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

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

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

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

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 $\psi(t) = e^{-\frac{i\lambda t}{h}}\psi(0)$

Beweis. Aus $U(t) P_\psi = P_\psi U(t)$ 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 $c(t_1 + t_2) = c(t_1)c(t_2) \to c(t) = e^{-\frac{i}{h}\lambda t}$.

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

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

Poisson mf

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

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

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

Letzteres – das Korrespondenzprinzip von Niels Bohr.

Kanonischer symplektischer Raum der klassischen Mechanik.

$\mathbb{R}^{2n}(q^1,\dots,q^n,p_1,\dots,p_n)$, $\omega=\sum_{i=1}^{n} dp_i\wedge dq^i$

$\{p_k,p_l\}=0$, $\{q^k,q^l\}=0$, $\{p_k,q^l\}=\delta_k^l$, $k,l=1,\dots,n$.

<u>Heisenbergsche Kommutationsrelationen</u>: die entspr. s.a. Operatoren $P_1,\dots,P_n,Q^1,\dots,Q^n$ haben einen gemeinsamen invarianten dichten Unterraum $D\subset\mathcal{H}$, und <u>auf diesem Raum gilt</u>

$$\{P_k,P_l\}_h=0,\quad \{Q^k,Q^l\}_h=0,\quad \{P_k,Q^l\}_h=\delta_k^l I \Leftrightarrow$$
$$\Leftrightarrow [P_k,Q^l]=-i\hbar I\delta_k^l$$

(NB: die müssen unbeschränkt sein, da für beschränkte Operatoren kann nicht gelten

$$[A,B]=I,$$

da $\operatorname{tr}[A,B]=0$).

$\boxed{\text{VL 9, 16.11.2010}}$

Üblicherweise fordert man noch, daß die Darstellung der Kommutationsrelationen irreduzibel ist, d.h.,

- ~~[illegible]~~ ist ein beschränkter Operator auf $\mathcal{H}$ mit allen P_k,Q^l vertauschbar, so ist er gleich $c\,\mathrm{Id}$

$\Updownarrow$

- es gibt keinen nichttrivialen Unterraum $\mathcal{H}_0\subset\mathcal{H}$, der unter allen P_k,Q^l invariant bleibt.

(wäre $\mathcal{H}_0$ invariant unter P_k,Q^l, so wäre $P_{\mathcal{H}_0}$ mit P_k,Q^l vertauschbar;
wäre s.a. A mit P_k,Q^l vertauschbar, so könnte man $\mathcal{H}_0=$ Bild $P_A(\lambda)$ nehmen für ein λ, für das $P_A(\lambda)\neq 0,I$).

Die Heisenberg-Algebra H_n hat $2n+1$ Generatoren $e^1, \dots, e^n$, $f_1, \dots, f_n$, c mit den Relationen

$$[e^k, c] = 0, \quad [f_k, c] = 0 \qquad (c - \text{das zentrale Element})$$

$$[e^k, f_l] = \delta^k_l \, c$$

Eine Matrixdarstellung:

$$u^1 f_1 + \dots + u^n f_n + v_1 e^1 + \dots + v_n e^n + \alpha c$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & u^1 & u^2 & \cdots & u^n & \alpha \\ & & & & & v_1 \\ & & \ddots & 0 & & v_2 \\ & 0 & & 0 & & \vdots \\ & & & & 0 & v_n \\ & & & & & 0 \end{pmatrix} \in \mathrm{Mat}_{(n+2)\times(n+2)} = gl_{n+2}(\mathbb{R})$$

Die ist reduzibel, da $V = \left\{ \begin{pmatrix} x_1 \\ x_{n+1} \\ 0 \end{pmatrix} \right\}$ ist ein invarianter Unterraum (das zentrale Element c wirkt trivial auf V). Allerdings kann man diese Darstellung nicht ~~als~~ in eine direkte Summe zweier Darstellungen ~~darstellen~~ zerlegen (...), da $\mathbb{R}^{n+2} \neq V \oplus$ (1-dim. Unterraum)

Die Heisenberg-Gruppe: $\underline{H}_n = \{g\}$;

$$g = \begin{pmatrix} 1 & u^1 & \cdots & u^n & \alpha \\ & \ddots & 0 & & v_1 \\ & & & & \vdots \\ & 0 & & 1 & v_n \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \in SL_{n+2}(\mathbb{R}),$$

mit zwei n-parametrigen abelschen Untergruppen

$$\exp(u^1 f_1 + \dots u^n f_n) = \begin{pmatrix} 1 & u^1 \cdots u^n & 0 \\ & 1 \; \ddots \; 0 & 0 \\ & 0 \quad \ddots & \\ & & 1 \end{pmatrix} =: \exp(uX)$$

$$\exp(v_1 e^1 + \dots + v_n e^n) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ & 1 & 0 & v_1 \\ & & \ddots & \vdots \\ & 0 & 1 & v_n \\ & & & 1 \end{pmatrix} =: \exp(vY)$$

sowie dem 1-parametrigen Zentrum $\exp(\alpha c)$

Wegen $[uX, vY] = -uvc$, $uv = u^1v_1 + \dots + u^nv_n$ haben wir:

$$\left.\begin{aligned} \exp(uX)\exp(vY) &= \exp(-\tfrac{1}{2}uvc)\exp(uX+vY) \\ \exp(vY)\exp(uX) &= \exp(\tfrac{1}{2}uvc)\exp(uX+vY) \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

Schurs ~~Lemma~~ Lemma besagt, daß für jede irreduzible unitäre Darstellung R von $\underline{H}_n$ in $\mathcal{H}$ (als stark stetiger Gruppenhomomorphismus $\underline{H}_n \to \mathcal{U}(\mathcal{H})$) gelten muß: $R(e^{\alpha c}) = e^{-i\lambda\alpha} I$. Ist $\lambda = h$, so hat man für

$$U(u) = R(\exp(uX)), \quad V(v) = R(\exp(vY))$$

die Weylsche Relation

$$U(u)V(v) = e^{ihuv}\, V(v)U(u).$$

<u>Satz</u>. Hat man eine irreduzible unitäre Darstellung der Heisenberg-Gruppe, ~~[illegible]~~ und sind $P = i\frac{\partial U}{\partial u}\Big|_{u=0}$ und $Q = i\frac{\partial V}{\partial v}\Big|_{v=0}$ die infinitesimalen Erzeugenden der entsprechenden abelschen Untergruppen $U(u), V(v)$ so bilden sie eine irreduzible Darstellung der Heisenberg-Algebra.

Nicht umgekehrt! Also Weyl $\Rightarrow$ Heisenberg, aber nicht unbedingt Heisenberg $\Rightarrow$ Weyl.

Koordinatendarstellung $(n=1)$

$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}, dq)$

$D(Q) = \{\varphi \in \mathcal{H} : \int_{-\infty}^{\infty} q^2 |\varphi(q)|^2 dq < \infty\}$

$(Q\varphi)(q) = q\varphi(q)$

s. nächste Seite

Q ist s.a. mit $(P_Q(E)\varphi)(q) = \chi_E(q)\varphi(q)$. Der Träger dieses projektorwertigen Maßes ist $\mathbb{R}$, $\sigma(Q) = \mathbb{R}$

Satz a) Der Operator Q hat absolut stetiges Spektrum $\mathbb{R}$ ($\Leftrightarrow$ Maß $\mu_\varphi^{(Q)}(P_Q(E)\varphi, \varphi)$ ist bezüglich dq absolut stetig $\forall \varphi \in \mathcal{H}$, $\|\varphi\| = 1$ $\Rightarrow$ $\forall E$ mit $dq(E) = 0$ gilt auch $\mu_Q(E) = 0$ $\forall \varphi \in \mathcal{H}$). b) Jeder $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, der mit Q vertauschbar ist, ist $B = f(Q)$ mit einer beschränkten $f \in L^\infty(\mathbb{R})$.

Beweis. a) Aus $P_Q(E)\varphi = \chi_E \varphi$ folgt $\mu_Q(E) = \int_E |\varphi(q)|^2 dq$, daher ist μ_Q absolut stetig bez. dq.

b) $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ ist mit Q vertauschbar $\Leftrightarrow$ $BP_Q(E) = P_Q(E)B$ $\forall E \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ $\Leftrightarrow$

$$B(\chi_E \varphi) = \chi_E B(\varphi)$$

Wähle hier $E = E_1$, $\varphi = \chi_{E_2}$ mit $dq(E_1), dq(E_2) < \infty$, dann

$$B(\chi_{E_1} \cdot \chi_{E_2}) = B(\chi_{E_1 \cap E_2}) = \chi_{E_1} B(\chi_{E_2}) = \chi_{E_2} B(\chi_{E_1}).$$

Setze $f_E = B(\chi_E)$, dann

$$f_{E_1}|_{E_1 \cap E_2} = f_{E_2}|_{E_1 \cap E_2} \quad \forall E_1, E_2 \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$$ mit endlichem Lebesguemaß

Daher existiert eine meßbare f auf $\mathbb{R}$ mit $f|_E = f_E|_E$ $\forall E \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ mit endlichem Lebesguemaß

Span (χ_E) ist dicht in $L^2(\mathbb{R})$, B ist stetig

$P_Q(E)$ = Projektion auf den Unterraum von Funktionen mit Träger in E, d.h.

$$P_Q(E)\varphi = \chi_E \cdot \varphi$$

$$(P_Q(E)\varphi)(q) = \chi_E(q)\cdot\varphi(q) = \begin{cases}\varphi(q), & q\in E\\ 0, & q\notin E\end{cases}$$

$$(P_Q(\lambda)\varphi)(q) = \begin{cases}\varphi(q), & q<\lambda\\ 0, & q>\lambda\end{cases}$$

Der entsprechende Operator Q:

$$Q\varphi = \int_{-\infty}^{\infty}\lambda\, dP_Q(\lambda)\varphi = \lim_{\Delta\lambda\to 0}\sum q_i\left[P_Q(\lambda_{i+1})\varphi - P_Q(\lambda_i)\varphi\right]$$

(mit $q_i\in[\lambda_i,\lambda_{i+1}]$)

$$= \lim_{\Delta\lambda\to 0}\sum q_i\,\chi_{[\lambda_i,\lambda_{i+1}]}\varphi \doteq \text{„}q\text{"}\,\varphi \quad \text{mit „}q\text{"}(q) = q = \mathrm{id}(q)$$

also

$$(Q\varphi)(q) = \lim_{\Delta\lambda\to 0}\sum q_i\,\chi_{[\lambda_i,\lambda_{i+1}]}(q)\,\varphi(q) = \lim_{\Delta\lambda\to 0} q_i\,\varphi(q)$$ (wobei i dem Intervall $[\lambda_i,\lambda_{i+1}]\ni q$ entspricht) $= q\,\varphi(q)$.

$\Rightarrow \quad (B\varphi)(q) = f(q)\,\varphi(q) \qquad \forall \varphi \in C^2(\mathbb{R})$.

Da B beschränkt ist, ist f auch beschränkt, mit $\|f\|_\infty = \|B\|$. ∎

Bemerkung. Q hat keine EV, da

$$Q\varphi = \lambda\varphi$$

keine Lösungen in $L^2(\mathbb{R})$ hat. Lösungen in Distributionssinne: $\varphi_\lambda(q) = \delta(q-\lambda)$ – „verallgemeinerte Eigenfunktionen", oder „Eigenfunktionen des absolut stetigen Spektrums"

Interpretation: $\mu_Q(E)$ für einen reinen Zustand $M = P_\psi, \|\psi\|=1$ wieder

$$P = \frac{h}{i}\frac{d}{dq}, \quad D(P) = W^{1,2}(\mathbb{R}) \text{ – Sobolevraum}$$

P ist s.a. $= \{\varphi : \varphi$ absolut stetig, sodass φ' definiert fast überall, $\varphi, \varphi' \in L^2(\mathbb{R})\}$

Normalerweise definiert man P, Q als s.a. Erweiterungen von den entsprechenden Operatoren auf $D = C_0^\infty(\mathbb{R})$ – den Raum von glatten φ mit kompakten Träger. (man sieht leicht ein, das $Q|_D, P|_D$ symmetrisch sind, z.B.

$$(P\varphi, \psi) = \int \frac{h}{i}\frac{d\varphi(q)}{dq}\overline{\psi}(q)\,dq = \frac{h}{i}\varphi(q)\overline{\psi}(q)\Big|_{-\infty}^{\infty} - \frac{h}{i}\int \varphi \frac{d\overline{\psi}}{dq}\,dq = \int \varphi\, \overline{\frac{h}{i}\frac{d\psi}{dq}}\,dq = (\varphi, P\psi).\ )$$

Auf D gilt auch

$$QP - PQ = ih I:$$

$$(QP - PQ)\varphi(q) = q\frac{h}{i}\frac{d\varphi}{dq} - \frac{h}{i}\frac{d}{dq}(q\varphi) = -\frac{h}{i}\varphi = ih\varphi$$

Bemerkung Auch P hat keine EV, da

$$P\varphi = -i\hbar \frac{d\varphi}{dq} = p\varphi$$

keine Lösungen in $L^2(\mathbb{R})$ hat: Lösungen der DG lauten $\varphi(q) = e^{\frac{i}{\hbar}pq} \notin L^2(\mathbb{R})$.

Stark stetige Gruppen von unitären Operatoren, die Q bzw P als Erzeugende haben:

$$U(u) = e^{-iuP} \qquad V(v) = e^{-ivQ} \qquad \left(\begin{array}{l} P = i \frac{\partial U}{\partial u}\Big|_{u=0} \\ Q = i \frac{\partial V}{\partial v}\Big|_{v=0} \end{array} \right)$$

sind gegeben durch

$$(V(v)\varphi)(q) = e^{-ivq}\varphi(q) \qquad \text{(Multiplikation mit } e^{-ivq}\text{)}$$

$$(U(u)\varphi)(q) = \varphi(q-hu) \longrightarrow \text{wende!}$$

Sie genügen den sogenannten Weylschen Kommutationsrelationen:

$$U(u)V(v) = e^{ihuv}V(v)U(u)$$

In der Tat,

$$(U(u)V(v)\varphi)(q) = U(u)\, e^{-ivq}\varphi(q) = e^{-iv(q-hu)}\varphi(q-hu)$$

$$= e^{ihuv}e^{-ivq}\varphi(q-hu)$$

$$(V(v)U(u)\varphi)(q) = V(v)\,\varphi(q-hu) = e^{-ivq}\varphi(q-hu)$$

<u>Satz</u>. Die Koordinatendarstellung ist eine irreduzible, unitäre, integrierbare Darstellung von H_n.

<u>Beweis</u>. Integrierbar - bewiesen, da $U(u), V(v)$ explizit vorgelegt. Irreduzible: sei $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ mit P, Q vertauschbar. Dann $B = f(Q)$ mit $f \in L^\infty(\mathbb{R})$, und weiter

$$BU(u) = U(u)B \Leftrightarrow f(q-hu) = f(q) \quad \forall q,u \in \mathbb{R}$$

$\Rightarrow f(q) = \text{konst}$ (f.ü.) ▨

Sei $\varphi(u,q) = e^{-iuP}\varphi(q)$, d.h.

$$\frac{\partial\varphi(u,q)}{\partial u} = -iP\,\varphi(u,q) = -h\,\frac{\partial\varphi(u,q)}{\partial q}$$

mit Anfangsbedingung

$$\varphi(u,q)\big|_{u=0} = \varphi(q)$$

Lösung: $\varphi(u,q) = \varphi(q-hu)$

Formal: $e^{-iuP}\varphi(q) = e^{-hu\frac{d}{dq}}\varphi(q) =$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-hu)^n}{n!}\frac{d^n\varphi}{dq^n} = (\text{Taylor})\ \varphi(q-hu)$$

Momentumdarstellung: $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}, dp)$, $\hat{Q} = i\hbar \frac{d}{dp}$, $\hat{P} = p$

Fouriertransformation:

$$\mathcal{F}_\hbar : L^2(\mathbb{R}) \to L^2(\mathbb{R})$$

$$\hat{\varphi}(p) = (\mathcal{F}_\hbar \varphi)(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q) e^{-\frac{i}{\hbar} pq} dq$$

$\left(= \lim_{N \to \infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-N}^{N} \varphi(q) e^{-\frac{i}{\hbar} pq} dq \right.$ in der starken Topologie aus $\left. L^2(\mathbb{R}) \right)$

$$\varphi(x) = (\mathcal{F}_\hbar^* \hat{\varphi})(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\varphi}(p) e^{\frac{i}{\hbar} pq} dp,$$

oder $\mathcal{F}_\hbar^* \mathcal{F}_\hbar = \mathcal{F}_\hbar \mathcal{F}_\hbar^* = I$ (Plancherells Satz),

d.h. $\mathcal{F}_\hbar$ unitär. $\quad \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(q)|^2 dq = \int_{-\infty}^{\infty} |\hat{\varphi}(p)|^2 dp$)

Einfache Rechnung:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dq} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} pq} \hat{\varphi}(p) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} pq} p \hat{\varphi}(p) dp$$

zeigt, daß

$$\hat{Q} \mathcal{F}^* = \mathcal{F}^* \hat{Q} \iff \hat{Q} = \mathcal{F} Q \mathcal{F}^*$$

und analog

$$\hat{P} = \mathcal{F} P \mathcal{F}^*,$$

sodaß die Koordinaten- und Momentumdarstellungen unitär equivalent sind. Wir werden sehen, daß das die Folgerung eines allgemeinen Satzes von von Neumann-Stone ist, nach dem alle irreduziblen Darstellungen der Heisenberg-Algebra unitär equivalent sind.

Bemerkungen zu den „Eigenfunktionen" der Operatoren Q, P

$$(Q\varphi)(q) = q\,\varphi(q) = \lambda\varphi(q) \rightsquigarrow \varphi_\lambda(q) = \delta(q-\lambda)$$

$$(P\psi)(q) = \frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dq} = \mu\,\psi(q) \rightsquigarrow \psi_\mu(q) = e^{\frac{i\mu q}{\hbar}}$$

Die ersten sind ~~ve~~ verallgemeinerte Funktionen, die zweiten gewöhnliche Funktionen, aber beide $\notin \mathcal{H}$.

Die Koordinatendarstellung ist dadurch ausgezeichnet, dass sie als Eigendarstellung im Q-Operator dient.

Tatsächlich, sind die Formeln

$$(Q\varphi)(q) = q\,\varphi(q)$$

analog zur Formel

$$A\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \vdots\\ \varphi_n\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_1\varphi_1\\ \vdots\\ a_n\varphi_n\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_1 & & \\ & \ddots & \\ & & a_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \vdots\\ \varphi_n\end{pmatrix}$$

für die Koordinaten $\varphi_1,\dots,\varphi_n$ eines beliebigen Vektors in der Eigenbasis

$$Ae_i = a_i e_i$$

$$\varphi = \sum_{i=1}^{n}\varphi_i e_i = \sum_{i=1}^{n}(\varphi, e_i)\, e_i$$

~~Wir können von $(\varphi_1,\dots,\varphi_n)$ denken als an einer Funktion $\varphi(x)$ mit $\varphi($~~

$$(f(Q)\varphi)(q) = f(q)\,\varphi(q)$$

$$(P_Q(\lambda)\varphi)(q) = \theta(\lambda-q)\,\varphi(q) = \begin{cases}\varphi(q), & q<\lambda\\ 0, & q\geq\lambda\end{cases}$$

In der endlich-dimensionalen Situation seien

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad e_i = \begin{pmatrix} e_1^{(i)} \\ \vdots \\ e_n^{(i)} \end{pmatrix}$$

und $\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_n$ - Komponenten von x in der Eigenbasis

$$\hat{x}_i = (x, e_i) = \sum_{k=1}^n x_k \overline{e_k^{(i)}} = \sum_{k=1}^n U_{ik} x_k ,$$

sodass die Matrix $U = (U_{ik}) = (\bar{e}_k^{(i)})$ die Transformation zur Eigenbasis (Spektraltransformation) macht. Sie ist unitär, da

$$\sum_{k=1}^n U_{ik} U^{-1}_{kj} = \sum_{k=1}^n U_{ik} \overline{U_{jk}} = \sum_{k=1}^n \bar{e}_k^{(i)} e_k^{(j)} = (e_j, e_i) = \delta_{ij} .$$

$$\left.\begin{array}{l} e_i \rightsquigarrow \psi_p(q) \\ \hat{x}_i \rightsquigarrow \hat{\varphi}(p) \end{array}\right\} \quad \text{denn} \quad \hat{\varphi}(p) = (\varphi, \psi_p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q) e^{-\frac{ipq}{\hbar}} dq$$

(Bis auf Normierung $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$)

Also $\overline{\psi_p(q)}$ gibt den Kern des unitären Operators, der die Koordinatendarstellung in die Impulsdarstellung überführt (Eigendarstellung von P).

Analog, $\varphi_\lambda(q) = \delta(q-\lambda)$ liefern den Kern des Identitätsoperators (~~da~~ der Eigendarstellung von Q)

$$\varphi(\lambda) = (\varphi, \varphi_\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q) \delta(q-\lambda) dq = \varphi(\lambda)$$

Übergang von der Koordinatendarstellung zur Momentumdarstellung. Wir betrachten die Operatoren (Observablen), die als Integraloperatoren gegeben sind:

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

mit dem Kern $A(q,\lambda)$ (für Multiplikationsoperatoren mit $f(q)$ gilt $A(q,\lambda) = f(q)\,\delta(q-\lambda)$).

Dann

$$(\hat{A}\hat{\varphi})(p) = (\mathcal{F}A\mathcal{F}^{*}\hat{\varphi})$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-\frac{i}{\hbar}pq} (A\varphi)(q)\,dq$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-\frac{i}{\hbar}pq} \int A(q,\lambda)\,\varphi(\lambda)\,d\lambda\,dq =$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-\frac{i}{\hbar}pq} \int A(q,\lambda) \int \hat{\varphi}(\mu)\, e^{\frac{i}{\hbar}\lambda\mu}\,d\mu\,d\lambda\,dq$$

$$= \int \hat{A}(p,\mu)\,\hat{\varphi}(\mu)\,d\mu$$

mit

$$\boxed{\hat{A}(p,\mu) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}pq} A(q,\lambda)\, e^{\frac{i}{\hbar}\lambda\mu}\,d\lambda\,dq}$$

Für Multiplikationsoperatoren

$$\hat{A}(p,\mu) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}pq} f(q)\,\delta(q-\lambda)\, e^{\frac{i}{\hbar}\lambda\mu}\,d\lambda\,dq$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} f(q)\, e^{\frac{i}{\hbar}q(\mu-p)}\,dq$$

(VL 11, 23.11.2010)

Wir haben zwei verschiedene (aber äquivalente) Darstellungen der Heisenbergschen Algebra betrachtet. Das löst aber noch nicht das Problem der Quantisierung, d.h. der Zuordnung

$$\mathcal{A}_{cl} \ni f \longmapsto \mathcal{Q}(f) \in \mathcal{A}$$

$$\mathcal{A}_{cl} = C^\infty(M), \qquad \mathcal{A} \subset \{\text{s.a. Operatoren auf } \mathcal{H}\}$$

Es bleibt u.a. ungeklärt, wie man diese Zuordnung für Funktionen von nicht-vertauschbaren Operatoren Q, P erklären soll.

Wir betrachten eine Möglichkeit (Weylsche Transformation).

Es wird die 2d-Fourier-Transformation benutzt

$$f(p,q) = \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}^2} \hat{f}(u,v)\, e^{-iqv-ipu}\, du\, dv$$

$$\hat{f}(u,v) = \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}^2} f(p,q)\, e^{iqv+ipu}\, dp\, dq$$

Eigenschaft:

$$\overline{\hat{f}(u,v)} = \hat{f}(-u,-v)$$

Wir würden hier gerne p, q durch P, Q ersetzen, d.h. e^{-iqv}, e^{-ipu} durch $V(v), U(u)$, aber in welcher Reihenfolge? Weylsche Transformation:

$$A_f = \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}^2} \hat{f}(u,v)\, V(v)\, U(u)\, e^{\frac{i\hbar}{2}uv}\, du\, dv$$

Der nicht-offensichtliche Faktor $e^{\frac{i\hbar}{2}uv}$ sorgt für Selbst-Adjungiertheit:

$$A_f^* = \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}^2} \overline{\hat{f}(u,v)}\, U^*(u)\, V^*(v)\, e^{-\frac{i\hbar}{2}uv}\, du\, dv$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}^2} \hat{f}(-u,-v)\, U(-u)\, V(-v)\, e^{-\frac{i\hbar}{2}uv}\, du\, dv$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}^2} \hat{f}(u,v)\, U(u)\, V(v)\, e^{-\frac{i\hbar}{2}uv}\, du\, dv$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}^2} \hat{f}(u,v)\, V(v)\, U(u)\, e^{\frac{i\hbar}{2}uv}\, du\, dv = A_f.$$

Jetzt – zur Umkehrformel. Für Integraloperatoren K mit dem Kern $K(x,y)$ gilt

$$\operatorname{tr} K = \int K(x,x)\,dx$$

Wir finden den Kern vom Operator $V(v)\,U(u)$. Da

$$(V(v)\,U(u)\,\varphi)(x) = e^{-ivx}\,\varphi(x-uh),$$

ist der entsprechende Kern gleich

$$e^{-ivx}\,\delta(x-uh-y)$$

und daher

$$\operatorname{tr} V(v)\,U(u) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ivx}\,\delta(-uh)\,dx = \frac{2\pi}{h}\,\delta(v)\,\delta(u)$$

Wir prüfen jetzt die Umkehrformel

$$\boxed{\hat{f}(u,v) = h \operatorname{tr} A_f\, V(-v)\, U(-u)\, e^{\frac{ihuv}{2}}}$$

In der Tat,

$$\operatorname{tr} A_f\, V(-v)\, U(-u)\, e^{ihuv/2}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \operatorname{tr} \int \hat{f}(u',v')\, V(v')\, U(u')\, e^{ihu'v'/2}\, V(-v)\, U(-u)\, e^{\frac{ihuv}{2}}\, du'\,dv'$$

$$= \frac{1}{2\pi} \operatorname{tr} \int \hat{f}(u',v')\, V(v')\, V(-v)\, U(u')\, U(-u)\, e^{\frac{ih}{2}(u'v'+uv-2u'v)}\, du'\,dv'$$

$$= \frac{1}{2\pi} \operatorname{tr} \int \hat{f}(u',v')\, V(v'-v)\, U(u'-u)\, e^{\frac{ih}{2}(u'v'+uv-2u'v)}\, du'\,dv'$$

$$= \frac{1}{2\pi}\,\frac{2\pi}{h} \int \hat{f}(u',v')\,\delta(v'-v)\,\delta(u'-u)\, e^{\frac{ih}{2}(u'v'+uv-2u'v)}\, du'\,dv'$$

$$= \frac{1}{h}\,\hat{f}(u,v)\, e^{\frac{ih}{2}(uv+uv-2uv)} = \frac{1}{h}\,\hat{f}(u,v)$$

Insbesondere für $u=v=0$ finden wir:

$$\operatorname{tr} A_f = \frac{1}{h}\,\hat{f}(0,0) = \frac{1}{2\pi h} \int f(p,q)\,dp\,dq$$

Welche Funktionen auf dem Phasenraum entsprechen den Operatoren

$$A_f \circ A_g = \frac{1}{2}(A_f A_g + A_g A_f)$$

und $\{A_f, A_g\}_h = \frac{i}{h} [A_f, A_g]$?

Wir fangen an mit dem Produkt $A_f A_g$. ~~Setzen~~ ~~Zum~~ $\to F(p,q)$. Ihre Fourier-Transformation:

$$\hat{F}(u,v) = h \operatorname{tr} A_f A_g V(-v) U(-u) e^{\frac{ihuv}{2}}$$

$$= \frac{h}{(2\pi)^2} \operatorname{tr} \iint du_1 dv_1 \hat{f}(u_1,v_1) V(v_1) U(u_1) e^{\frac{ih}{2}u_1 v_1}$$
$$\iint du_2 dv_2 \hat{g}(u_2,v_2) V(v_2) U(u_2) e^{\frac{ih}{2}u_2 v_2}$$
$$V(-v) U(-u) e^{\frac{ih}{2}uv}$$

$$= \frac{h}{(2\pi)^2} \operatorname{tr} \iint du_1 dv_1 du_2 dv_2 \hat{f}(u_1,v_1) \hat{g}(u_2,v_2) V(v_1+v_2-v) U(u_1+u_2-u)$$
$$e^{\frac{ih}{2}(u_1 v_1 + u_2 v_2 + uv - 2u_2 v + 2u_1 v_2 - 2u_1 v)}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \iint du_1 dv_1 du_2 dv_2 \hat{f}(u_1,v_1) \hat{g}(u_2,v_2) \delta(v_1+v_2-v) \delta(u_1+u_2-u)$$
$$e^{\frac{ih}{2}(u_1 v_1 + u_2 v_2 + (u_1+u_2)(v_1+v_2) - 2(u_1+u_2)(v_1+v_2) + 2u_1 v_2}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \iint du_1 dv_1 du_2 dv_2 \hat{f}(u_1,v_1) \hat{g}(u_2,v_2) \delta(v_1+v_2-v) \delta(u_1+u_2-u)$$
$$e^{\frac{ih}{2}(u_1 v_2 - u_2 v_1)}$$

Dies ist zu vergleichen mit der Fourier-Transformation des Produktes $f(p,q) \cdot g(p,q)$, die die Faltung von $\hat{f}(u,v)$, $\hat{g}(u,v)$ ist:

$$\widehat{fg}(u,v) = \iint du_1 dv_1 du_2 dv_2 \hat{f}(u_1,v_1) \hat{g}(u_2,v_2) \delta(v_1+v_2-v) \delta(u_1+u_2-u)$$

Wir sehen, daß $\hat{F}(u,v) \neq \widehat{fg}(u,v)$, aber bei $h \to 0$ gilt $\hat{F}(u,v) \xrightarrow[h\to 0]{} \widehat{fg}(u,v)$ und daher $F(p,q) \xrightarrow[h\to 0]{} f(p,q) g(p,q)$.

Zur Letzt betrachten wir $\{A_f, A_g\}_h = \frac{i}{h}(A_f A_g - A_g A_f)$. Ist die entsprechende Funktion $G(p,q)$, so ist ihre Fourier-Transformation

$$\hat G(u,v) = \frac{i}{2\pi h}\iint du_1\, dv_1\, du_2\, dv_2\; \hat f(u_1,v_1)\, \hat g(u_2,v_2)\, \delta(v_1+v_2-v)\, \delta(u_1+u_2-u)$$
$$\left(e^{\frac{ih}{2}(u_1v_2-u_2v_1)} - e^{\frac{ih}{2}(u_2v_1-u_1v_2)}\right)$$

$$= \iint du_1\, dv_1\, du_2\, dv_2\; \hat f(u_1,v_1)\, \hat g(u_2,v_2)\; \frac{\sin \frac{h}{2}(u_2v_1-u_1v_2)}{\pi h}\; \begin{matrix}\delta(v_1+v_2-v)\\ \delta(u_1+u_2-u)\end{matrix}$$

$$\xrightarrow[h\to 0]{} \frac{1}{\pi}\iint du_1\, dv_1\, du_2\, dv_2\; \hat f(u_1,v_1)\, \hat g(u_2,v_2)\cdot(u_2v_1-u_1v_2)\; \begin{matrix}\delta(v_1+v_2-v)\\ \delta(u_1+u_2-u)\end{matrix}$$

= Fourier-Transformation von

$$\frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial g}{\partial p} = \{f,g\},$$

weil $-iv\hat f$, $-iu\hat f$ die Fourier-Transformierten von $\frac{\partial f}{\partial q}$, $\frac{\partial f}{\partial p}$ sind.

Folgerungen. Es seien den Quantenmechanischen Operatoren A_f (der Observablen), M (dem Zustand), H (dem Hamilton-Operator) die Funktionen $f(p,q)$, $\rho_1(p,q)$, $H(p,q)$ zugeordnet. Dann:

$$\mathrm{tr}\, M = 1 = \int_\mu \frac{\rho_1(p,q)}{2\pi h}\, dp\, dq = \int_\mu \rho(p,q)\, dp\, dq,$$

sodaß $\rho(p,q) := \frac{\rho_1(p,q)}{2\pi h}$ die Normierung einer Dichte hat. Desweiteren gilt

$$\mathrm{tr}\, M A_f \xrightarrow[h\to 0]{} \int_\mu f(p,q)\, \rho(p,q)\, dp\, dq$$

($\neq 0$ für $h \neq 0$! Man sollte beachten daß für $h\neq 0$ die Funktion $\rho(p,q)$ braucht nicht positiv zu sein, also einem klassischen Zustand zu entsprechen, sie tut es erst im Limes $h\to 0$!)

Heisenbergsche Gleichung

$$\frac{dA_f}{dt} = \{H, A_f\}_h \xrightarrow[h\to 0]{}$$

Hamiltonsche Gleichung

$$\frac{df}{dt} = \{H, f\}$$

Beispiel (Anwendung)

Aus $A_f = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \hat{f}(u,v)\, V(v) U(u)\, e^{\frac{ih}{2}uv}\, du\, dv$

finden wir den Kern dieses Operators in der Koordinatendarstellung

Kern davon $= e^{-ivx}\,\delta(x-y-uh)$

Also

$$A_f(x,y) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \hat{f}(u,v)\, e^{-ivx}\, \delta(x-y-uh)\, du\, dv$$

$$= \frac{1}{2\pi h} \int_{\mathbb{R}^2} \hat{f}\left(\frac{x-y}{h}, v\right) e^{-\frac{iv}{2}(x+y)}\, dv$$

Für eine Funktion f, die nur von q abhängt:

$$\hat{f}(u,v) = \frac{1}{2\pi} \int f(q)\, e^{ivq}\, e^{iup}\, dp\, dq = \tilde{f}(v)\, \hat{c}(u),$$

wobei $\tilde{f}(v)$ die 1-dim-Fourier-Transformation ist.

Also

$$A_f(x,y) = \frac{1}{2\pi h} \int_{\mathbb{R}} \delta\left(\frac{x-y}{h}\right) \tilde{f}(v)\, e^{-\frac{iv}{2}(x+y)}\, dv$$

$$= \delta(x-y)\, f\left(\frac{x+y}{2}\right) = \delta(x-y)\, f(x) \text{ –}$$

der Kern des Operators der Multiplikation mit $f(q)$

55

Beispiele der Berechnung der Weylschen Quantisierung

VL 12, 25.11.2010

$$A_f = \frac{1}{2\pi} \iint_{\mathbb{R}^2} du\, dv\, \hat{f}(u,v)\, e^{\frac{i\hbar}{2} uv}\, V(v)\, U(u)$$

In der Koordinatendarstellung

$$(A_f \psi)(x) = \frac{1}{2\pi} \iint_{\mathbb{R}^2} du\, dv\, \hat{f}(u,v)\, e^{\frac{i\hbar}{2} uv}\, e^{-ivx}\, \psi(x - \hbar u)$$

$$x - \hbar u = \xi \qquad u = \frac{x-\xi}{\hbar}$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \iint_{\mathbb{R}^2} d\xi\, dv\, \hat{f}\left(\frac{x-\xi}{\hbar}, v\right) e^{\frac{i}{2}(x-\xi)v - ivx}\, \psi(\xi)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \iint_{\mathbb{R}^2} d\xi\, dv\, \hat{f}\left(\frac{x-\xi}{\hbar}, v\right) e^{-\frac{iv}{2}(x+\xi)}\, \psi(\xi)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2\hbar} \iint_{\mathbb{R}^2} d\xi\, dv \iint_{\mathbb{R}^2} dp\, dq\, f(p,q)\, e^{ivq}\, e^{ip\frac{x-\xi}{\hbar}}\, e^{-\frac{iv}{2}(x+\xi)}\, \psi(\xi)$$

a) $f(p,q) = f(q)$

$$(A_f \psi)(x) = \cancel{\iint_{\mathbb{R}}} \frac{1}{(2\pi)^2\hbar} \iint_{\mathbb{R}^2} d\xi\, dv \iint_{\mathbb{R}^2} dp\, dq\, f(q)\, e^{ivq}\, e^{ip\frac{x-\xi}{\hbar}}\, e^{-\frac{iv}{2}(x+\xi)}\, \psi(\xi)$$

Integration über p, $\frac{1}{2\pi}\int dp\, e^{ipy} = \delta(y)$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \iint_{\mathbb{R}^2} d\xi\, dv \int_{\mathbb{R}} dq\, f(q)\, e^{ivq}\, e^{-\frac{iv}{2}(x+\xi)}\, \psi(\xi)\, \delta\left(\frac{x-\xi}{\hbar}\right)$$

Integration über ξ $\quad \int d\xi\, g(\xi)\, \delta\left(\frac{x-\xi}{\hbar}\right) = \hbar \int du\, g(x - \hbar u)\, \delta(u) = \hbar\, g(x)$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} dv \int_{\mathbb{R}} dq\, f(q)\, e^{ivq}\, e^{-ivx}\, \psi(x)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} dv\, e^{-ivx} \left(\int_{\mathbb{R}} dq\, f(q)\, e^{ivq} \right) \psi(x) = f(x)\, \psi(x)$$

b) $f(p,q) = f(p)$

$$(A_f\psi)(x) = \frac{1}{(2\pi)^2 h} \iint_{\mathbb{R}^2} d\xi\, dv \iint_{\mathbb{R}^2} dp\, dq\, f(p)\, e^{ivq} e^{ip\frac{x-\xi}{h}} e^{-\frac{iv}{2}(x+\xi)} \psi(\xi)$$

Integration über q

$$= \frac{1}{2\pi h} \iint_{\mathbb{R}^2} d\xi\, dv \int_{\mathbb{R}} dp\, f(p)\, \delta(v)\, e^{ip\frac{x-\xi}{h}} e^{-\frac{iv}{2}(x+\xi)} \psi(\xi)$$

Integration über v

$$= \frac{1}{2\pi h} \iint_{\mathbb{R}^2} d\xi\, dp\; f(p)\, e^{ip\frac{x-\xi}{h}} \psi(\xi)$$

$$= \frac{1}{2\pi h} \int dp\, f(p)\, e^{\frac{ipx}{h}} \int d\xi\, \psi(\xi)\, e^{-\frac{ip\xi}{h}}$$

$$= f\left(\frac{h}{i}\frac{d}{dx}\right) \frac{1}{2\pi h} \int dp\, e^{\frac{ipx}{h}} \int d\xi\, \psi(\xi)\, e^{-\frac{ip\xi}{h}}$$

$$= f\left(\frac{h}{i}\frac{d}{dx}\right) \psi(x)$$

c) $f(p,q) = pq$

$$A_f\psi(x) = \frac{1}{(2\pi)^2 h} \iint_{\mathbb{R}^2} d\xi\, dv \iint_{\mathbb{R}^2} dp\, dq\; pq\, e^{ivq} e^{ip\frac{x-\xi}{h}} e^{-\frac{iv}{2}(x+\xi)} \psi(\xi)$$

Integration über q

$$= \frac{1}{2\pi i h} \iint_{\mathbb{R}^2} d\xi\, dv \int_{\mathbb{R}} dp\; p\, \delta'(v)\, e^{ip\frac{x-\xi}{h}} e^{-\frac{iv}{2}(x+\xi)} \psi(\xi)$$

Integration über v

$$= \frac{1}{2\pi i h} \iint_{\mathbb{R}^2} d\xi\, p\, dp\; e^{ip\frac{x-\xi}{h}} \cdot \frac{i}{2}(x+\xi)\, \psi(\xi)$$

$$= \frac{1}{2\pi h} \left[\frac{1}{2} x \int_{\mathbb{R}} p\, dp\, e^{\frac{ipx}{h}} \int d\xi\, e^{-\frac{ip\xi}{h}} \psi(\xi) + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} p\, dp\, e^{\frac{ipx}{h}} \int d\xi\, e^{-\frac{ip\xi}{h}} \xi\psi(\xi) \right]$$

$$= \frac{1}{2} x (P\psi)(x) + \frac{1}{2} P(x\psi(x))$$

Beispiel (Anwendung). Betrachten wir einen reinen Quantenzustand (in der Koordinatendarstellung) mit dem Vektor (Wellenfunktion) ψ. Es sei $P_\psi \leftrightarrow \rho_1(p,q)$, $\rho(p,q) := \frac{\rho_1(p,q)}{2\pi h}$. Aus

$$V(-v)\,U(-u)\,P_\psi\,\xi(x) = e^{ivx}\int \xi(y)\overline{\psi(y)}\,dy\;\psi(x+uh)$$

finden wir den Kern des Operators $V(-v)\,U(-u)P_\psi$:

$$e^{ivx}\,\psi(x+uh)\,\overline{\psi(y)},$$

und

$$\hat\rho(u,v) = \frac{1}{2\pi h}\,h\,\mathrm{tr}\,V(-v)\,U(-u)\,P_\psi\,e^{\frac{ih}{2}uv}$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int e^{ivx}\psi(x+uh)\overline{\psi(x)}\,e^{\frac{ihuv}{2}}dx$$

Existiert der Grenzwert

$$F(x,u) = \frac{1}{2\pi}\lim_{h\to 0}\psi(x+uh)\overline{\psi}(x),$$

so ist

$$\hat\rho(u,v) = \int e^{ivx}F(x,u)\,dx$$

die FT der klassischen Verteilungsfunktion, die als $h\to 0$ Limes des Zustandes P_ψ zu betrachten wäre:

$$\rho(p,q) = \int e^{-ipu}F(q,u)\,du$$

a) Ist ψ von h unabhängig, so $F(x,u) = \frac{1}{2\pi}|\psi(x)|^2$,

$$\rho(p,q) = |\psi(q)|^2\,\delta(p)$$ –

das ist der Zustand eines Teilchens mit $p=0$ und mit der q-Dichte $|\psi(q)|^2$ – kein reiner klassischer Zustand!!

b) Analog, ist $\psi(x) = \varphi(x)\,e^{\frac{ip_0x}{h}}$, so bekommt man

$$\rho(p,q) = |\varphi(q)|^2\,\delta(p-p_0)\quad \text{usw.}$$