Quantenmechanik

Jochen Merker

1. September 2005

Einleitung

- Vom Standpunkt der Hamiltonschen Mechanik aus gesehen ist Quantenmechanik nur ein Spezialfall der klassischen Mechanik, nämlich der, bei dem neben der symplektischen Form noch eine komplexe Struktur erhalten wird. Dies deutlich zu machen ist das Hauptziel meines Vortrages.

Einleitung

- Vom Standpunkt der Hamiltonschen Mechanik aus gesehen ist Quantenmechanik nur ein Spezialfall der klassischen Mechanik, nämlich der, bei dem neben der symplektischen Form noch eine komplexe Struktur erhalten wird. Dies deutlich zu machen ist das Hauptziel meines Vortrages.
- Beginnen wollen wir aber mit der üblichen axiomatischen Formulierung der Quantenmechanik auf Hilberträumen.

Axiom 0 - Zustände

Der Zustandsraum eines quantenmechanischen Systems wird durch Strahlen in einem komplexen Hilbertraum $\mathfrak{H}$ modelliert.

Axiom 0 - Zustände

Der Zustandsraum eines quantenmechanischen Systems wird durch Strahlen in einem komplexen Hilbertraum $\mathfrak{H}$ modelliert.

- Ein komplexer Hilbertraum $\mathfrak{H}$ ist ein Vektorraum über $\mathbb{C}$, der mit einem Skalarprodukt $< \cdot, \cdot >$ ($\mathbb{C}$-linear in der ersten, $\mathbb{C}$-antilinear in der zweiten Komponente) versehen und bzgl. der vom Skalarprodukt induzierten Norm $\| \cdot \| := \sqrt{< \cdot, \cdot >}$ vollständig ist.

Axiom 0 - Zustände

Der Zustandsraum eines quantenmechanischen Systems wird durch Strahlen in einem komplexen Hilbertraum $\mathfrak{H}$ modelliert.

- Ein komplexer Hilbertraum $\mathfrak{H}$ ist ein Vektorraum über $\mathbb{C}$, der mit einem Skalarprodukt $< \cdot, \cdot >$ ($\mathbb{C}$-linear in der ersten, $\mathbb{C}$-antilinear in der zweiten Komponente) versehen und bzgl. der vom Skalarprodukt induzierten Norm $\| \cdot \| := \sqrt{< \cdot, \cdot >}$ vollständig ist.
- Ein Strahl in einem Hilbertraum ist ein 1-dimensionaler Untervektorraum $\mathbb{C}x$, $x \neq 0$.

Symplektische Struktur auf komplexen Hilberträumen

Jeder komplexe Hilbertraum ist ein symplektischer Vektorraum durch $\omega(x, y) := -2\Im(< x, y >)$.

Symplektische Struktur auf komplexen Hilberträumen

Jeder komplexe Hilbertraum ist ein symplektischer Vektorraum durch $\omega(x, y) := -2\Im(< x, y >)$.

- antisymmetrisch: $\omega(x, x) = -2\Im(< x, x >) = 0$,

Symplektische Struktur auf komplexen Hilberträumen

Jeder komplexe Hilbertraum ist ein symplektischer Vektorraum durch $\omega(x, y) := -2\Im(< x, y >)$.

- antisymmetrisch: $\omega(x, x) = -2\Im(< x, x >) = 0$,
- nichtdegeneriert: $\omega(x, y) = 0$ für alle y impliziert $0 = \Im(< x, -ix >) = \|x\|^2$ und daher $x = 0$.

Symplektische Struktur auf komplexen Hilberträumen

Jeder komplexe Hilbertraum ist ein symplektischer Vektorraum durch $\omega(x, y) := -2\Im(< x, y >)$.

- antisymmetrisch: $\omega(x, x) = -2\Im(< x, x >) = 0$,
- nichtdegeneriert: $\omega(x, y) = 0$ für alle y impliziert $0 = \Im(< x, -ix >) = \|x\|^2$ und daher $x = 0$.
- ω ist stark nichdegeneriert, wenn $< \cdot, \cdot >$ stark nichtdegeneriert ist.

Symplektische Struktur auf komplexen Hilberträumen

Jeder komplexe Hilbertraum ist ein symplektischer Vektorraum durch $\omega(x,y) := -2\Im(< x,y >)$.

- antisymmetrisch: $\omega(x,x) = -2\Im(< x,x >) = 0$,
- nichtdegeneriert: $\omega(x,y) = 0$ für alle y impliziert $0 = \Im(< x, -ix >) = \|x\|^2$ und daher $x = 0$.
- ω ist stark nichdegeneriert, wenn $< \cdot, \cdot >$ stark nichtdegeneriert ist.
- Aus ω und i kann man das Skalarprodukt wiedergewinnen: $2 < x,y >= \omega(x,iy) - i\omega(x,y)$

Axiom 0 - Observable

Die Observablen eines quantenmechanischen Systems werden durch selbst-adjungierte Operatoren A auf $\mathfrak{H}$ modelliert.

Axiom 0 - Observable

Die Observablen eines quantenmechanischen Systems werden durch selbst-adjungierte Operatoren A auf $\mathfrak{H}$ modelliert.

- Ein selbst-adjungierter Operator A ist eine dicht-definierte abgeschlossene Abbildung $A : D(A) \subset \mathfrak{H} \to \mathfrak{H}$, die $A = A^*$ erfüllt.

Axiom 0 - Observable

Die Observablen eines quantenmechanischen Systems werden durch selbst-adjungierte Operatoren A auf $\mathfrak{H}$ modelliert.

- Ein selbst-adjungierter Operator A ist eine dicht-definierte abgeschlossene Abbildung $A : D(A) \subset \mathfrak{H} \to \mathfrak{H}$, die $A = A^*$ erfüllt.
- A heißt abgeschlossen, wenn $\mathrm{graph}(A) \subset \mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$ abgeschlossen ist.

Axiom 0 - Observable

Die Observablen eines quantenmechanischen Systems werden durch selbst-adjungierte Operatoren A auf $\mathfrak{H}$ modelliert.

- Ein selbst-adjungierter Operator A ist eine dicht-definierte abgeschlossene Abbildung $A : D(A) \subset \mathfrak{H} \to \mathfrak{H}$, die $A = A^*$ erfüllt.
- A heißt abgeschlossen, wenn $\operatorname{graph}(A) \subset \mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$ abgeschlossen ist.
- A^* ist durch $< Ax, y >=< x, A^*y >$ definiert.

Observablen in klassischen mechanischen Systemen

Die Observablen eines klassischen mechanischen Systems mit Zustandsraum M werden durch die (Hamilton-)Funktionen $F \in C^\infty(M, \mathbb{R})$ modelliert, und mit der Poisson-Klammer formen die Observablen eine Lie-Algebra.

Observablen in klassischen mechanischen Systemen

Die Observablen eines klassischen mechanischen Systems mit Zustandsraum M werden durch die (Hamilton-)Funktionen $F \in C^\infty(M, \mathbb{R})$ modelliert, und mit der Poisson-Klammer formen die Observablen eine Lie-Algebra.

- Beispiel: Auf dem durch die Poisson-Mannigfaltigkeit $(\mathbb{R}^3, \times)$ als Zustandsraum modellierten starren Körper ist die Funktion $F(x, y, z) := \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2)$ eine Observable, die Drehimpuls genannt und sogar von jedem Hamiltonschen Fluß erhalten wird (Casimir-Funktion), aber auch jede andere C^∞-Funktion ist eine Observable.

Observablen in klassischen mechanischen Systemen

Die Observablen eines klassischen mechanischen Systems mit Zustandsraum M werden durch die (Hamilton-)Funktionen $F \in C^\infty(M, \mathbb{R})$ modelliert, und mit der Poisson-Klammer formen die Observablen eine Lie-Algebra.

- Beispiel: Auf dem durch die Poisson-Mannigfaltigkeit $(\mathbb{R}^3, \times)$ als Zustandsraum modellierten starren Körper ist die Funktion $F(x, y, z) := \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2)$ eine Observable, die Drehimpuls genannt und sogar von jedem Hamiltonschen Fluß erhalten wird (Casimir-Funktion), aber auch jede andere C^∞-Funktion ist eine Observable.
- Jede quantenmechanische Observable A auf $\mathfrak{H}$ ist durch Identifikation mit $E_A(x) :=< Ax, x >$ eine klassische Observable, aber es gibt viel mehr klassische als quantenmechanische Observable.

Axiom E - Evolution

Die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Systems wird durch einen stark stetigen unitären Fluss $U(t)$ auf $\mathfrak{H}$ modelliert.

Axiom E - Evolution

Die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Systems wird durch einen stark stetigen unitären Fluss $U(t)$ auf $\mathfrak{H}$ modelliert.

- Eine Abbildung $U : \mathfrak{H} \to \mathfrak{H}$ heißt unitär, wenn $< Ux, Uy >=< x, y >$ für alle x, y gilt.

Axiom E - Evolution

Die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Systems wird durch einen stark stetigen unitären Fluss $U(t)$ auf $\mathfrak{H}$ modelliert.

- Eine Abbildung $U : \mathfrak{H} \to \mathfrak{H}$ heißt unitär, wenn $< Ux, Uy >=< x, y >$ für alle x, y gilt.
- $U(t)$ heißt Fluß, wenn $U(t+s) = U(t) \circ U(s)$ gilt.

Axiom E - Evolution

Die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Systems wird durch einen stark stetigen unitären Fluss $U(t)$ auf $\mathfrak{H}$ modelliert.

- Eine Abbildung $U : \mathfrak{H} \to \mathfrak{H}$ heißt unitär, wenn $< Ux, Uy >=< x, y >$ für alle x, y gilt.
- $U(t)$ heißt Fluß, wenn $U(t+s) = U(t) \circ U(s)$ gilt.
- $U(t)$ heißt stark stetig, wenn $\lim_{t\to 0} U(t)x = x$ für alle x gilt.

Theorem

Satz von Stone: Jeder stark stetige unitäre Fluss $U(t)$ wird von einem selbstadjungierten Operator A durch die Differentialgleichung $\dot{x} = iAx$ generiert, d.h. $U(t)$ ist der Fluß zu solch einer gewöhnlichen Differentialgleichung (auf $\mathfrak{H}$).

Theorem

Satz von Stone: Jeder stark stetige unitäre Fluss $U(t)$ wird von einem selbstadjungierten Operator A durch die Differentialgleichung $\dot{x} = iAx$ generiert, d.h. $U(t)$ ist der Fluß zu solch einer gewöhnlichen Differentialgleichung (auf $\mathfrak{H}$).

Bemerkung

Ist $E_A(x) := < Ax, x >$, so gilt $\omega(Ax, y) = dE_A(x)y$, denn

$$dE_A(x)y = < Ax, y > + < Ay, x > = < Ax, y > + < y, Ax > = \\ < Ax, y > + \overline{< Ax, y >} = 2\Re(< Ax, y >) = -2\Im(< iAx, y >) \quad .$$

Insbesondere ist iA das Hamiltonsche Vektorfeld zu E_A.

Example

- Auf $L^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{C})$ ist der Laplace-Operator Δ (essentiell) selbstadjungiert wegen $\int_{\mathbb{R}^n} (\Delta\phi)\overline{\psi} = \int_{R^n} \phi\overline{(\Delta\psi)}$.

Example

- Auf $L^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{C})$ ist der Laplace-Operator Δ (essentiell) selbstadjungiert wegen $\int_{\mathbb{R}^n} (\Delta\phi)\overline{\psi} = \int_{R^n} \phi\overline{(\Delta\psi)}$.
- Die Hamilton-Funktion E_Δ generiert die Schrödinger-Gleichung $\dot{\phi} = i\Delta\phi$.

Example

- Auf $L^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{C})$ ist der Laplace-Operator Δ (essentiell) selbstadjungiert wegen $\int_{\mathbb{R}^n} (\Delta\phi)\overline{\psi} = \int_{R^n} \phi\overline{(\Delta\psi)}$.
- Die Hamilton-Funktion E_Δ generiert die Schrödinger-Gleichung $\dot{\phi} = i\Delta\phi$.
- Unter gewissen Voraussetzungen an $V : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ ist auch $\phi \mapsto \Delta\phi + V\phi$ (essentiell) selbstadjungiert und generiert die Schrödinger-Gleichung $-i\dot{\phi} = \Delta\phi + V\phi$ mit Potential V.

Example

- Auf $L^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{C})$ ist der Laplace-Operator Δ (essentiell) selbstadjungiert wegen $\int_{\mathbb{R}^n} (\Delta\phi)\overline{\psi} = \int_{R^n} \phi\overline{(\Delta\psi)}$.
- Die Hamilton-Funktion E_Δ generiert die Schrödinger-Gleichung $\dot{\phi} = i\Delta\phi$.
- Unter gewissen Voraussetzungen an $V : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ ist auch $\phi \mapsto \Delta\phi + V\phi$ (essentiell) selbstadjungiert und generiert die Schrödinger-Gleichung $-i\dot{\phi} = \Delta\phi + V\phi$ mit Potential V.
- Also: Die Schrödinger-Gleichung ist Hamiltonsch.

Klassische Messung

Nach klassischer Interpretation ergibt sich für klassische Observable F immer der Wert $F(x)$, wenn das System im Zustand x ist.

Theorem

Spektralzerlegung:¡2-¿ Zu jedem selbstadjungierten Operator A gibt es genau eine projektionswertiges Wahrscheinlichkeitsmaß $\mu_A : \sigma(\mathbb{R}) \to P(\mathfrak{H})$ von der Borel-σ-Algebra $\sigma(\mathbb{R})$ auf $\mathbb{R}$ in die Menge $P(\mathfrak{H})$ der Projektionen auf $\mathfrak{H}$ mit $< Ax, y >= \int_{\mathbb{R}} \lambda d < \mu_A(\lambda)x, y >$ für alle x, y.

Axiom M - Messungen

Sei $A = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_A(\lambda)$ die Spektralzerlegung des selbstadjungierten Operators A und befindet sich das System im Zustand x (mit $\|x\| = 1$), dann ergibt sich mit beim Messen der von A modellierten Observable mit Wahrscheinlichkeit $< \mu_A(B)x, x >$ ein Wert in der Borel-Menge $B \subset \mathbb{R}$.

Achtung

Bisher haben wir so getan, als sei $\mathfrak{H}$ der Zustandsraum, in Wirklichkeit ist aber der projektive Raum $\mathcal{P}(\mathfrak{H})$ der Zustandsraum eines quantenmechanischen Systems. Dieser ist eine (unendlichdimensionale) Mannigfaltigkeit, und das Skalarprodukt von $\mathfrak{H}$ macht $\mathcal{P}(\mathfrak{H})$ zu einer Kähler-Mannigfaltigkeit.

Kähler-Mannigfaltigkeiten

Eine fast-Kähler-Mannigfaltigkeit ist eine symplektische Mannigfaltigkeit (M, ω) mit einer kompatiblen komplexen Struktur J.

Kähler-Mannigfaltigkeiten

Eine fast-Kähler-Mannigfaltigkeit ist eine symplektische Mannigfaltigkeit (M, ω) mit einer kompatiblen komplexen Struktur J.

- Eine komplexe Struktur $J : TM \to TM$ ist ein Vektorbündelhomomorphismus über Id_M mit $J^2 = -\mathrm{Id}$.

Kähler-Mannigfaltigkeiten

Eine fast-Kähler-Mannigfaltigkeit ist eine symplektische Mannigfaltigkeit (M, ω) mit einer kompatiblen komplexen Struktur J.

- Eine komplexe Struktur $J : TM \to TM$ ist ein Vektorbündelhomomorphismus über Id_M mit $J^2 = -\mathrm{Id}$.
- Jede komplexe Struktur ist wegen $J^{-1} = -J$ ein Isomorphismus.

Kähler-Mannigfaltigkeiten

Eine fast-Kähler-Mannigfaltigkeit ist eine symplektische Mannigfaltigkeit (M, ω) mit einer kompatiblen komplexen Struktur J.

- Eine komplexe Struktur $J : TM \to TM$ ist ein Vektorbündelhomomorphismus über Id_M mit $J^2 = -\mathrm{Id}$.
- Jede komplexe Struktur ist wegen $J^{-1} = -J$ ein Isomorphismus.
- J heißt kompatibel, wenn $\omega(Jx, Jy) = \omega(x, y)$ gilt.

Kähler-Mannigfaltigkeiten

Eine fast-Kähler-Mannigfaltigkeit ist eine symplektische Mannigfaltigkeit (M, ω) mit einer kompatiblen komplexen Struktur J.

- Eine komplexe Struktur $J : TM \to TM$ ist ein Vektorbündelhomomorphismus über Id_M mit $J^2 = -\,\mathrm{Id}$.
- Jede komplexe Struktur ist wegen $J^{-1} = -J$ ein Isomorphismus.
- J heißt kompatibel, wenn $\omega(Jx, Jy) = \omega(x, y)$ gilt.
- Jede stark nichtdegnerierte symplektische Mannigfaltigkeit kann (auf verschiedene Arten) zu einer fast-Kähler-Mannigfaltigkeit gemacht werden.

Kähler-Mannigfaltigkeiten

Eine fast-Kähler-Mannigfaltigkeit ist eine symplektische Mannigfaltigkeit (M, ω) mit einer kompatiblen komplexen Struktur J.

- Eine komplexe Struktur $J : TM \to TM$ ist ein Vektorbündelhomomorphismus über Id_M mit $J^2 = -\mathrm{Id}$.
- Jede komplexe Struktur ist wegen $J^{-1} = -J$ ein Isomorphismus.
- J heißt kompatibel, wenn $\omega(Jx, Jy) = \omega(x, y)$ gilt.
- Jede stark nichtdegnerierte symplektische Mannigfaltigkeit kann (auf verschiedene Arten) zu einer fast-Kähler-Mannigfaltigkeit gemacht werden.
- M heißt Kähler-Mannigfaltigkeit, wenn die Torsion (=der Nijenhuis-Tensor $N(J, J)$) von J verschwindet.

Hermitsche Struktur

Für eine Kähler-Mannigfaltigkeit (M, ω, J) ist

- jedes $T_m M$ mit $(a + ib)x := ax + bJx$ ein komplexer Vektorraum,

Hermitsche Struktur

Für eine Kähler-Mannigfaltigkeit (M, ω, J) ist

- jedes $T_m M$ mit $(a + ib)x := ax + bJx$ ein komplexer Vektorraum,
- $g(x, y) := \omega(x, Jy)$ eine Riemannsche Metrik wegen $g(x, y) = \omega(x, Jy) = -\omega(Jx, y) = \omega(y, Jx) = g(x, y)$, und da aus $g(x, y) = 0$ für alle y auch $\omega(x, Jy) = 0$ für alle y, also $x = 0$ folgt.

Hermitsche Struktur

Für eine Kähler-Mannigfaltigkeit (M, ω, J) ist

- jedes $T_m M$ mit $(a + ib)x := ax + bJx$ ein komplexer Vektorraum,
- $g(x, y) := \omega(x, Jy)$ eine Riemannsche Metrik wegen $g(x, y) = \omega(x, Jy) = -\omega(Jx, y) = \omega(y, Jx) = g(x, y)$, und da aus $g(x, y) = 0$ für alle y auch $\omega(x, Jy) = 0$ für alle y, also $x = 0$ folgt.
- $\sigma(x, y) := \omega(x, Jy) - i\omega(x, y)$ eine hermitsche Metrik.

Unitäre Flüsse

- Ein Vektorfeld X heißt Killing-Vektorfeld, wenn $L_X g = 0$ gilt, d.h. sich die Riemannsche Metrik unter dem Fluß zu X nicht in der Zeit ändert.

Unitäre Flüsse

- Ein Vektorfeld X heißt Killing-Vektorfeld, wenn $L_X g = 0$ gilt, d.h. sich die Riemannsche Metrik unter dem Fluß zu X nicht in der Zeit ändert.
- Ein Vektorfeld heißt holomorph, wenn $L_X J = 0$ gilt, d.h. sich J (aufgefasst als TM-wertige 1-Form) unter dem Fluß zu X nicht in der Zeit ändert.

Unitäre Flüsse

- Ein Vektorfeld X heißt Killing-Vektorfeld, wenn $L_X g = 0$ gilt, d.h. sich die Riemannsche Metrik unter dem Fluß zu X nicht in der Zeit ändert.
- Ein Vektorfeld heißt holomorph, wenn $L_X J = 0$ gilt, d.h. sich J (aufgefasst als TM-wertige 1-Form) unter dem Fluß zu X nicht in der Zeit ändert.
- X Hamiltonsch und Killing $\Leftrightarrow$ X Hamiltonsch und holomorph $\Leftrightarrow$ X Killing und holomorph

Unitäre Flüsse

- Ein Vektorfeld X heißt Killing-Vektorfeld, wenn $L_X g = 0$ gilt, d.h. sich die Riemannsche Metrik unter dem Fluß zu X nicht in der Zeit ändert.
- Ein Vektorfeld heißt holomorph, wenn $L_X J = 0$ gilt, d.h. sich J (aufgefasst als TM-wertige 1-Form) unter dem Fluß zu X nicht in der Zeit ändert.
- X Hamiltonsch und Killing $\Leftrightarrow$ X Hamiltonsch und holomorph $\Leftrightarrow$ X Killing und holomorph
- Der Fluß zu solch einem Vektorfeld besteht also aus Abbildungen, die die gesamte Struktur der Kähler-Mannigfaltigkeit invariant lassen, sogenannten unitären Abbildungen.

Axiome der Quantenmechanik

- Der Zustandsraum eines quantenmechanischen System wird durch eine fast-Kähler-Mannigfaltigkeit modelliert und die Energie durch eine Hamilton-Funktion, die einen unitären Fluß erzeugt.

Axiome der Quantenmechanik

- Der Zustandsraum eines quantenmechanischen System wird durch eine fast-Kähler-Mannigfaltigkeit modelliert und die Energie durch eine Hamilton-Funktion, die einen unitären Fluß erzeugt.
- Observabel sind nur solche Hamilton-Funktionen, die Killing- oder holomorphe Vektorfelder generieren.

Axiome der Quantenmechanik

- Der Zustandsraum eines quantenmechanischen System wird durch eine fast-Kähler-Mannigfaltigkeit modelliert und die Energie durch eine Hamilton-Funktion, die einen unitären Fluß erzeugt.
- Observabel sind nur solche Hamilton-Funktionen, die Killing- oder holomorphe Vektorfelder generieren.
- Der Wert einer solchen Observablen beim Zustand m ist nur der Erwartungswert, für genauere Aussagen benötigt man die Spektralzerlegung von Hamilton-Funktionen bzgl. total-geodätischer Untermannigfaltigkeiten.

Example

Die Kähler-Struktur von $\mathcal{P}(\mathfrak{H})$:

- Die Projektion $\pi : \mathfrak{H} \setminus \{0\} \to \mathcal{P}(H)$, $x \mapsto \mathbb{C}x$ ist eine Submersion, denn $T_x\pi$ ist ein Isomorphismus von $\mathbb{C}x^\perp$ auf $T_{\pi(x)}\mathcal{P}(H)$.

Example

Die Kähler-Struktur von $\mathcal{P}(\mathfrak{H})$:

- Die Projektion $\pi : \mathfrak{H} \setminus \{0\} \to \mathcal{P}(H)$, $x \mapsto \mathbb{C}x$ ist eine Submersion, denn $T_x\pi$ ist ein Isomorphismus von $\mathbb{C}x^\perp$ auf $T_{\pi(x)}\mathcal{P}(H)$.
- Definiere

$$\sigma(T_{\pi(x)}\pi(X), T_{\pi(x)}\pi(Y)) := 2 < X, Y >$$

für $\|x\| = 1$ and $X, Y \in (\mathbb{C}x)^\perp \subset T_x\mathfrak{H}$, bzw.

$$\sigma(T_{\pi(x)}\pi(X), T_{\pi(x)}\pi(Y)) = \frac{2}{\|x\|^2}(< X, Y > - \frac{1}{\|x\|^2} < X, x >< x, Y >)$$

für $x \neq 0$ und $X, Y \in T_x\mathfrak{H}$.