MP III – Quantenmechanik

Literatur | VL 1, 19.10.2010

- L.D. Faddeev, O.A. Yakubovski. Lectures on quantum mechanics for mathematics students. AMS 2009 (translation of Russian original from 1980)
- L.A. Takhtajan. Quantum mechanics for mathematicians AMS 2008.

sowie

- J. von Neumann. Mathematical foundations of quantum mechanics (Princeton 1956)
- G. Mackey. Mathematical foundations of quantum mechanics (Dover 2004), original 1963)

Gesetze der Quantenmechanik, die in der Mikrowelt herrschen, sind zwar drastisch anders, als die der klassischen Mechanik, man kann sie aber als „Deformation" der klassischen Mechanik begreifen und darstellen. Dies ist auch der Weg, den wir (nach den o.g. Quellen) gehen.

(1) Klassische Mechanik.

Zur Erinnerung.

Lagrangesche Mechanik $\rightsquigarrow$ Hamiltonsche Mechanik

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x},$$

$x = (x_1, \ldots, x_n)$, $p = (p_1, \ldots, p_n)$, $\mathbb{R}^{2n}(x, p)$ – Phasenraum ($=\mathcal{M}$)

$H: \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{R}$ – Hamiltonfunktion. Beispiel:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_{i<j} V_{ij}(x_i - x_j) + \sum_{i=1}^{N} V_i(x_i)$$

($n = 3N$).

<u>Observablen</u> – Funktionen (unendlich oft diff-bar) auf dem Phasenraum. Reeller Vektorraum mit zusätzlicher Multiplikation, also eine Algebra ($\mathcal{A}$)

Mit der Evolution des mechanischen Systems ist eine weitere Operation auf $\mathcal{A}$ verbunden. Es sei

$$(x(t,x_0,p_0),\ p(t,x_0,p_0)) = y(t,y_0) = \varphi^t(y_0)$$

der Fluß des Vektorfeldes (des Systems von DiffGl)

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}.$$

Es ist also $(\varphi^t)_{t\in\mathbb{R}}$, $\varphi^t : M \to M$ eine 1-parametrige Gruppe der Diffeomorphismen von M:

$$\varphi^{t+s} = \varphi^t\varphi^s = \varphi^s\varphi^t, \quad (\varphi^t)^{-1} = \varphi^{-t}, \quad \varphi^0 = id.$$

Die erzeugen eine Familie von Operatoren

$$U_t : \mathcal{A} \to \mathcal{A},$$

$$(U_t f)(y) = f_t(y) = f(\varphi^t y)$$

$$f_t(x_0,p_0) = f(x(t,x_0,p_0),\ p(t,x_0,p_0))$$

Die Funktionen f_t genügen einer DiffGl:

$$f_{t+s}(y) = f_t(\varphi^s(y)) \quad \Big| \frac{\partial}{\partial s}\Big|_{s=0}$$

$$\frac{\partial f_t(y)}{\partial t} = df_t \cdot \left(\frac{\partial H}{\partial p}, -\frac{\partial H}{\partial x}\right)^T =$$

$$= \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial f_t}{\partial x_i} - \frac{\partial H}{\partial x_i}\frac{\partial f_t}{\partial p_i}\right) = \{H, f_t\}(y)$$

Eigenschaften der Poissonklammer

$$\{f,g\} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial x_i} - \frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\partial g}{\partial p_i}\right).$$

1) $\{f, \alpha g + \beta h\} = \alpha\{f,g\} + \beta\{f,h\}$ Linearität
2) $\{f,g\} = -\{g,f\}$ Schiefsymmetrie
3) $\{f,\{g,h\}\} + \{g,\{h,f\}\} + \{h,\{f,g\}\} = 0$ Jacobi Identität
4) $\{f, gh\} = g\{f,h\} + h\{f,g\}$ – Leibniz
(also Poissonklammer ist eine Derivation)

Also $\mathcal{A}$ ist
1) reeller Vektorraum
2) kommutative Algebra bez. fg
3) Liealgebra bez. $\{f,g\}$

mit einem ausgezeichneten Element H, das für die Zeitevolution verantwortlich ist.
$U_t : \mathcal{A} \to \mathcal{A}$ ist ein Automorphismus von all diesen Strukturen.

$$h = f+g \Rightarrow h_t = f_t + g_t$$
$$h = fg \Rightarrow h_t = f_t g_t$$
$$h = \{f,g\} \Rightarrow h_t = \{f_t, g_t\}.$$

z.B. die letzte:

$$\frac{\partial h_t}{\partial t} = \left\{\frac{\partial f_t}{\partial t}, g_t\right\} + \left\{f_t, \frac{\partial g_t}{\partial t}\right\} =$$
$$= \{\{H,f_t\}, g_t\} + \{f_t, \{H,g_t\}\} = \{H, \{f_t, g_t\}\} =$$
$$= \{H, h_t\}$$

also genügt h_t der Diff. Gl. und hat den richtigen Anfangswert. Die Lösung ist aber eindeutig.

<u>Zustand des Systems</u>: um den zu bestimmen, stellt man einen physikalischen Experiment (Messung). Man wiederholt möglichst genau die Umstände (Bedingungen) und, je nach dem, inwiefern sie den Zustand des Systems bestimmen, erwartet entweder immer dieselben Ergebnisse, oder wenigstens Ergebnisse die mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung zu beschreiben sind. Also ist der Zustand ω auf $\mathcal{A}$ die Zuordnung einer Wahrscheinlichkeitsverteilung (eines W-maßes) zu jeder Observablen $f \in \mathcal{A}$.

$$\left.\begin{array}{l} f \in \mathcal{A} \text{ Observable} \\ E \subset \mathbb{R} \text{ - eine Borelmenge} \end{array}\right\} \overset{\omega}{\rightsquigarrow} \omega_f(E) \quad \text{mit}$$

$0 \le \omega_f(E) \le 1$, $\omega_f(\emptyset) = 0$, $\omega_f(\mathbb{R}) = 1$, $\omega_f(E_1 \sqcup E_2) = \omega_f(E_1) + \omega_f$

$$\omega_{\varphi(f)}(E) = \omega_f(\varphi^{-1}(E)) \quad (*)$$

Zustände bilden eine konvexe Menge, da mit zwei W-maßen ω_1, ω_2 ist auch

$$\omega = \alpha\omega_1 + (1-\alpha)\omega_2 \quad (+)$$

ein W-maß. Wenn aus (+) folgt $\omega_1 = \omega_2 = \omega$, nennt man ω einen reiner Zustand, sonst einen gemischten. Verteilungsfunktion eines Zustandes bekommt man bei $E = (-\infty, \lambda]$:

$$\omega_f(\lambda) = \omega_f((-\infty, \lambda]),$$

$$\omega_f \nearrow, \quad \omega_f(-\infty) = 0, \quad \omega_f(+\infty) = 1.$$

Erwartung:

$$\mathbb{E}_\omega(f) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, d\omega_f(\lambda)$$

Eigenschaften:

1) $|\mathbb{E}_\omega(f)| < \infty$ für $f \in \mathcal{A}_0$ - der Unteralgebra der beschränkten Observablen

2) $\mathbb{E}_\omega(1) = 1 \quad (1 \in \mathcal{A})$

3) $\mathbb{E}_\omega(\alpha f + \beta g) = \alpha\mathbb{E}_\omega(f) + \beta\mathbb{E}_\omega(g)$ für $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$, $f, g \in \mathcal{A}$, wenn beide $\mathbb{E}_\omega(f), \mathbb{E}_\omega(g)$ existieren.

4) $\mathbb{E}_\omega(\varphi(f)) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\lambda) \, d\omega_f(\lambda)$ (folgt aus (*)) $\Big\}$ (**)
insbesondere

$$\mathbb{E}_\omega(f^2) \geq 0 \quad \forall f \in \mathcal{A}$$

Zustände definieren normierte positive lineare Funktionale auf $\mathcal{A}_0$, $f \in \mathcal{A}_0 \longrightarrow \mathbb{E}_\omega(f)$.

Angenommen, kann man $\mathbb{E}_\omega$ auf den Raum von beschränkten stückweise stetigen f fortsetzen, kann man die Verteilungen aus Erwartungswerten gewinnen:

$$\omega_f(\lambda) = \mathbb{E}_\omega\left(\Theta(\lambda - f)\right),$$

wobei $\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$ die Heavysidesche Treppenfkt ist.

In der Tat, ist $\chi_{(-\infty,\lambda]}$ die charakt. Fkt. des Intervalls

$$\mathbb{E}\omega(\Theta(\lambda - f)) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{(-\infty,\lambda]}(s)\, d\omega_f(s) = \omega_f((-\infty,\lambda]) = \omega_f(\lambda).$$

Jedes W-maß $d\mu$ auf M definiert einen Zustand auf $\mathcal{A}$ durch

$$\omega_f = f_*(\mu) \quad \text{, d.h.}$$

$$\omega_f(\lambda) = \mu\left(f^{-1}(-\infty,\lambda]\right) = \int_{M_\lambda(f)} d\mu,$$

$$M_\lambda(f) := \{x \in M;\ f(x) < \lambda\}$$

Aus Fubinis Satz folgt:

$$\mathbb{E}_\omega(f) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda\, d\omega_f(\lambda) = \int_M f\, d\mu.$$

Eigentlich sind das alle Zustände: nach dem Satz von Riesz, für jedes positive lineare Funktional l auf den Raum $C_c(M)$ von stetigen Funktionen auf M mit kompakten Träger, gibt es ein eindeutiges Borelmaß $d\mu$ auf M mit

$$l(f) = \int_M f\, d\mu \quad \forall f \in C_c(M).$$

Also:

<u>Definition</u>. Die Zustandsmenge S eines Hamiltonschen Systems mit Phasenraum M ist die konvexe Menge $\mathcal{P}(M)$ aller W-maße auf M. Zustände, die den Diracmaßen $d\mu_q$, $q \in M$, entsprechen, heißen reine Zustände, alle anderen – gemischten. Messung ist

$$\mathcal{A} \times S \ni (f, \mu) \mapsto \omega_f = f_*(\mu) \in \mathcal{P}(\mathbb{R}),$$

die Zuordnung eines W-Maßes ω_f jeder Observablen f und jeden Zustand $\mu \in S$. Für jede Borelmenge $0 \le \omega_f(E) \le 1$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass die Messung von f ein Ergebnis in E liefert. Die Erwartung von f im Zustand μ ist gegeben durch

$$\mathbb{E}_\omega(f) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, d\omega_f(\lambda) = \int_\mu f \, d\mu.$$

Varianz:

$$\sigma_\omega^2(f) = \mathbb{E}_\omega\left(\left(f - \mathbb{E}_\omega(f)\right)^2\right) = \mathbb{E}_\omega(f^2) - \left(\mathbb{E}_\omega(f)\right)^2 \ge 0.$$

Vermischung der Zustände führt zur wachsenden Varianz:

$$\omega = \alpha\omega_1 + (1-\alpha)\omega_2 \Longrightarrow$$

$$\Rightarrow \sigma_\omega^2(f) \ge \alpha\, \sigma_{\omega_1}^2(f) + (1-\alpha)\, \sigma_{\omega_2}^2(f)$$

$$\ge \min\left(\sigma_{\omega_1}^2(f), \sigma_{\omega_2}^2(f)\right)$$

Beweis.

$$\sigma_\omega^2(f) = \mathbb{E}_{\alpha\omega_1+(1-\alpha)\omega_2}(f^2) - \left(\mathbb{E}_{\alpha\omega_1+(1-\alpha)\omega_2}(f)\right)^2$$

$$= \alpha\, \mathbb{E}_{\omega_1}(f^2) + (1-\alpha)\, \mathbb{E}_{\omega_2}(f^2) - \left(\alpha\, \mathbb{E}_{\omega_1}(f) + (1-\alpha)\mathbb{E}_{\omega_2}(f)\right)^2$$

$$\ge \alpha\, \mathbb{E}_{\omega_1}(f^2) - \alpha\left(\mathbb{E}_{\omega_1}(f)\right)^2 + (1-\alpha)\,\mathbb{E}_{\omega_2}(f^2) - (1-\alpha)\left(\mathbb{E}_{\omega_2}(f)\right)^2,$$

weil es aus

$$\alpha\xi^2 + (1-\alpha)\eta^2 - (\alpha\xi + (1-\alpha)\eta)^2 \ge 0 \Longleftrightarrow$$

$$\Longleftrightarrow \alpha + (1-\alpha)\eta^2 - (\alpha + (1-\alpha)\eta)^2 \ge 0 \qquad \forall \eta \in \mathbb{R} \quad \text{folgt.}$$

$\varphi(\eta) :=$

$$\varphi(1) = 0, \quad \varphi'(\eta) = 2(1-\alpha)\eta - 2(1-\alpha)(\alpha + (1-\alpha)\eta)$$

$$= 2(1-\alpha)(\eta - \alpha - \eta + \alpha\eta) = 2\alpha(1-\alpha)(\eta-1) \quad \begin{matrix} \ge 0, \eta \ge 1 \\ \le 0, \eta < 1 \end{matrix}$$

$$\Rightarrow \varphi(\eta) > 0 \text{ für } \eta \ne 1.$$

Für reine Zustände $d\mu_y$ gilt $\mathbb{E}_\omega(f) = \int_M f d\mu_y = f(y)$

$$\sigma_\omega^2(f) = \mathbb{E}_\omega(f^2) - (\mathbb{E}_\omega(f))^2 = f^2(y) - f^2(y) = 0,$$

für alle anderen Zustände gilt.

$$\sigma_\omega^2(f) > 0$$

Insbesondere, für

$$d\mu = \alpha d\mu_y + (1-\alpha) d\mu_z \quad \text{gilt:}$$

$$\sigma_\omega^2(f) = \alpha\, \mathbb{E}_{\omega_1}(f^2) + (1-\alpha)\, \mathbb{E}_{\omega_2}(f^2) - (\alpha \mathbb{E}_{\omega_1}(f) + (1-\alpha)\mathbb{E}_{\omega_2}(f))^2$$

$$= \alpha f^2(y) + (1-\alpha) f^2(z) - (\alpha f(y) + (1-\alpha) f(z))^2$$

$$= \alpha(1-\alpha) f^2(y) + \alpha(1-\alpha) f^2(z) - 2\alpha(1-\alpha) f(y) f(z) =$$

$$= \alpha(1-\alpha)(f(y) - f(z))^2 > 0 \quad \text{wenn } f(y) \neq f(z)$$

$\boxed{\text{VL 2, 21.10.2010}}$

Wiederholung: Messung:

$$\underset{C^\infty(M)}{\mathcal{A}} \times \underset{\mathcal{P}(M)}{S} \ni (f, \omega) \longmapsto \omega_f = f_*(\omega) \in \mathcal{P}(\mathbb{R}), \quad \omega_f(\lambda) = \omega(f^{-1}(-\infty, \lambda]) = \int_{\{x \in M:\, f(x) \le \lambda\}} d\omega$$

oder

$$\mathbb{E}_\omega(f) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda\, d\omega_f(\lambda) = \int_M f d\omega$$

Zwei Möglichkeiten, die Dynamik einzuschalten:

<u>Hamiltonsche Beschreibung</u>

Zustände sind zeitunabhängig, während die Evolution von Observablen ist durch Hamiltonsche Bewegungsgleichungen gegeben.

$$\frac{d\omega}{dt} = 0, \quad \omega \in S = \mathcal{P}(M); \quad \frac{df}{dt} = \{H, f\}, \quad f \in \mathcal{A} = C^\infty(M)$$

$$\mathbb{E}_\omega(f_t) = \int_M f_t \, d\omega = \int_M (f\circ\varphi^t)\, d\omega = \int_M f(\varphi^t(y))\,\rho(y)\,dy,$$

wobei $\rho(y) = \frac{d\omega}{dy}$ die Dichte der Maßverteilung ω (die Radon-Nikodymsche Ableitung) ist. Z.B. für den reinen Zustand $d\mu_{y_0} = \delta(y-y_0)\,dy$ hat man

$$\mathbb{E}_\omega(f_t) = f_t(y_0) = f(\varphi^t(y_0))$$

(Observable im reinen Zustand, in der klassischen Mechanik werden für gewöhnlich nur reine Zustände betrachtet) Man kann die Formel

$$\mathbb{E}_\omega(f_t) = \int_M f(\varphi^t(y))\,\rho(y)\,dy$$

interpretieren, indem man sagt, daß der Zustand die Wahrscheinlichkeitsverteilung von Anfangswerten $y=(x,p)$ beschreibt.

<u>Liouvillesche Beschreibung</u>. Variablentransformation:

$$\varphi^t(y) \longrightarrow y\,.$$

$$\int_M f(\varphi^t(y))\,\rho(y)\,dy = \int_M f(y)\,\rho(\varphi^{-t}(y))\,\det\frac{\partial\varphi^{-t}(y)}{\partial y}\,dy$$

Nach dem Satz von Liouville gilt $\det = 1$, also

$$= \int_M f(y)\,\rho(\varphi^{-t}(y))\,dy$$

Interpretation:

$\frac{df}{dt} = 0$, $f\in \mathcal{A} = C^\infty(M)$ – Observablen unterliegen keiner Evolution,

dafür ändert sich der Zustand ω_t mit der Dichte $\rho_t = \rho(\varphi^{-t}(y))$. Es gilt:

$$\frac{d\rho_t}{dt} = -\{H,\rho_t\}$$

Diese Beschreibung wird oft in der statistischen Mechanik benutzt.

$$\mathbb{E}_\omega(f_t) = \mathbb{E}_{\omega_t}(f)$$