.