VL 7, 09.11.2010

(4) Mathematische Formulierung der Quantenmechanik

A1 Zu jedem quantenmechanischen System gehört ein separabler komplexer Hilbertraum $\mathcal{H}$, genannt der Zustandraum.

A2 $\mathcal{A}$ = Observablen = { selbstadjungierte Operatoren auf $\mathcal{H}$ }
$\mathcal{A}_0 = \mathcal{A} \cap \mathcal{L}(\mathcal{H})$ = beschränkte Observablen

A3 $\mathcal{S}$ = Zustände = { positive Spurklasseoperatoren ($\Rightarrow$ selbstadjungiert) M mit $\operatorname{tr} M = 1$ }.
Reine Zustände = { Projektoren auf 1-dimensionale Unterräume von $\mathcal{H}$ }
Gemischte Zustände – alle anderen.

A4 Messung:

$$\mathcal{A} \times \mathcal{S} \ni (A, M) \longmapsto \mu_A \in \mathcal{P}(\mathbb{R})$$

Zuordnung zu $A \in \mathcal{A}$ und $M \in \mathcal{S}$ eines Wahrscheinlichkeitsmaßes auf $\mathbb{R}$. Interpretation: für jede Borelmenge $E \subset \mathbb{R}$, $\mu_A(E) \in [0,1]$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass fürs System im Zustand M das Messergebnis der Observablen A in E liegt. Erwartung:

$$\langle A | M \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, d\mu_A(\lambda), \quad \mu_A(\lambda) = \mu_A((-\infty, \lambda])$$

Die hier postulierte Zuordnung kann konstruiert werden, mit Hilfe des Spektralsatzes von von Neumann. In diesem Satz wird die Existenz von projektorwertigen Verteilung für jeden selbstadjungierten Operator behauptet. Zunächst die Definition.

Def. $P : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \to \mathcal{L}(\mathcal{H})$ heißt ein projektorwertiges Maß, falls

PM1 für jede Borelmenge $E \subseteq \mathbb{R}$ $\mathbb{P}(E)$ ist ein Projektor, $\mathbb{P}(E) = \mathbb{P}(E)^*$ und $\mathbb{P}(E) = \mathbb{P}(E)^2$

PM2. $\mathbb{P}(\emptyset) = 0$, $\mathbb{P}(\mathbb{R}) = Id_{\mathcal{H}}$.

PM3. Für jede disjunkte Vereinigung von Borelmengen $E = \bigsqcup_{n=1}^{\infty} E_n$ gilt $\mathbb{P}(E) = \lim_{n\to\infty} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{P}(E_i)$ (in der starken Topologie auf $\mathcal{L}(\mathcal{H})$).

Aus PM1 – PM3 folgt (Hausaufgabe!)

$$\mathbb{P}(E_1)\mathbb{P}(E_2) = \mathbb{P}(E_1 \cap E_2) \quad \forall E_1, E_2 \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$$

Aus einem projektorwertigen Maß macht man eine projektorwertige Verteilung

$$\mathbb{P}(\lambda) = \mathbb{P}((-\infty, \lambda]),$$

mit den folgenden charakteristischen Eigenschaften:

PV1. $\mathbb{P}(\lambda)\mathbb{P}(\mu) = \mathbb{P}(\min(\lambda,\mu))$

PV2. $\lim_{\lambda\to-\infty} \mathbb{P}(\lambda) = 0$, $\lim_{\lambda\to+\infty} \mathbb{P}(\lambda) = I_{\mathcal{H}}$

PV3. $\lim_{\mu \nearrow \lambda} \mathbb{P}(\mu) = \mathbb{P}(\lambda)$.

$\forall \varphi \in \mathcal{H}$ mit $\|\varphi\| = 1$ ist dann $(\mathbb{P}(\lambda)\varphi, \varphi)$ die Verteilungsfkt. ~~eines~~ W-Maßes auf $\mathbb{R}$ (eines beschränkten Maßes, wenn $\|\varphi\| \neq 1$)

Satz (Spektralsatz von von Neumann). $\forall A \in \mathcal{A}$ gibt es die eindeutig definierte projektorwertige Verteilung $\mathbb{P}_A(\lambda)$ mit den folgenden Eigenschaften.

1) $D(A) = \{\varphi \in \mathcal{H} : \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d(\mathbb{P}_A(\lambda)\varphi, \varphi) < \infty\}$,

und $\forall \varphi \in D(A)$ gilt:

$$A\varphi = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, dP_A(\lambda)\varphi$$

(als Grenzwert der Riemann-Stieltjes Integralsummen bez. der starken Topologie auf $\mathcal{H}$ definiert).

$\sigma(A)$ = Träger des entsprechenden projektorwertigen Maßes.

$\lambda \in \sigma(A) \Leftrightarrow P_A((\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)) \neq 0 \quad \forall \varepsilon > 0$

2) Für jede <u>stetige</u> Fkt f auf $\mathbb{R}$ ist $f(A)$ ein Operator mit dem in $\mathcal{H}$ dichten Definitionsbereich

$$D(f(A)) = \{\varphi \in \mathcal{H} : \int_{-\infty} |f(\lambda)|^2 \, d(P_A(\lambda)\varphi, \varphi) < \infty\},$$

und

$$f(A)\varphi = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) \, dP_A(\lambda)\varphi$$

Es gilt

$$f(A)^* = \bar{f}(A) \qquad (\bar{f} \text{ - komplex-konjugiert}),$$

und $f(A) \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \Leftrightarrow f$ beschränkt auf $\sigma(A)$.

Sind f, g stetig und beschränkt auf $\sigma(A)$, so

$$f(A)g(A)\varphi = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda)g(\lambda) \, dP_A(\lambda)\varphi, \quad \varphi \in \mathcal{H}.$$

3) Für jede messbare Fkt f auf $\mathbb{R}$, die f.ü. bez. P_A endlich ist (d.h. bez. $(P\psi, \psi)$ $\forall \psi \in \mathcal{H}$; man kann die Existenz <u>eines</u> $\varphi \in \mathcal{H}$ zeigen, für den dies gelten muß, um es für <u>alle</u> $\varphi \in \mathcal{H}$ zu garantieren): $f(A)\varphi$ ist durch die selbe Formel wie in 2) gegeben, bloss im schwachen Sinne verstanden, d.h. $\forall \varphi \in D(f(A))$ $\forall \psi \in \mathcal{H}$

$$(f(A)\varphi, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) \, d(P_A(\lambda)\varphi, \psi)$$

4) Ein beschränkter $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ ist mit A vertauschbar ($B(D(A)) \subset D(A)$ und $BA = AB$ auf $D(A)$) genau dann, wenn er mit allen $P_A(\lambda)$ vertauschbar ist, und daher mit allen $f(A)$.

5) Für jede projektorwertige Verteilung $P(\lambda)$ ist der (3.)

wie in 1) definierter Operator A selbstadjungiert.

Jetzt:

<u>A5</u> Born-von Neumannsche Formel: die Zuordnung $(A, M) \mapsto \mu_A$ ist durch

$$\mu_A(E) = \operatorname{tr} \mathbb{P}_A(E) M$$

gegeben.

Für die Zustände gilt die Hilbert-Schmidtsche Zerlegung: es gibt eine orthonormale Basis $(\psi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ in $\mathcal{H}$ mit

$$M = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n P_{\psi_n}, \quad \operatorname{tr} M = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n = 1,$$

$\alpha_n > 0$ sind die EW von M. Daher

$$\mu_A(E) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n (\mathbb{P}_A(E)\psi_n, \psi_n) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \|\mathbb{P}_A(E)\psi_n\|^2$$
$$\leq \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n = 1$$

Sei $\mu_A(\lambda)$ die Verteilungsfunktion von μ_A.
Für reine $\underbrace{\text{Zustände}}_{M = P_\psi \text{ gilt}}$ $\mu_A(\lambda) = (\mathbb{P}_A(\lambda)\psi, \psi)$.

<u>Satz</u>. Es seien $A \in \mathcal{A}$ und $M \in \mathcal{S}$ so, dass $\langle A | M \rangle < \infty$ und $\operatorname{Bild}(M) \subseteq D(A)$. Dann $AM \in \mathcal{J}_1$ und

$$\langle A | M \rangle = \operatorname{tr}(AM).$$

Ist insbesondere $M = P_\psi$ mit $\psi \in D(A)$, so gilt

$$\langle A | M \rangle = \langle A\psi, \psi \rangle \quad \text{und} \quad \langle A^2 | M \rangle = \|A\psi\|^2$$

<u>Beweis</u>. Sei $(e_n)_{n=1}^{\infty}$ eine ONB von $\mathcal{H}$. Dann

$$\mu_A(E) = \operatorname{tr} \mathbb{P}_A(E) M = \sum_{n=1}^{\infty} (\mathbb{P}_A(E) M e_n, e_n) = \sum_{n=1}^{\infty} \mu_n(E)$$

(mit den beschränkten Maßen $\mu_n(E) := (\mathbb{P}_A(E) M e_n, e_n)$ auf $\mathbb{R}$). Da $\int_{\mathbb{R}} f \, d\mu_A = \sum_{n=1}^{\infty} \int_{\mathbb{R}} f \, d\mu_n$, impliziert der Spektralsatz:

$$\sum_{n=1}^{\infty} (AMe_n, e_n) = \sum_{n=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, d\mu_n(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, d\mu_A(\lambda) < \infty .$$

Also $AM \in \mathcal{J}_1$ und $\langle A|M\rangle = \mathrm{tr}(AM)$. Insbesondere für $M = P_\psi$ mit $\psi \in D(A)$:

$$\langle A|M\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, d(\mathbb{P}_A(\lambda)\psi, \psi) = (A\psi, \psi)$$

Aus dem Spektralsatz folgt weiter:

$$\|A\psi\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 \, d(\mathbb{P}_A(\lambda)\psi, \psi) \underset{\text{Substitutionsregel}}{=} \int_0^{\infty} \lambda \, d(\mathbb{P}_{A^2}(\lambda)\psi, \psi) = \langle A^2|M\rangle$$

∎

<u>Korollar</u>. $\langle A|M\rangle, \langle A^2|M\rangle < \infty \Rightarrow AM \in \mathcal{J}_1$ und $\langle A|M\rangle = \mathrm{tr}(AM)$.

<u>Beweis</u> Da

$$\int_{-\infty} \lambda^2 \, d\mu_n(\lambda) \le \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 \, d\mu_A(\lambda) = \langle A^2|M\rangle < \infty,$$

bekommen wir $e_n \in D(AM)$ und weiter wie oben. ∎

wenden

VL 8, 11.11.2010

<u>Def</u>. Zwei s.a. Operatoren $A, B \in \mathcal{A}$ sind <u>vertauschbar</u>, wenn $\mathbb{P}_A(E_1)\mathbb{P}_B(E_2) = \mathbb{P}_B(E_2)\mathbb{P}_A(E_1) \quad \forall E_1, E_2 \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$.

Wir schreiben $[A, B] = 0$, obwohl $[A, B] = AB - BA$ nicht unbedingt geschlossen ist, z. B., kann nur für $\psi = 0$ definiert sein.

<u>Satz</u> (folgt aus dem Spektralsatz). $A, B \in \mathcal{A}$ sind vertauschbar

$\Leftrightarrow R_\lambda(A) R_\mu(B) = R_\mu(B) R_\lambda(A) \quad \forall \lambda, \mu \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$

$\Leftrightarrow \forall u, v \in \mathbb{R} \quad e^{iuA} e^{ivB} = e^{ivB} e^{iuA}$

$\Leftrightarrow \forall u \in \mathbb{R} \quad e^{iuA}$ und B sind vertauschbar.

Warum interessieren wir uns für vertauschbare Operatoren?

<u>Bemerkung</u>. Wenn $\langle A|\mu\rangle$ existiert, ist oft der folgende technische Trick nützlich. Sei

$$A_N := f_N(A), \quad f_N = \chi_{[-N,N]},$$

sodaß $A_N \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$. Dann

$$\langle A|\mu\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, d\mu_A(\lambda) = \lim_{N\to\infty} \int_{-N}^{N} \lambda \, d\mu_A(\lambda) = \lim_{N\to\infty} \langle A_N|\mu\rangle$$

Die gleichzeitige Messung von zwei Observablen A, B im Zustand M sollte beschrieben werden durch ein W-Maß $\mu_{A,B}$ auf $\mathbb{R}^2$ mit

$$\mu_{A,B}(E_1 \times E_2) = \operatorname{tr}\left(\mathbb{P}_A(E_1)\,\mathbb{P}_B(E_2)\,M\right)$$

Das ist aber genau dann ein W-Maß auf $\mathbb{R}^2$, wenn $\mathbb{P}_A(E_1)\mathbb{P}_B(E_2)$ ein projektorwertiges Maß auf $\mathbb{R}^2$ definiert. Das Produkt zweier Projektoren ist aber nur dann ein Projektor, wenn

$$\begin{array}{l} (P_A P_B)^2 = P_A P_B = P_A P_A P_B P_B \iff \boxed{P_B P_A = P_A P_B} \\ \quad \shortparallel \\ P_A P_B P_A P_B \end{array}$$

Das reicht dann auch aus:

Satz. Für vertauschbare A, B existiert ein eindeutiges projektorwertiges Maß $\mathbb{P}_{A,B}$ auf $\mathbb{R}^2$ mit

$$\mathbb{P}_{A,B}(E_1 \times E_2) = \mathbb{P}_A(E_1)\,\mathbb{P}_B(E_2).$$

Für jede meßbare Funktion auf $\mathbb{R}^2$, endlich f.ü. bez. $\mathbb{P}_{A,B}$, ~~der Operator~~ die Zuordnung $f \mapsto f(A,B)$,

$$f(A,B) := \int_{\mathbb{R}^2} f \, dP_A$$

(in der schwachen Operatorentopologie) hat dieselben Eigenschaften wie in Teil 2) des Spektralsatzes.

Der Träger von $\mathbb{P}_{A,B}$ heißt das <u>gemeinsame Spektrum</u> von A, B.

<u>A6</u> Eine endliche Familie $\{A_1, \dots, A_n\}$ von Observablen kann genau dann gleichzeitig gemessen werden, wenn sie paarweise vertauschbar sind. Die gleichzeitige Messung: $(A_1, \dots, A_n, M) \mapsto \mu_{A_1 \dots A_n}$ – ein W-Maß auf $\mathbb{R}^n$, gegeben durch

$$\mu_{A_1 \dots A_n}(E) = \operatorname{tr} \mathbb{P}_{A_1 \dots A_n}(E)\,M,$$

$$\mathbb{P}_{A_1 \dots A_n}(E_1 \times \dots \times E_n) = \mathbb{P}_{A_1}(E_1) \cdots \mathbb{P}_{A_n}(E_n).$$

<u>A1 — A6 heißen die Axiome von Dirac-von Neumann</u>

~~Aufgabe~~ Heisenbergsche Unschärferelation

Varianz einer Observablen A im Zustand M:

$$\sigma_M^2(A) = \langle A^2 | M\rangle - \langle A|M\rangle^2,$$

falls beide Erwartungswerte existieren. Für $M = P_\psi$, $\psi \in D(A)$:

$$\sigma_M^2(A) = \sigma_{P_\psi}^2(A) = \|A\psi\|^2 - (A\psi,\psi)^2$$

Satz. Für $A \in \mathcal{A}$ und $M \in S$, $\sigma_M(A) = 0 \Leftrightarrow$ Bild(M) ist ein Eigenunterraum für A mit Eigenwert $a = \langle A|M\rangle$.

Für $M = P_\psi$, $\sigma_{P_\psi}^2(A) = 0 \Leftrightarrow A\psi = a\psi$.

Beweis. Aus dem Spektralsatz folgt:

$$\sigma_M^2(A) = \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda - a)^2 \, d\mu_A(\lambda)$$

$\Rightarrow \sigma_M(A) = 0 \Leftrightarrow$ der Träger von μ_A ist $\{a\}$, $\mu_A(\{a\}) = 1$.
Da $\mu_A(\{a\}) = \operatorname{tr} P_A(\{a\})M$ und $\operatorname{tr} M = 1$, es ist äquivalent zu Bild(M) = invarianter Unterraum von $P_A(\{a\})$, und aus dem Spektralsatz

$$A\varphi = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, dP_A(\lambda)\varphi$$

folgt, daß dieser Raum Eigenraum für A zum EW a ist.

Varianz einer Observablen A in einem reinen Zustand ψ $= 0 \Leftrightarrow A\psi = a\psi$

Satz. Für $A, B \in \mathcal{A}$ und $M = P_\psi$ (einen reinen Zustand) mit $\psi \in D(A) \cap D(B)$ und $A\psi, B\psi \in D(A) \cap D(B)$ gilt:

$$\sigma_M^2(A)\,\sigma_M^2(B) \geq \frac{1}{4} \langle i[A,B] \,|\, M\rangle^2.$$

Dies gilt auch für alle $M \in S$, mit der Konvention

$$\langle i[A,B] | M\rangle := \lim_{N\to\infty} \langle i[A_N, B_N] | M\rangle.$$

Beweis. Es sei zunächst $M = P_\psi$. Da

$$[A - \langle A|M\rangle I,\; B - \langle B|M\rangle I] = [A, B],$$

reicht es zu zeigen

$$\langle A^2|M\rangle \langle B^2|M\rangle \geq \frac{1}{4} \langle i[A,B] | M\rangle.$$

$$\|(A+i\tau B)\psi\|^2 = \tau^2(B\psi,B\psi) - i\tau(A\psi,B\psi) + i\tau(B\psi,A\psi) + (A\psi,A\psi)$$

$$= \tau^2(B^2\psi,\psi) + \tau(i[A,B]\psi,\psi) + (A^2\psi,\psi) \geq 0$$

$$\to 4(A^2\psi,\psi)(B^2\psi,\psi) \geq (i[A,B]\psi,\psi)^2.$$

Analog – für beschränkte Operatoren

$$0 \leq \operatorname{tr}(A+i\tau B)M(A+i\tau B)^* = \operatorname{tr}(A+i\tau B)M(A-i\tau B) =$$

$$= \tau^2 \operatorname{tr} BMB + i\tau \operatorname{tr} BMA - i\tau \operatorname{tr} AMB + \operatorname{tr} AMA$$

$$= \tau^2 \operatorname{tr} B^2M + \alpha \operatorname{tr}(i[A,B]M) + \operatorname{tr} A^2M$$

$$\to 4 \operatorname{tr}(A^2M) \operatorname{tr}(B^2M) \geq \operatorname{tr}(i[A,B]M)^2.$$

Im allgemeinen Fall – durch $A \sim A_N$, $B \sim B_N$ und $N \to \infty$.

B

Dynamik

Heisenberg: $\frac{dM}{dt} = 0$, $M \in S$, $\frac{dA}{dt} = \{H, A\}_h = \frac{i}{h}[H,A]$.

Wohldefiniert für $A, H \in \mathcal{A}_0 = \mathcal{A} \cap \mathcal{L}(\mathcal{H})$, in diesem Fall hat man die stetige (in der starken Topologie) 1-parametrige Gruppe unitärer Operatoren

$$U(t) = e^{-\frac{i}{h}tH},$$

$$ih\frac{dU(t)}{dt} = HU(t) = U(t)H,$$

und für $A \in \mathcal{A}_0$ gilt $A(t) = U^{-1}(t)AU(t)$.

Im allgemeinen Fall, hat man eine stetige 1-parametrige Gruppe unitärer Operatoren $U(t)$, $A(t) = U^{-1}(t)AU(t)$, und ein Satz (von Stone) besagt, daß diese Gruppe einen s.a. erzeugenden Operator hat:

$D(H) = \{\varphi \in \mathcal{H} : \lim_{t\to 0} \frac{U(t)\varphi - \varphi}{t}$ existiert$\}$ – invarianter Unterraum für alle $U(t)$.

$$H\varphi = ih \lim_{t\to 0} \frac{U(t)\varphi - \varphi}{t}$$

Schrödinger: $A(t) \equiv A$, $M(t) = U(t)\, M\, U^{-1}(t) \in S$,

$$\frac{dM}{dt} = -\{H, M\}_h$$

Der Zustand M heißt stationär, wenn $\frac{dM(t)}{dt} = 0$

$\Leftrightarrow \{H, M\}_h = 0$.

Für reinen Zustand $M = P_\psi$: $M(t) = P_{\psi(t)}$, $\psi(t) = U(t)\psi$.

Da $D(H)$ unter U_t invariant ist, gilt

$$i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} = H\psi(t), \quad \psi(t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{it\lambda}{\hbar}} dP_H(\lambda)\, \psi(0)$$

Satz. Der reine Zustand $M = P_\psi$ ist genau dann stationär, wenn

$$H\psi = \lambda\psi,$$

d.h. ψ ein EV von H ist, und dann $\psi(t) = e^{-\frac{i\lambda t}{\hbar}}\psi(0)$

Beweis. Aus $U(t) P_\psi$ ~~folgt~~ $= P_\psi U(t)$ folgt, daß ψ ein gemeinsamer EV von allen $U(t)$ ist:

$$U(t)\psi = c(t)\psi, \quad |c(t)| = 1, \quad c(t) = (U(t)\psi, \psi).$$

Da $U(t)$ eine stetige Gruppe ist, genügt die stetige Fkt c der Gleichung $c(t_1+t_2) = c(t_1)c(t_2) \to c(t) = e^{-\frac{i\lambda t}{\hbar}}$.

Für $H\psi = U'(0)\psi$ bekommt man dann $H\psi = \lambda\psi$. ∎

5 Quantisierung.

Wie konstruiert man zu einem System der klassischen Mechanik einen Hilbertraum $\mathcal{H}$ und einen s.a. Hamiltonoperator H – ist das Problem der Quantisierung.

$(\mathcal{M}, \{\cdot,\cdot\}, H_{cl})$ – gegeben

Poisson Mf

Gesucht: $Q_h : C^\infty(\mathcal{M}) \xrightarrow{1:1} \mathcal{A} = \{$s.a. Operatoren auf $\mathcal{H}\}$,

~~auf~~ beschränkte Fkt $\to \mathcal{A}_0$, und auf letzterer muss

$$\left.\begin{array}{l} \lim_{h\to 0} Q_h^{-1}\left(Q_h(f)Q_h(g) + Q_h(g)Q_h(f)\right) = fg \\ \lim_{h\to 0} Q_h^{-1}\left(\{Q_h(f), Q_h(g)\}_h\right) = \{f,g\} \end{array}\right| \forall f,g \in \mathcal{A}_0$$