Statistische Mechanik und kinetische Gleichungen auf quantenmechanischer Grundlage

R. Wegener

Vorlesung SS 1995, Uni Kaiserslautern

Inhaltsverzeichnis

1 Quantenmechanische Grundlagen 6

1.1 Vorbemerkungen 6

1.2 Axiome der Quantenmechanik 7

1.3 Vergleich mit der klassischen Mechanik 11

1.4 Streuungsfreiheit, Irreduzibilität, Zustände 14

1.5 Bemerkungen zur Zeitentwicklung 18

1.5.1 Von Neumann–Gleichung 18

1.5.2 Schrödingergleichung für die Zustände 19

1.5.3 Bilder in der Quantenmechanik 20

1.6 Bemerkungen zur Darstellungstheorie 21

1.6.1 Der allgemeine Fall 21

1.6.2 Beispiel: Operator mit diskretem Spektrum 23

1.6.3 Ortsdarstellung und Impulsdarstellung 25

1.7 Gleichzeitige Meßbarkeit, Unschärferelation 27

1.7.1 Sofortwiederholung einer Messung 27

1.7.2 Gleichzeitige Meßbarkeit 28

1.7.3 Heisenbergsche Unschärferelation 33

1.7.4 Präparation 34
1.8 Beispiel: Harmonischer Oszillator 36
1.8.1 Vorüberlegung 36
1.8.2 Eigenwertproblem 37

2 Grundgrößen klassischer kinetischer Theorien 40
2.1 Vorbemerkungen 40
2.2 Mikroskopische Boltzmanndichten 42
2.3 Mollifying und Coarse graining 44
2.4 BBGKY–Hierarchie 46
2.5 Boltzmann– und reduzierte Wahrscheinlichkeitsdichten 49

3 Wignertransformation 51
3.1 Vorbemerkungen 51
3.2 Weyltransformation 51
3.3 Wignertransformation 57
3.4 Korrespondenzprinzip 60
3.5 Wignerfunktionen 61

4 Quanten–Liouville–Gleichung 63
4.1 Ableitung der Gleichung 63
4.2 Vergleich mit der klassischen Theorie 67
4.3 Quantenmechanische Hierarchie 69
4.4 Quanten–BBGKY–Hierarchie 71
4.5 Grundlagem kinetischer Theorien 73
4.6 Abschluß der Hierarchie 74
4.7 Ununterscheidbare Teilchen 76

Einleitung

Kinetische Gleichungen auf quantenmechanischer Grundlage spielen z.B. für den Elektronentransport in Halbleitern eine wichtige Rolle. In der Theorie solcher kinetischer Gleichungen nimmt die sogenannte Quanten–Liouville–Gleichung eine zentrale Rolle ein. Sie steht auch im Mittelpunkt dieser Vorlesung.

Beim Versuch kinetische Gleichungen auf der Grundlage der Quantenmechanik zu etablieren, stößt man auf einige grundsätzliche Schwierigkeiten, die ihren tieferen Grund in der Nichtvertauschbarkeit von Orts– und Impulsoperatoren in der Quantenmechanik haben (Heisenbergsche Unschärferelation). Dieser Problemkreis wird in dieser Vorlesung ausführlich diskutiert und die Wignertransformation als Vorschlag zur Lösung des Problems behandelt.

Die notwendigen quantenmechanischen Grundlagen werden im ersten Teil der Vorlesung kompakt aufbereitet. Dabei sollen insbesondere die Gemeinsamkeiten und Unterschiede zur klassischen Mechanik herausgearbeitet werden, um die unterschiedlichen Ausgangspunkte bei der Ableitung kinetischer Gleichungen zu verdeutlichen. Danach steht die Quanten–Liouville–Gleichung mit dem verbundenen Konzept der Wignertransformation im Mittelpunkt.

Kapitel 1

Quantenmechanische Grundlagen

1.1 Vorbemerkungen

In diesem Überblick werden die Grundlagen der Quantenmechanik dargestellt. Um nicht in einer Vorlesung über Quantenmechanik zu enden, wird auf eine heuristische Begründung der Axiome verzichtet und dazu auf die entsprechenden Lehrbücher [1] – [3] verwiesen. Stattdessen werden die Grundstrukturen der Quantenmechanik durch eine Liste von Axiomen dargestellt, die aber weder Anspruch auf letzte Vollständigkeit noch auf unbedingte formale Strenge erheben.

Gegenstand der Quantenmechanik sind die Messungen an Gesamtheiten mikroskopischer Teilchen (Atome, Elektronen u.a.). Dabei wird hier weder der physikalische Meßbegriff noch der Begriff des mikroskopischen Teilchens kritisch hinterfragt. Die Quantenmechanik ist eine statistische Theorie. Sie macht i.a. keine Aussagen über Messungen an Einzelsystemen, sondern nur Wahrscheinlichkeitsaussagen. Diese sind Aussagen über Messungen im Sinne relativer Häufigkeiten in entsprechenden Gesamtheiten (Ensemble) von Systemen.

Das Verhalten einzelner Systeme eines Ensembles ist nach der Quantenmechanik indeterministisch. Das Verhalten des Ensembles und Aussagen über Mittelwerte von Messungen am Ensemble sind deterministisch. Viele Mißverständnisse in der Diskussion um die Quantenmechanik sind auf Nichtbeachtung dieses Unterschieds zurückzuführen.

In vielen Details bin ich der Darstellung von J. Schröter in seiner Vorlesung über Quantenmechanik an der Uni Paderborn [4] gefolgt. Dort findet man eine ausführliche Darstellung der hier nur kurz angerissenen Probleme. Den mathematischen Hintergrund findet man größtenteils in [5].

1.2 Axiome der Quantenmechanik

Axiom 1 (Gesamtheiten)
Jeder Gesamtheit $\mathcal{G}$, d.h. jeder Klasse von gleich präparierten gleichartigen Systemen, ist zu jeder Zeit t ein statistischer Operator $\rho(t)$ über einem separablen Hilbertraum $\mathcal{H}$ zugeordnet. Statistische Operatoren sind selbstadjungiert, positiv semidefinit und erfüllen die Normierungsbedingung

$$\mathrm{Tr}(\rho) = 1$$

Bemerkung 1.2.1

(i) Ein statistische Operator ρ ist somit Spurklassen–Operator und daher kompakt. Zusammen mit der Selbstadjungiertheit folgt: Es existiert in $\mathcal{H}$ eine ONB $\{\phi_k\}_{k\in\mathbb{N}}$, derart daß gilt

$$\rho = \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k P_{\phi_k} \quad \text{und} \quad \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k = 1$$

Dabei bezeichnet hier und auch nachfolgend P_ψ den Projektor auf $\psi \in \mathcal{H}$, $\|\psi\| = 1$.

(ii) Die speziellen Gesamtheiten $\rho = P_\psi$ bezeichnet man als reine Gesamtheiten und die zugehörigen $\psi \in \mathcal{H}$, $\|\psi\| = 1$ als Zustände. Der mit dieser Bezeichnung verbundene Eindruck einer Beschreibung von Einzelsystemen ist aber falsch. Vielmehr sind die P_ψ nur irreduzible Gesamtheiten (näheres dazu später).

Axiom 2 (Observable)
Jeder Observablen $\mathcal{A}$, d.h. jeder Klasse von gleichartigen Meßapparaten, ist ein selbstadjungierter Operator A über $\mathcal{H}$ zugeordnet. A kann explizit von der Zeit abhängen. Das Spektrum von A ist die Menge der möglichen Meßwerte von $\mathcal{A}$. Jeder Eigenschaft, d.h. einer Observablen mit Meßwerten 0 und 1, entspricht ein

Projektor P.
Dem (kanonischen) Ort und Impuls als Observable eines Systems mit n Freiheitsgraden entsprechen Operatoren Q_j und P_j, $j = 1, \ldots, n$ mit Definitionsbereich dicht in $\mathcal{H}$, die den Vertauschungsrelationen

$$[P_j, Q_k] = \frac{\hbar}{i}\delta_{jk} \qquad [P_j, P_k] = [Q_j, Q_k] = 0$$

mit $j, k = 1, \ldots, n$ genügen.

Bemerkung 1.2.2
Die Gesamtheiten $\mathcal{G}$ und die Observablen $\mathcal{A}$ werden wegen der beiden obigen Axiome nachfolgend unmittelbar mit ihren mathematischen Korrelaten ρ und A identifiziert.

Axiom 3 (Dynamik)
Die Zeitabhängigkeit der statistischen Operatoren wird durch unitäre Operatoren $U(t, t_0)$ beschrieben

$$\rho(t) = U(t, t_0)\, \rho_0\, U(t, t_0)^+$$

Dabei gilt

$$U(t, t_0)^+ = U(t_0, t), \qquad U(t, t) = 1$$

Weiterhin ist U schwach differenzierbar nach beiden Variablen, und es existiert eine Observable, der Hamiltonoperator H (Energie), derart daß die Schrödingergleichung

$$i\hbar\frac{d}{dt}U(t, t_0) = HU(t, t_0)$$

erfüllt ist.

Axiom 4 (Mittelwerte)
In einer Gesamtheit ρ ist der Mittelwert einer beschränkten Observablen A zur Zeit t gegeben durch

$$\bar{A}(t) = \mathrm{M}_t(A) = \mathrm{Tr}(A\rho(t))$$

Sei A unbeschränkt, d.h.

$$A = \int_{\mathbb{R}} \alpha dE_\alpha$$

und sei für m, n

$$A_{mn} = \int_{-m}^{n} \alpha dE_\alpha + n(1 - E_n) - mE_{-m}$$

Dann ist der Mittelwert von A gegeben durch

$$\bar{A}(t) = \mathrm{M}_t(A) = \lim_{m,n\to\infty} \mathrm{Tr}(A_{mn}\rho(t))$$

falls der Limes existiert.

Bemerkung 1.2.3

(i) Bei den Rechnungen und Beispielen begnügen wir uns teilweise mit der Behandlung beschränkter Observabler ohne dies immer ausdrücklich zu erwähnen, eine Verallgemeinerung im obigen Sinne ist aber zumeist leicht möglich. Hilfreich ist bei der Behandlung unbeschränkter Operatoren: Falls $\mathrm{Tr}(|A|\rho)$ existiert, so existiert auch $M(A)$ und es gilt $M(A) = \mathrm{Tr}(A\rho)$.

(ii) Für die oben angegebene Darstellung $\rho = \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k P_{\phi_k}$ erhält man durch Auswertung der Spur in der Basis $\{\phi_k\}_{k\in\mathbb{N}}$

$$\bar{A} = \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k < \phi_k, A\phi_k >$$

Im Fall einer reinen Gesamtheit $\rho = P_\psi$ gilt also

$$\bar{A} =< \psi, A\psi >$$

Axiom 5 (Mischungen)
Beim Mischen von zwei Gesamtheiten ρ_1 und ρ_2 im Verhältnis $\lambda_1 : \lambda_2$ mit $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$ erhält man eine Gesamtheit mit dem statistischen Operator

$$\rho = \lambda_1\rho_1 + \lambda_2\rho_2$$

Bemerkung 1.2.4
In Sinne dieses Axioms kann eine allgemeine Gesamtheit $\rho = \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k P_{\phi_k}$ als Mischung der reinen Gesamtheiten P_{ϕ_k} betrachtet werden.

Axiom 6 (Meßaxiom)
Wird an einer Gesamtheit ρ durch Messung der Eigenschaft P und Auswahl der Systeme mit Meßwert 1 eine Teilgesamtheit präpariert, so ist diese gegeben durch

$$\rho' = \frac{1}{\mathrm{Tr}(P\rho)} P\rho P$$

Die Formulierung des letzten Axioms setzt den Begriff Spin und seine Beschreibung innerhalb der Quantenmechanuk voraus, was den hier gesetzten Rahmen sprengen würde. Insbesondere ist das Axiom über die Observablen um entsprechende Vertauschungsrelationen für die Komponenten des Spins zu erweitern. Wir geben uns mit einer Bemerkung über die daraus resultierende Struktur zufrieden:

Bemerkung 1.2.5
Der Gesamtspin eines 1–Teilchensystems ist – analog zu Masse und Ladung des Teilchens – eine Systemkonstante, genauer

$$S^2 = s(s+1)1$$

wobei s nur positive ganz– und halbzahlige Werte annehmen kann. Teilchen mit ganzzahligem Spin heißen Bosonen, Teilchen mit halbzahligem Spin Fermionen. Elektronen sind Fermionen mit $s = 1/2$. Der Hilbertraum eines 1–Teilchensystems ist das Tensorprodukt zwischen dem sogenannten Bahn– und Spinraum

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_S$$

Dabei hat der Spinraum die endliche Dimension $2s+1$. Die physikalisch relevanten Observablen sind Linearkombinationen von Observablen der Form:

$$A = A_B(P,Q) \otimes A_S$$

Solange man sich auf Observable der obigen Form mit $A_S = 1$ beschränkt, d.h. grob gesprochen keine Spin–Effekte berücksichtigt, kann man sich bei der Behandlung von 1–Teilchensystemen auf den Raum $\mathcal{H}_B$ mit den Bahnobservablen $A_B(P,Q)$ beschränken.

Axiom 7 (Aufbau– und Pauliprinzip)
Der Hilbertraum eines aus N gleichen Teilchen zusammengesetzten Systems ist für Teilchen mit ganzzahligem Spin (Bosonen)

$$\mathcal{H}_N^+ = [\bigotimes^N \mathcal{H}_1]_+$$

und für Teilchen mit halbzahligem Spin (Fermionen)

$$\mathcal{H}_N^- = [\bigotimes^N \mathcal{H}_1]_-$$

Dabei bezeichnet $[\mathcal{H}']_\pm$ den symmetrischen bzw. antisymmetrischen Teilraum von $\mathcal{H}'$

Bei der Zusammensetzung von ungleichen Teilen zu einem Gesamtsystem ist der Hilbertraum das Tensorprodukt der Räume der Teilsysteme.

Die damit formulierten Axiome geben den Rahmen ab, in dem sich Quantenmechanik abspielt. Es ist insoweit nur ein Rahmen, als bei der Behandlung spezieller Gesamtheiten und Messungen noch eine explizite Zuordnung der statistischen und selbstadjungierten Operatoren erfolgen muß. Insbesondere ist zur Festlegung der Dynamik der Hamiltonoperator anzugeben. Dabei spielt das sogenannte Korrespondenzprinzip eine wichtige Rolle. Diese Situation ist aber keinesfalls dramatisch, sondern entspricht der Situation in anderen physikalischen Theorien. Den Rahmen der Elektrodynamik diskutiert man auch ohne spezielle Materialgesetze anzugeben und wie im nächsten Abschnitt deutlich wird, verzichtet man bei der Darstellung der klassischen Mechanik zunächst auch auf die Angabe von Hamiltonfunktionen für spezielle Systeme.

1.3 Vergleich mit der klassischen Mechanik

Klassische Mechanik und Quantenmechanik sind grundsätzlich verschiedene physikalische Theorien: In der klassischen Mechanik können Einzelsysteme deterministisch beschrieben werden, während die Quantenmechanik von Grund auf eine statistische Theorie ist. Um die Theorien trotzdem zu vergleichen, liegt es nahe eine statistische Formulierung der klassischen Mechanik zu betrachten. Aus dem Vergleich der Theorien kann man wegen der Anschaulichkeit der klassischen Mechanik ein gewisses strukturelles Verständnis der Quantenmechanik gewinnen. Die nachfolgenden Axiome bilden außerdem die Grundlage des klassischen Zugangs zu kinetischen Gleichungen.

Zur Beziehung der Theorien sei angemerkt, daß Quantenmechanik in jedem Fall die umfassendere Mikrotheorie ist, für die die klassische Mechanik aber teilweise ein befriedigender Ersatz ist. Ein Beispiel dafür ist die kinetische Gastheorie. Der eigentliche Anwendungsbereich der klassischen Mechanik liegt aber in der Beschreibung der Dynamik makroskopischer Objekte.

Bezeichnungen 1.3.1
N: Anzahl der Teilchen
x: (kanonische) Ortskoordinaten
p: (kanonische) Impulskoordinaten
$w = (x, p) \in \mu$: Punkt des 1–Teilchen–Phasenraums (μ–Raum)
$Z = (w_1, \ldots, w_N) \in \Gamma = \mu^N$: Punkt des N–Teilchen–Phasenraums (Γ–Raum)

Axiom 1 (Gesamtheiten)
Jeder Gesamtheit $\mathcal{G}$ ist zu jeder Zeit t eine Borel–meßbare Funktion $F(\cdot, t)$ über Γ, die sogenannte Wahrscheinlichkeitsdichte zugeordnet. Es gilt $F \geq 0$ und F erfüllt die Normierungsbedingung

$$\int_\Gamma F(Z) dZ = 1$$

Axiom 2 (Observable)
Jeder Observablen $\mathcal{A}$ ist eine Borel–meßbare Funktion a über Γ zugeordnet. Diese kann explizit von der Zeit abhängen.
Den Eigenschaften entsprechen charakteristische Funktionen γ über Γ.

Bemerkung 1.3.2
Die Gesamtheiten $\mathcal{G}$ und die Observablen $\mathcal{A}$ werden wie in der Quantenmechanik unmittelbar mit ihren mathematischen Korrelaten F und a identifiziert.

Axiom 3 (Dynamik)
Die Zeitentwicklung der Gesamtheiten wird durch bijektive Funktionen $\xi(t, t_0, \cdot) : \Gamma \to \Gamma$ beschrieben:

$$F(Z, t) = F(\xi(t_0, t, Z), t_0)$$

Dabei gilt

$$\xi(t, t_0, \cdot)^{-1} = \xi(t_0, t, \cdot), \qquad \xi(t, t, \cdot) = \mathrm{id}_\Gamma$$

Weiterhin existiert eine Observable, die sog. Hamiltonfunktion h (Energie), derart daß die Hamiltonschen Gleichungen

$$\partial_t \alpha_j(t, t_0, Z_0) = (\partial_{p_j} h)(\xi(t, t_0, Z_0))$$

$$\partial_t \beta_j(t, t_0, Z_0) = -(\partial_{q_j} h)(\xi(t, t_0, Z_0))$$

für

$$\xi = (\alpha_1, \beta_1, \ldots, \alpha_N, \beta_N)$$

erfüllt sind.

Bemerkung 1.3.3
Als Lösung der Hamiltonschen Gleichungen ist $\xi(t, t_0, Z_0)$ der Zustand eines Systems, das zur Zeit t_0 den Zustand Z_0 einnimmt. Die Angabe des Zustands bedeutet nach den obigen Bezeichnungen die Angabe aller Lage– und Impulskoordinaten des Systems. Genauer beschreibt α_j die räumliche Bahn des $j$ten Teilchens und β_j die zeitliche Entwicklung des Impulses dieses Teilchens. Selbstverständlich kann an dieser Stelle die Hamiltonsche Formulierung der Mechanik gegen ein Lagrangesche oder Newtonsche Formulierung ausgetauscht werden.

Axiom 4 (Mittelwerte)
In einer Gesamtheit F ist der Mittelwert einer Observablen a zur Zeit t gegeben durch

$$\bar{a}(t) = \mathrm{M}_t(a) = \int_\Gamma a(Z)F(Z,t)dt$$

Axiom 5 (Mischungen)
Beim Mischen von zwei Gesamtheiten F_1 und F_2 im Verhältnis $\lambda_1 : \lambda_2$ mit $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$ erhält man die Gesamtheit

$$F = \lambda_1 F_1 + \lambda_2 F_2$$

Axiom 6 (Meßaxiom)
Wird an einer Gesamtheit F durch Messung der Eigenschaft γ und Auswahl der Systeme mit Meßwert 1 eine Teilgesamtheit präpariert, so ist diese gegeben durch

$$F' = \frac{1}{\int_\Gamma F(Z,\cdot)\gamma(Z)dZ}\, F\,\gamma$$

Axiom 7 (Aufbauprinzip)
Der Phasenraum eines zusammengesetzten Systems ist das kartesische Produkt der Phasenräume der Teilsysteme.

Für die Konsistenz der obigen Axiome ist der Satz von Liouville von großer Bedeutung:

Satz 1.3.4 (Satz von Liouville)
(i) Für alle t, t_0 in $\mathbb{R}$ gilt

$$\det\left(\frac{\partial \xi(t, t_0, Z_0)}{\partial Z_0}\right) = 1$$

(ii) Sei $\Omega_0 \subset \Gamma$ eine Menge mit Lebesguemaß $\lambda(\Omega_0)$. Dann hat für beliebiges $t \in \mathbb{R}$ die Menge $\Omega = \xi(t, t_0, \Omega_0)$ das Lebesguemaß

$$\lambda(\Omega) = \lambda(\Omega_0)$$

Die obige Theorie schließt die klassische Beschreibung von Einzelsystemen ein, wenn man formal auch δ–Distributionen als Verteilungsfunktionen zuläßt. Dies soll nachfolgend geschehen. Präpariert man nämlich zur Zeit t_0 exakt den Zustand Z_0, so entspricht dies zur Zeit t_0 einer Gesamtheit

$$F^{\delta}_{Z_0}(Z, t_0) = \delta(Z - Z_0)$$

Mit dem Dynamikaxiom und dem Satz von Liouville folgt

$$F^{\delta}_{Z_0}(Z, t) = \delta(\xi(t_0, t, Z) - Z_0) = \delta(Z - \xi(t, t_0, Z))$$

Die Singularität kennzeichnet also für alle Zeiten den Zustand eines einzelnen Systems, das sich zur Zeit t_0 im Zustand Z_0 befindet.

Die Statistik ist also aus dieser Formulierung der klassischen Mechanik wieder zu eliminieren. Wie wir noch genauer sehen werden existiert kein analoges Verfahren in der Quantenmechanik, und doch gibt es in anderer Hinsicht ein Analogon zu den Zuständen Z bzw. den Gesamtheiten $F^{\delta}_{Z_0}$. Dieser Punkt soll im nachfolgenden Abschnitt aufgearbeitet werden.

1.4 Streuungsfreiheit, Irreduzibilität, Zustände

Um das Problem der Eliminierbarkeit der Statistik etwas ausführlicher zu diskutieren, führen wir den Begriff der globalen Streuungsfreiheit in die dargestellten statistischen Theorien ein.

Definition 1.4.1 (Streuung)

(i) Die Streuung $\mathrm{Str}(A) \geq 0$ einer Observablen A ist gegeben durch

$$\mathrm{Str}^2(A) = \mathrm{M}((A - \mathrm{M}(A))^2) = \mathrm{M}(A^2) - (\mathrm{M}(A))^2$$

(ii) Eine Gesamtheit heißt streuungsfrei bzgl. A, wenn $\mathrm{Str}(A) = 0$.

(iii) Eine Gesamtheit heißt global streuungsfrei, wenn sie bzgl. aller Observablen streuungsfrei ist und diese Eigenschaft in der zeitlichen Entwicklung beibehält.

Satz 1.4.2 (Globale Streuungsfreiheit)

(i) Die global streuungsfreien Gesamtheiten der klassischen Mechanik sind gegeben durch

$$F^{\delta}_{Z_0}(Z,t) = \delta(Z - \xi(t, t_0, Z_0))$$

(ii) In der Quantenmechanik gibt es zu keiner Zeit eine Gesamtheit, die bzgl. aller Observablen streuungsfrei ist. Damit gibt es auch keine global streuungsfreien Gesamtheiten.

Beweis

(i) elementar

(ii) Sei

$$\rho = \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k P_{\phi_k} \quad \text{und} \quad \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k = 1$$

ein beliebiger statistischer Operator mit zugehöriger ONB $\{\phi_k\}_{k\in\mathbb{N}}$. Es gibt dann mindestens einen Eigenwert größer 0. Außerdem gibt es einen weiteren davon verschiedenen Eigenwert, denn es können nicht alle Eigenwerte gleich sein. Betrachte daher o.B.d.A $0 \leq \omega_1 < \omega_2 \leq 1$. Sei nun

$$\psi(\alpha) = \cos(\alpha)\phi_1 + \sin(\alpha)\phi_2$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} f(\alpha) &= \mathrm{M}(P_{\psi(\alpha)}) = \mathrm{Tr}(P_{\psi(\alpha)}\,\rho) \\ &= <\psi(\alpha), \rho\psi(\alpha)> = \omega_1 \cos^2\alpha + \omega_2 \sin^2\alpha \end{aligned}$$

und $f(\alpha)$ nimmt daher alle Werte in $[\omega_1, \omega_2]$ an. Weiterhin gilt

$$\begin{aligned} \mathrm{Str}^2(P_{\psi(\alpha)}) &= \mathrm{M}(P^2_{\psi(\alpha)}) - (\mathrm{M}(P_{\psi(\alpha)}))^2 \\ &= \mathrm{M}(P_{\psi(\alpha)}) - (\mathrm{M}(P_{\psi(\alpha)}))^2 = f(\alpha)(1 - f(\alpha)) \end{aligned}$$

Daher kann die Streuung nicht für alle $P_{\psi(\alpha)}$ verschwinden.

■

Als Resultat dieser Überlegungen bleibt festzuhalten: In der klassischen Mechanik (in statistischer Formulierung) existieren global streuungsfreie Gesamtheiten $F^{\delta}_{Z_0}$. In der Quantenmechanik gibt es solche Gesamtheiten nicht. Globale Streuungsfreiheit bedeutet aber gerade, daß alle Systeme eines Ensembles identische Meßresultate bei beliebigen Messungen aufweisen, und daher die Gesamtheit jedes einzelne System des Ensembles repräsentiert. Nur in diesem Fall kann die Statistik aus der Theorie eliminiert werden. In der Quantenmechanik ist dies also nicht möglich!

Die speziellen Gesamtheiten $F^{\delta}_{Z_0}$ können aber durch eine weitere Eigenschaft gekennzeichnet werden, um auf diesem Wege ein Analogon in der Quantenmechanik zu konstruieren. Dazu dient die folgende Definition.

Definition 1.4.3 (Irreduzibilität)
Eine Gesamtheit bzw. ihre Erwartungswertfunktion M heißt irreduzibel, wenn aus der Gleichung

$$\mathrm{M} = \lambda \mathrm{M}_1 + (1-\lambda)\mathrm{M}_2$$

für $\lambda \in (0,1)$ mit zwei Erwartungswertfunktionen M_1 und M_2 folgt:

$$\mathrm{M}_1 = \mathrm{M}_2$$

Satz 1.4.4 (Irreduzible Gesamtheiten)

(i) Die irreduziblen Gesamtheiten der klassischen Mechanik sind genau die streuungsfreien Gesamtheiten $F^{\delta}_{Z_0}$.

(ii) Die irreduziblen Gesamtheiten der Quantenmechanik sind genau die reinen Gesamtheiten P_ψ.

Beweis

(i) elementar

(ii) Statistische Operatoren $\rho = \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k P_{\phi_k}$ sind offenbar reduzibel falls zwei oder mehr der ω_k ungleich 0 sind. Damit verbleibt zu zeigen, daß die reinen Gesamtheiten P_ψ irreduzibel sind. Dazu betrachten wir eine Zerlegung von P_ψ in statistische Operatoren ρ_1 und ρ_2

$$P_\psi = \lambda\rho_1 + (1-\lambda)\rho_2 \quad \text{mit} \quad \lambda \in (0,1)$$

Dann ist für $\phi \perp \psi$

$$< \phi, P_\psi \phi >= 0 = \lambda < \phi, \rho_1 \phi > +(1-\lambda) < \phi, \rho_2 \phi >$$

Da die ρ_j positiv semidefinit und λ positiv ist, folgt $< \phi, \rho_j \phi >= \|\sqrt{\rho_j}\phi\| = 0$. Damit ist $\sqrt{\rho_j}\phi = 0$ und somit gilt auch

$$\rho_j \phi = 0 \quad \text{für alle} \quad \phi \perp \psi$$

Weiterhin ist $< \phi, \rho_j \psi >=< \rho_j \phi, \psi >= 0$ für alle $\phi \perp \psi$ und daher

$$\rho_j \psi = \alpha_j \psi$$

wobei $\alpha_j \in \mathbb{R}$, da ρ_j selbstadjungiert ist.

Sei nun $f \in \mathcal{H}$ beliebig, so existiert ein $\phi \perp \psi$, so daß $f = P_\psi f + \phi$. Daraus folgt

$$\rho_j f = \rho_j P_\psi f + \rho_j \phi =< \psi, f > \rho_j \psi = \alpha_j < \psi, f > \psi = \alpha_j P_\psi f$$

Aus $\mathrm{Tr}(\rho_j) = 1$ folgt $\alpha_j = 1$ und daher

$$\rho_1 = \rho_2 = P_\psi$$

Reine Gesamtheiten sind also irreduzibel.

■

Die reinen Gesamtheiten P_ψ sind also im Sinne der Irreduzibilität nicht aber im Sinne der Streuungsfreiheit die Analoga der Verteilungsfunktionen $F^\delta_{Z_0}$. Sie beschreiben keine Einzelsysteme wohl aber in gewissem Sinne maximal genau präparierte Gesamtheiten. Die Bezeichnung Zustände für die zugehörigen $\psi \in \mathcal{H}$ ist damit nur schwach gerechtfertigt aber traditionell. Sprechweisen wie „das System befindet sich im Zustand ψ“ sollte man trotzdem vermeiden; man wird sie aber in den Lehrbüchern der Quantenmechanik häufig antreffen.

1.5 Bemerkungen zur Zeitentwicklung

1.5.1 Von Neumann–Gleichung

Betrachtet man das Dynamikaxiom der Quantenmechanik, so erscheint es erstrebenswert, direkt eine Differentialgleichung für die statistischen Operatoren $\rho(t)$ anzugeben. Dies gelingt bis auf eine Einschränkung für die Definitionsbereiche mit der von Neumann–Gleichung. Genauer gesagt gilt:

Satz 1.5.1 (von Neumann–Gleichung)
Sei ρ_0 ein statistischer Operator. Dann ist

$$\rho(t) = U(t,t_0)\rho_0 U(t,t_0)^+$$

eine Lösung der von Neumann–Gleichung

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho(t)]$$

im Definitionsbereich der rechten Seite.

Beweis
Nach dem Dynamikaxiom gilt für $U = U(t, t_0)$

$$i\hbar \frac{d}{dt} U = HU$$

Für die schwache Differentiation gilt die Produktregel und daher

$$0 = \frac{d}{dt} U^+ U = U^+ \frac{d}{dt} U + (\frac{d}{dt} U^+) U$$

d.h.

$$-i\hbar \frac{d}{dt} U^+ = U^+ (i\hbar \frac{d}{dt} U) U^+ = U^+ H$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho &= \frac{d}{dt}(U\rho_0 U^+) = (\frac{d}{dt}U)\rho_0 U^+ + U\rho_0(\frac{d}{dt}U^+) \\ &= -\frac{i}{\hbar} HU\rho_0 U^+ + \frac{i}{\hbar} U\rho_0 U^+ H = -\frac{i}{\hbar}(H\rho - \rho H) \\ &= -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] \end{aligned}$$

■

Bemerkung 1.5.2
Analog zu diesem Vorgehen kann man in der klassischen Mechanik (in statistischer Formulierung) die Zustandsfunktionen $\xi(t, t_{,0}, \cdot)$ aus den Axiomen verbannen und als Ersatz analog zum obigen Vorgehen die klassische Liouville–Gleichung

$$\frac{d}{dt}F(\cdot, t) = \{h, F(\cdot, t)\}$$

ableiten, wobei

$$\{a, b\} = \sum_{j=1}^{N}(\nabla_{q_j} a \cdot \nabla_{p_j} b - \nabla_{p_j} a \cdot \nabla_{q_j} b)$$

die sogenannte Poisson–Klammer zweier Funktionen $a, b : \Gamma \to \mathbb{R}$ ist.

1.5.2 Schrödingergleichung für die Zustände

Beschränkt man sich auf die ja bereits ausführlich besprochenen reinen Gesamtheiten $\rho = P_\psi$, so gilt:

Satz 1.5.3 (Schrödingergleichung)
Für eine Lösung der Schrödingergleichung

$$i\hbar\frac{d}{dt}\psi(t) = H\psi(t) \quad \text{mit} \quad \psi(t_0) = \psi_0,\ \|\psi_0\| = 1$$

ist $\rho(t) = P_{\psi(t)}$ eine Lösung der von Neumann–Gleichung

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho(t)] \quad \text{mit} \quad \rho(t_0) = P_{\psi_0}$$

Beweis
Sei $\psi(t)$ Lösung von

$$i\hbar\frac{d}{dt}\psi(t) = H\psi(t) \quad \text{mit} \quad \psi(t_0) = \psi_0,\ \|\psi_0\| = 1$$

so werden dadurch unitäre Operatoren $U(t, t_0)\psi_0 = \psi(t)$ definiert, die trivialerweise

$$i\hbar\frac{d}{dt}U(t, t_0) = HU(t, t_0) \quad \text{mit} \quad U(t, t) = 1$$

erfüllen. Nach den Überlegungen des letzten Abschnitts ist damit

$$\rho(t) = U(t, t_0)P_{\psi_0}U(t, t_0)^+$$

Lösung der von Neumann–Gleichung und es gilt

$$
\begin{aligned}
\rho(t)\phi &= U(t,t_0)P_{\psi_0}U(t,t_0)^+\phi =< \psi_0, U(t,t_0)^+\phi > U(t,t_0)\psi_0 \\
&= < U(t,t_0)\psi_0, \phi > U(t,t_0)\psi_0 = P_{U(t,t_0)\psi_0}\phi \\
&= P_{\psi(t)}\phi
\end{aligned}
$$

■

Gemäß den Bemerkungen zu den übrigen Axiomen kann man sich also bei Beschränkung auf reine Gesamtheiten auf die Beschäftigung mit den Zuständen $\psi(t)$ und deren Dynamik einschränken. Dies ist der Zugang den die meisten Lehrbücher wählen, um in einem zweiten Anlauf die statistischen Operatoren einzuführen.

1.5.3 Bilder in der Quantenmechanik

Die vorgestellten Axiome bezeichnet man allgemein als Quantenmechanik im Schrödingerbild. Nach diesen Axiomen berechnet man die Mittelwerte einer Observablen auch durch

$$
\begin{aligned}
\bar{A}(t) &= \mathrm{Tr}(A\rho(t)) = \mathrm{Tr}(AU(t,t_0)\rho_0 U(t,t_0)^+) \\
&= \mathrm{Tr}(U(t,t_0)^+ AU(t,t_0)\rho_0) = \mathrm{Tr}(A_H\rho_0)
\end{aligned}
$$

mit

$$A_H = U(t,t_0)^+ AU(t,t_0)$$

Eine Alternative zu den obigen Axiomen ist es also, den Gesamtheiten einen festen statistischen Operator ρ_0 zum Präparationszeitpunkt zuzuordnen und die Dynamik in die Observablen A_H zu stecken. Das Resultat bezeichnet man im Gegensatz zu dem von uns gewählten Schrödingerbild als Heisenbergbild der Quantenmechanik und die Operatoren A_H als Heisenbergoperatoren.

Analog zu der von Neumann–Gleichung im Schrödingerbild kann man direkt eine Bewegungsgleichung für die Heisenbergobservablen, die sogenannte Heisenberggleichung, angeben. Sofern A – die Observable im Schrödingerbild – nicht explizit zeitabhängig ist, gilt

$$\frac{d}{dt}A_H = -\frac{i}{\hbar}[A_H, H_H]$$

Weitere Bilder können durch Aufspaltung von U eingeführt werden. Von Bedeutung (insbesondere in der zeitabhängigen Störungstheorie) ist noch das sogenannte Wechselwirkungsbild.

1.6 Bemerkungen zur Darstellungstheorie

Ziel der Darstellungstheorie ist es, den in den Axiomen vorkommenden abstrakten Hilbertraum zu konkretisieren, d.h. darzustellen durch Räume $L_2(\mathbb{R}^n, \mu)$. Dies geschieht durch Konstruktion geeigneter Isometrien, die so gewählt werden, daß bestimmte ausgewählte Observable durch Multiplikationsoperatoren dargestellt werden. Das allgemeine Verfahren dazu soll hier ohne alle Beweise kurz skizziert werden.

1.6.1 Der allgemeine Fall

Gegeben seien n vertauschbare, selbstadjungierte Operatoren (Observable) A_j für $j = 1, \ldots, n$ mit

$$A_j = \int_{\mathbb{R}} \alpha_j dE_{j\alpha_j}$$

Diese definieren ein Projektionsmaß F auf den Lebesguemengen in $\mathbb{R}^n$ durch

$$F(M) = \int_M dE_\alpha$$

wobei die n–parametrige Spektralschar E_α durch $\alpha = (\alpha_1, \ldots \alpha_n)$ und $E_\alpha = E_{\alpha_1 \cdots \alpha_n} = E_{1\alpha_1} \cdots E_{n\alpha_n}$ gegeben ist. Trivialerweise gilt

$$A_j = \int_{\mathbb{R}^n} \alpha_j dF$$

Existiert nun ein $g \in \mathcal{H}$, so daß die Menge

$$\mathrm{Span}\{F(I)g \,:\, I = \mathop{\times}_{j=1}^{n} [a_j, b_j) \subset \mathbb{R}^n\}$$

dicht in $\mathcal{H}$ ist, so heißt $A = (A_1, \ldots, A_n)$ ein vollständiger Satz von vertauschbaren Operatoren oder auch Abelsches System.

Nachfolgend betrachten wir einen solchen Satz von Operatoren. Durch

$$\mu(M) = \|F(M)g\|^2$$

wird in Abhängigkeit von g ein Maß μ und damit ein Raum $L_2(\mathbb{R}^n, \mu)$ festgelegt. Von zentraler Bedeutung ist nun der folgende Satz.

Satz 1.6.1 (Isometrie)
Die Abbildung

$$W_A : L_2(\mathbb{R}^n, \mu) \to \mathcal{H}, \psi_A \to \psi = \int_{\mathbb{R}^n} \psi_A(\alpha) dFg$$

ist eine Isometrie.

Die Inverse $V_A = W_A^{-1} : \mathcal{H} \to L_2(\mathbb{R}^n, \mu)$ ist die gesuchte Darstellung. Daher bezeichnet man für $\psi \in \mathcal{H}$

$$\psi_A = V_A \psi$$

als ψ in A–Darstellung und für einen Operator $B : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$

$$B_A = V_A B V_A^{-1}$$

als Operator B in A–Darstellung. Kennzeichnend für die A–Darstellung ist nun die folgende Eigenschaft der Operatoren A_j in A–Darstellung.

Satz 1.6.2 (Operatoren in Eigendarstellung)
Der Operator A_j in A–Darstellung ist gegeben durch

$$((A_j)_A \psi_A)(\alpha) = \alpha_j \psi_A(\alpha)$$

Ebenfalls ohne Beweis (einfaches Kalkül) sei noch eine letzte Eigenschaft angeführt.

Satz 1.6.3 (Verteilungsfunktionen)

$$< \psi, F(M)\psi >= \int_M |\psi_A(\alpha)|^2 d\mu$$

Dieser Satz ermöglicht unmittelbar eine Interpretation der Funktionen $|\psi_A|^2$ als Verteilung der Meßwerte der Observablen A in einer reiner Gesamtheit P_ψ, da der Projektor $F(M)$ die Eigenschaft repräsentiert, daß die Meßwerte der Observablen in der Menge M liegen.

Es mag etwas unbefriedigend erscheinen, daß die A–Darstellung nicht eindeutig festgelegt ist, da im angegebenen Rahmen die Funktion g noch gewählt werden kann. Wir geben uns mit folgender Bemerkung zufrieden: Falls möglich wird g für $n = 1$ so gewählt, daß sich das resultierende Maß μ im Bereich eines rein kontinuierlichen Spektrums als das Lebesguemaß λ und im Bereich eines rein diskreten Spektrums als Summe von Punktmaßen mit Gewicht 1 über dem Spektrum ergibt bzw. für $n > 1$ als Produkt solcher Maße ausgedrückt werden kann. Der einfachste Spezialfall $n = 1$ mit einem rein diskreten Spektrum soll noch etwas ausführlicher betrachtet werden.

1.6.2 Beispiel: Operator mit diskretem Spektrum

Wir betrachten nun einen selbstadjungierten Operator mit diskretem, einfachem Spektrum, d.h.

$$A = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k P_{\psi_k}$$

wobei $\{\psi_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ eine ONB von $\mathcal{H}$ ist und $\alpha_k \neq \alpha_j$ für $k \neq j$ gilt.

Zur Angleichung der Schreibweisen an den allgemeinen Fall ist es günstig, die Eigenwerte selbst als Summationsindex einzuführen. Dazu setzen wir $\psi_k = \phi_\alpha$ und $P_{\psi_k} = P_\alpha$ für $\alpha = \alpha_k \in S_A$. Also

$$A = \sum_{\alpha\in S_A} \alpha P_\alpha$$

Mit der Spektralschar

$$E_\alpha = \sum_{\beta\leq\alpha,\beta\in S_A} P_\beta$$

und mit dem durch

$$F(M) = \int_M dE_\alpha = \sum_{\alpha\in M\cap S_A} P_\alpha$$

gegebenem Projektionsmaß erhält man in der Schreibweise des allgemeinen Falls

$$A = \int_{\mathbb{R}} \alpha dE_\alpha = \int_{\mathbb{R}} \alpha dF$$

Die Eigenschaften des Spektrums machen A bereits allein zu einem vollständigem Satz von Observablen. Wählt man nämlich

$$g = \sum_{\alpha \in S_A} \phi_\alpha \quad \text{d.h.} \quad F(M)g = \sum_{\alpha \in M \cap S_A} \phi_\alpha$$

so gilt

$$\text{Span}\{\phi_\alpha \, : \, \alpha \in S_A\} \subset \text{Span}\{F([a,b))g \, : \, [a,b) \subset \mathbb{R}\}$$

und diese Menge ist als ONB dicht in $\mathcal{H}$. Das zugeordnete Maß ist gegeben durch

$$\mu(M) = \|F(M)g\|^2 = \| \sum_{\alpha \in M \cap S_A} \phi_\alpha\|^2 = \sum_{\alpha \in M \cap S_A} \|\phi_\alpha\|^2 = |M \cap S_A|$$

d.h. μ ist eine Summe von Punktmaßen über dem Spektrum von A

$$\mu = \sum_{\alpha \in S_A} \delta_\alpha$$

Betrachten wir nun ein beliebiges Element $\psi \in \mathcal{H}$, so folgt aus der allgemeinen Darstellungstheorie für das zugeordnete $\psi_A \in L_2(\mathbb{R}^n, \mu)$ bei obiger Wahl von g

$$\psi = V_A^{-1}\psi_A = \int_{\mathbb{R}} \psi_A(\alpha) dFg = \sum_{\alpha \in S_A} \psi_A(\alpha)\phi_\alpha$$

Dies bedeutet umgekehrt für $\alpha \in S_A$

$$\psi_A(\alpha) = (V_A\psi)(\alpha) =< \phi_\alpha, \psi >$$

Konsistenterweise gilt für das innere Produkt

$$< \psi, \psi' >= \int_{\mathbb{R}} \psi_A^*(\alpha)\psi_A'(\alpha) d\mu = \sum_{\alpha \in S_A} \psi_A^*(\alpha)\psi_A'(\alpha)$$

Es liegt hier also eine Darstellung als Folgenraum l^2 vor. Für die Darstellung von Operatoren B über $\mathcal{H}$ gilt

$$B_A = V_A B V_A^{-1}$$

d.h. für $\psi \in D_B$ und $\alpha \in S_A$

$$(B_A\psi_A)(\alpha) = (B\psi)_A(\alpha) =< \phi_\alpha, B\psi >$$

Falls B beschränkt ist oder falls B symmetrisch ist mit $\phi_\alpha \in D_B$ für $\alpha \in S_A$ erhält man eine Matrixdarstellung

$$(B_A\psi_A)(\alpha) = \sum_{\beta \in S_A} \tilde{B}_A(\alpha, \beta)\psi_A(\beta) \quad \text{für} \quad \alpha \in S_A$$

mit der Matrix

$$\tilde{B}_A(\alpha,\beta) =< \phi_\alpha, B\phi_\beta > \quad \text{für} \quad \alpha,\beta \in S_A$$

Die Erwartungswertbildung bei solchen Operatoren in einer reinen Gesamtheit $\rho = P_\psi$ ist gegeben durch

$$\bar{B} =< \psi, B\psi >= \sum_{\alpha\in S_A} \psi_A^*(\alpha)(B\psi)_A(\alpha) = \sum_{\alpha,\beta\in S_A} \psi_A^*(\alpha)\tilde{B}_A(\alpha,\beta)\psi_A(\beta)$$

Für allgemeine statistische Operatoren $\rho = \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k P_{\psi_k}$ gilt daher

$$\bar{B} = \mathrm{Tr}(B\rho) = \sum_{\alpha,\beta\in S_A} \tilde{B}_A(\alpha,\beta)\tilde{\rho}_A(\beta,\alpha)$$

mit

$$\tilde{\rho}_A(\alpha,\beta) = \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k\, (\psi_k)_A(\alpha)\, (\psi_k)_A^*(\beta)$$

Die in diesem Abschnitt angestellten Überlegungen sind ohne weiteres auf einen vollständigen Satz von n vertauschbaren Operatoren mit entarteten diskreten Spektren zu verallgemeinern. Vertauschbarkeit und Vollständigkeit garantieren dabei die Existenz einer ONB gemeinsamer Eigenvektoren, derart daß die zu zwei verschiedenen Eigenvektoren gehörigen Eigenwerte nicht für alle Operatoren des Satzes übereinstimmen.

1.6.3 Ortsdarstellung und Impulsdarstellung

Von besonderem Interesse sind die Ortsdarstellung und Impulsdarstellung, da die zugehörigen Operatoren über das Observablenaxiom eingeführt wurden und damit zumindest ihre Vertauschungsrelationen bekannt sind.

Voraussetzung 1.6.4
Wir beschränken uns auf die Betrachtung eines Systems mit n–Freiheitsgraden ohne Berücksichtigung des Spins. Die Ortsoperatoren $Q = (Q_1, \ldots, Q_n)$ bzw. die Impulsoperatoren $P = (P_1, \ldots, P_n)$ seien Abelsche Systeme.

Nach den Bemerkungen zum Pauliprinzip beschränkt man sich damit auf eine Behandlung des Bahnraums $\mathcal{H}_{\mathcal{B}}$. Bei Berücksichtigung des Spins muß man zu sogenannten Orts–Spin– bzw Impuls–Spin–Darstellungen übergehen. Das ist völlig unproblematisch, da wie erwähnt die Spinräume von endlicher Dimension sind. Daß man damit tatsächlich einen vollständigen Satz von Operatoren vorliegen hat, kann nicht abgeleitet sondern muß den Axiomen hinzugefügt werden!

Mit einigen technischen Verschärfungen zum Observablenaxiom, die hier nicht diskutiert werden sollen, kann man folgende Aussagen für die Orts– und Impulsdarstellung ableiten.

Satz 1.6.5 (Orts– und Impulsdarstellung)

(i) Die Ortsdarstellung ist eine Isometrie $V_Q : \mathcal{H} \to L_2(\mathbb{R}^n, \lambda)$ mit

(a) Ortsoperatoren

$$((Q_j)_Q \psi_Q)(x) = x_j \psi_Q(x)$$

(b) Impulsoperatoren

$$((P_j)_Q \psi_Q)(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \psi_Q(x)$$

(ii) Die Impulsdarstellung ist eine Isometrie $V_P : \mathcal{H} \to L_2(\mathbb{R}^n, \lambda)$ mit

(a) Ortsoperatoren

$$((Q_j)_P \psi_P)(p) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_j} \psi_P(p)$$

(b) Impulsoperatoren

$$(P_j)_P \psi_P(p) = p_j \psi_P(p)$$

(iii) Die Isometrie zum Darstellungswechsel $\mathcal{F} = V_P \circ V_Q^{-1}$ von der Orts– zur Impulsdarstellung ist eine Fouriertransformation

$$(\mathcal{F}\psi_Q)(p) = \psi_P(p) = (2\pi\hbar)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} \exp(-\frac{i}{\hbar} p \cdot x) \psi_Q(x) dx$$

Wir beschränken uns für den Rest des Abschnitts auf die Ortsdarstellung, da offenkundig alle Überlegungen ohne weiteres in die Impulsdarstellung übertragen werden können.

Wir betrachten solche Operatoren B, die zumindest im distributiven Sinne durch einen Integralkern $\tilde{B}_Q(x,y)$ gekennzeichnet werden können

$$(B\psi)_Q(x) = (B_Q\psi_Q)(x) = \int_{\mathbb{R}^n} \tilde{B}_Q(x,y)\psi_Q(y)dy$$

Die Erwartungswertbildung bei solchen Operatoren in einer reinen Gesamtheit $\rho = P_\psi$ ist gegeben durch

$$\bar{B} =< \psi, B\psi >= \int_{\mathbb{R}^n} \psi_Q^*(x)(B\psi)_Q(x)dx = \int_{\mathbb{R}^{2n}} \psi_Q^*(x)\tilde{B}_Q(x,y)\psi_Q(y)dxdy$$

Für allgemeine statistische Operatoren $\rho = \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k P_{\psi_k}$ gilt daher

$$\bar{B} = \mathrm{Tr}(B\rho) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} \tilde{B}_Q(x,y)\tilde{\rho}_Q(y,x)dxdy$$

mit

$$\tilde{\rho}_Q(x,y) = \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k\,(\psi_k)_Q(x)\,(\psi_k)^*_Q(y)$$

$\tilde{\rho}_Q$ bezeichnet man als Dichtematrix. Da wir mit dieser Größe einige Berechnungen in Ortsdarstellung ausführen werden, benutzen wir die Abkürzung $\tilde{\rho} = \tilde{\rho}_Q$.

Die Beliebtheit der Ortsdarstellung ist natürlich auf ihre unmittelbare Interpretation zurückzuführen.$|\psi_Q|^2$ ist die Verteilung der Meßwerte bei Messung der Lagekoordinaten (räumliche Wahrscheinlichkeitsdichte). Betrachtet man einen Teilchenstrahl wechselwirkungsfreier Teilchen als Realisierung eines Ensembles von 1–Teilchensystemen, so beschreibt $|\psi_Q|^2$ sogar die Dichte des Teilchenstrahls. Diese Interpretation ist aber auf den wechselwirkungsfreien Fall beschränkt und sorgt durch unzulässige Verallgemeinerung oft für Verwirrung.

1.7 Gleichzeitige Meßbarkeit, Unschärferelation

1.7.1 Sofortwiederholung einer Messung

Die durch die Axiome festgelegten Strukturen werfen mit Blick auf den Meßprozeß einige Schwierigkeiten auf, die nun etwas näher beleuchtet werden sollen. Diese Schwierigkeiten sind für die Etablierung kinetischer Theorien fundamental.

Wir beginnen mit einer beruhigenden Feststellung, was die sogenannte Sofortwiederholung einer Messung angeht: Mißt man an einem System eine Eigenschaft P und wiederholt unmittelbar danach diese Messung, so liefert sie dasselbe Ergebnis.

Um dies zu beweisen führt man mit einer Gesamtheit folgendes Experiment aus: Man mißt die Eigenschaft P und sondert alle Teilsysteme aus, die den Meßwert 1 liefern. Nach dem Meßaxiom ist die neue Gesamtheit

$$\rho' = \frac{1}{\mathrm{Tr}(P\rho)} P\rho P$$

Wiederholt man nun unmittelbar die Messung von P, so gilt

$$\mathrm{M}(P) = \mathrm{Tr}(P\rho') = 1$$

und

$$\mathrm{Str}^2(P) = \mathrm{M}(P^2) - (\mathrm{M}(P))^2 = \mathrm{M}(P) - (\mathrm{M}(P))^2 = 0$$

Das Meßresultat wird also streuungsfrei, d.h. für jedes Einzelsystem reproduziert.

1.7.2 Gleichzeitige Meßbarkeit

Wie wir nun zeigen wollen, können sich im Gegensatz zur obigen Betrachtung die Messungen verschiedener Eigenschaften erheblich gegenseitig stören. Zur Kennzeichnung des ungestörten Falls führt man den Begriff der gleichzeitigen Meßbarkeit ein.

Dazu betrachten wir zwei Meßapparate, an denen die Eigenschaften P_1 bzw. P_2 gemessen werden. Aus diesen Apparaten kann auf folgende Art ein neuer Apparat konstruiert werden: Man mißt zunächst P_1 mit Meßresultat $p_1 \in \{0,1\}$ und unmittelbar danach P_2 mit Resultat $p_2 \in \{0,1\}$. Die Gesamtausgabe der Apparatur sind Wertepaare $(p_1, p_2) \in \{(0,0,),(1,0),(0,1),(1,1)\}$ oder völlig äquivalent einzelne Meßwerte $\alpha = p_1 2^0 + p_2 2^1 \in \{0,1,2,3\}$. Der zu diesem Apparat gehörige Operator sei mit A bezeichnet. Indem man nun die Reihenfolge der beiden Messungen nicht aber die Anordnung im resultierenden Wertepaar vertauscht, erhält man eine Apparatur, deren zugehöriger Operator mit B bezeichnet sei.

Definition 1.7.1 (Kommensurabilität)
Die Eigenschaften P_1 und P_2 werden gleichzeitig meßbar oder kommensurabel genannt, wenn für die obige Konstruktion $A = B$ gilt.

Satz 1.7.2 (Vertauschbarkeit)
Zwei Eigenschaften P_1 und P_2 sind genau dann gleichzeitig meßbar, wenn P_1 und P_2 vertauschen, d.h. $[P_1, P_2] = 0$.

Beweis
Die jeweils 4 verschiedenen Meßwerte führen für die Observablen A und B auf Spektraldarstellungen

$$A = \sum_{i=0}^{3} i P_i^A \quad \text{und} \quad B = \sum_{i=0}^{3} i P_i^B$$

Dabei gilt

$$\begin{aligned}
P_0^A &= (1 - P_1)(1 - P_2)(1 - P_1) \\
P_1^A &= P_1(1 - P_2)P_1 \\
P_2^A &= (1 - P_1)P_2(1 - P_1) \\
P_3^A &= P_1 P_2 P_1
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
P_0^B &= (1 - P_2)(1 - P_1)(1 - P_2) \\
P_1^B &= (1 - P_2)P_1(1 - P_2) \\
P_2^B &= P_2(1 - P_1)P_2 \\
P_3^B &= P_2 P_1 P_2
\end{aligned}$$

Beim Nachweis dieser expliziten Darstellung beschränken wir uns auf den Fall $P_3^A = P_1 P_2 P_1$ und betrachten dazu den Erwartungswert für das Auftreten der Eigenschaft P_3^A – also Meßwert 3 bzw. Meßwertpaar (1,1) – in einer beliebigen Gesamtheit ρ im ersten Meßverfahren. Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten für den Meßwert 1 in der Messung von P_1, also der ersten Teilmessung, ist $\mathrm{Tr}(P_1 \rho)$. Abhängig vom Ausgang dieser Messung sind zwei Fälle zu unterscheiden:

(i) $\mathrm{Tr}(P_1 \rho) = 0$:
In diesem Fall gilt wegen der Eigenschaften statistischer Operatoren auch

$P_1\rho = 0$ und daher $\mathrm{Tr}(P_1P_2P_1\rho) = 0$. Da außerdem bereits die erste Messung niemals den Meßwert 1 liefert gilt auch $\mathrm{Tr}(P_3^A\rho) = 0$. Also

$$\mathrm{Tr}(P_3^A\rho) = \mathrm{Tr}(P_1P_2P_1\rho) = 0$$

(ii) $\mathrm{Tr}(P_1\rho) \neq 0$:
Gemäß dem Meßaxiom ist die Teilgesamtheit, die sich durch Aussondern der Systeme ergibt, die den Meßwert 1 für die erste Teilmessung ergeben

$$\rho' = \frac{1}{\mathrm{Tr}(P_1\rho)}P_1\rho P_1$$

In dieser Gesamtheit ist die Wahrscheinlichkeit für den Meßwert 1 in der nachfolgenden Messung von P_2 gegeben durch $\mathrm{Tr}(P_2\rho')$. Damit ergibt sich als Erwartungswert für das Auftreten des Paares $(1, 1)$

$$\mathrm{Tr}(P_3^A\rho) = \mathrm{Tr}(P_1\rho)\mathrm{Tr}(P_2\rho') = \mathrm{Tr}(P_2P_1\rho P_1) = \mathrm{Tr}(P_1P_2P_1\rho)$$

Insgesamt folgt also die obige Behauptung $P_3^A = P_1P_2P_1$. Die anderen Projektoren berechnet man völlig analog.

Umgekehrt können nun P_1 und P_2 durch diese Projektoren ausgedrückt werden

$$P_1 = P_1^A + P_3^A \qquad P_2 = P_2^B + P_3^B$$

so daß gilt

$$[P_1, P_2] = P_1P_2 - P_2P_1 = (P_1^A + P_3^A)(P_2^B + P_3^B) - (P_2^B + P_3^B)(P_1^A + P_3^A)$$

Sind P_1 und P_2 gleichzeitig meßbar, so gilt definitionsgemäß $A = B$ und damit wegen der Spektraldarstellung

$$P_i^A = P_i^B \quad \text{für} \quad i = 0, 1, 2, 3$$

Daraus folgt

$$[P_1, P_2] = (P_1^A + P_3^A)(P_2^A + P_3^A) - (P_2^A + P_3^A)(P_1^A + P_3^A)$$

Da A selbstadjungiert ist, sind die Projektoren auf die Eigenräume paarweise orthogonal, d.h. $P_i^AP_j^A = P_i^A\delta_{ij}$, so daß folgt

$$[P_1, P_2] = 0$$

Gilt umgekehrt $[P_1, P_2] = 0$, so folgt aus der expliziten Spektraldarstellung

$$P_i^A = P_i^B \quad \text{für} \quad i = 0, 1, 2, 3$$

und damit $A = B$. ∎

Bemerkung 1.7.3

(i) Die Begriffsbildung „gleichzeitige Meßbarkeit“ mag etwas unglücklich erscheinen, da sie nichts mit der technischen Ausführbarkeit eines kombinierten Meßapparats zu tun hat. Vielmehr wird eine Aussage darüber gemacht, ob die Teilmessungen unabhängig voneinander ausgeführt werden können.

(ii) Die Relation „gleichzeitig meßbar“ ist nicht transitiv, jedoch sind die Elemente der Spektralschar eines selbstadjungierten Operators alle untereinander vertauschbar. Daher definiert man die gleichzeitige Meßbarkeit beliebiger Operatoren über die Vertauschbarkeit ihrer Spektralscharen. Mit einigen Einschränkungen für unbeschränkte Operatoren ist dies äquivalent zur Vertauschbarkeit der Operatoren. Man kann also zusammenfassend sagen: Vertauschbare Observable sind kommensurabel.

(iii) Man wird häufig auch Aussagen über Erwartungswerte zu einem Zeitpunkt für nicht kommensurable Observable finden. Ein typisches Beispiel ist die weiter unten diskutierte Heisenbergsche Unschärferelation. Diese Aussagen sind stets so zu interpretieren, daß zunächst die zugrundeliegende Gesamtheit in gleichartige Teilgesamtheiten zerlegt wird. Diese Teilgesamtheiten und die zugrundeliegende Gesamtheit werden dann durch denselben statistischen Operator ρ beschrieben. Die gleichzeitigen Messungen werden an den Teilgesamtheiten ausgeführt, so daß kein Konflikt zur nicht vorhandenen Kommensurabilität entsteht.

(iv) Für die Ableitung kinetischer Theorien werfen die obigen Überlegungen fundamentale Probleme auf, geht es doch in solchen Theorien gerade um die Behandlung von Dichten, die die Lage– und Impulskoordinaten von Teilchen beschreiben. Die Lage– und Impulskoordinaten eines Teilchens in einem bestimmten Freiheitsgrad werden aber gemäß dem Observablenaxiom durch nicht vertauschbare Operatoren beschrieben, und diese sind nicht kommensurabel.

(v) In unseren Bemerkungen zur Darstellungstheorie wurden die Abelschen Systeme als Sätze vertauschbarer Oberatoren eingeführt. Diese Bedingung wird jetzt sicher auch unter dem physikalischen Aspekt der gleichzeitigen Meßbarkeit klarer. Ohne diese Forderung würde bereits die Einführung des gemeinsamen Spektralmaßes F von der Reihenfolge im Satz der Operatoren abhängen und die Bemerkungen zur Rolle von $F(M)$, als Repräsentant der Eigenschaft die Meßwerte der Observablen in einer Menge M zu finden, wären völlig sinnlos.

An dieser Stelle sei noch ein kleiner Exkurs gestattet: In der klassischen Mechanik läßt sich an jedem System zu jeder Zeit jede denkbare Eigenschaft in Kombination mit beliebigen anderen Eigenschaften messen. Dies führt zu der im klassischen Rahmen völlig konsistenten Vorstellung, daß die Eigenschaften an den Systemen stets festliegen und beliebig durch Messung abgefragt werden können. Um vor dem Hintergrund der obigen Überlegungen möglichst viel von seinem klassischen Weltbild zu retten, könnte man nun folgende Vorstellung entwickeln: Auch an einem quantenmechanischen System liegen alle Eigenschaften stets fest. Sie können nur nicht beliebig gleichzeitig durch Messung festgestellt werden. Aber auch diese Vorstellung ist vor dem Hintergrund der Quantenmechanik falsch. Dazu betrachtet man eine reine Gesamtheit $\rho = P_\psi$ und zwei nicht kommensurable Eigenschaften P_1 und P_2. In der obigen Vorstellung kann man nun die Systeme der Gesamtheit gedanklich in vier Arten einteilen, die beide, eine oder keine der Eigenschaften haben. Daraus läßt sich leicht ein Widerspruch zur Irreduzibilität der Gesamtheit konstruieren.

Damit muß folgendes festgehalten werden: Vom Vorliegen einer Eigenschaft an einem System zu reden ist nur unmittelbar nach einer Messung dieser Eigenschaft sinnvoll. Um einem System gar mehrere Eigenschaften zuzusprechen, müssen diese außerdem kommensurabel sein. Eine Ausnahme bilden nur die sog. Systemkonstanten, d.h. Observable der Form $A = \alpha 1$ (Masse, Ladung, Spin). Diese Obsevablen sind mit allen anderen vertauschbar und liefern stets einen festen Meßwert. Die Aussage „das Teilchen hat die Ladung $-e$“ ist also sinnvoll, wenn auch möglicherweise falsch. Eine Aussage „das Teilchen hat Lagekoordinaten in M_x und Impulskoordinaten in M_p“ ist dagegen Unfug – bis auf die patologischen Fälle, in denen M_x oder M_p den gesamten Koordinatenbereich abdecken.

1.7.3 Heisenbergsche Unschärferelation

Nachfolgend benötigt man in Strenge einige Details aus dem Kalkül unbeschränkter Observabler. Um die Dinge einfach zu halten, wird in den eher formalen Beweisen auf die im Prinzip notwendige Diskussion von Existenz und Definitionsbereichen weitgehend verzichtet. Für Details sei auf [6] verwiesen.

Satz 1.7.4 (allgemeine Unschärferelation)
Für eine Gesamtheit $\rho = \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k P_{\phi_k}$ mit $\sum_{k=1}^{\infty} \omega_k = 1$ und Observable A, B gilt

$$\left(\mathrm{Tr}(A^2\rho)\mathrm{Tr}(B^2\rho)\right)^{1/2} \geq \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{\infty} \omega_k| < A\phi_k, B\phi_k > - < B\phi_k, A\phi_k > |$$

falls die rechte Seite existiert.

Beweis

$$\mathrm{Tr}(A^2\rho) = \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k < \phi_k, A^2\phi_k >= \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k \|A\phi_k\|^2$$

Mit der Cauchyschen Ungleichung folgt

$$\left(\mathrm{Tr}(A^2\rho)\mathrm{Tr}(B^2\rho)\right)^{1/2} = \left(\sum_{k=1}^{\infty} \omega_k \|A\phi_k\|^2\right)^{1/2} \left(\sum_{l=1}^{\infty} \omega_l \|B\phi_l\|^2\right)^{1/2}$$

$$\geq \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k \|A\phi_k\|\|B\phi_k\| \geq \sum_{k=1}^{\infty} |\omega_k < A\phi_k, B\phi_k > |$$

Daraus folgt mit $|z| \geq |\mathrm{Im}(z)| = |z - \bar{z}|/2$ die Behauptung. ∎

Betrachtet werden nun die kanonischen Orts– und Impulsoperatoren Q_j und P_k in einem System mit n Freiheitsgraden, d.h. $j, k = 1, \dots, n$.

Satz 1.7.5 (Heisenbergsche Unschärferelation)
Für Gesamtheiten ρ, für die $\mathrm{Tr}(Q_j^2\rho)$ und $\mathrm{Tr}(P_j^2\rho)$ existieren, gilt

$$\mathrm{Str}(Q_j)\mathrm{Str}(P_k) \geq \frac{\hbar}{2}\delta_{jk}$$

Beweis
Durch Anwendung des oben bewiesenen Satzes auf $Q'_j = Q_j - \mathrm{Tr}(Q_j\rho)$ und $P'_j = P_j - \mathrm{Tr}(P_j\rho)$ erhält man mit den Vertauschungsrelationen für die Orts– und Impulsoperatoren die Behauptung. ∎

Bemerkung 1.7.6
Die Heisenbergsche Unschärferelation ergibt sich im Wesentlichen als Folgerung aus der durch das Observablenaxiom festgelegten Nichtvertauschbarkeit der Orts– und Impulsoperatoren. Ihre Interpretation ist Ausgangspunkt mancher Irrtümer, dürfte aber nach dem bisher gesagten klar sein: Im Fall $j = k$ sind Ort und Impuls nicht gleichzeitig meßbar. Die Aussage bezieht sich daher auf gleichartige Teilgesamtheiten. Sie ist eine rein statistische Aussage über die Verteilung der Meßresultate bei der Orts– bzw. Impulsmessung an diesen Teilgesamtheiten und hat nichts mit unscharfer Meßgenauigkeit für Einzelmessungen zu tun. Ganz im Gegenteil geht die Idealisierung ein, daß man zur experimentellen Verifikation Ort– und Impuls beliebig genau messen kann. Diese Messungen finden aber wegen der Aufspaltung in Teilgesamtheiten niemals am selben System statt.

1.7.4 Präparation

Bei der Diskussion der Axiome der Quantenmechanik wurde das Problem angeschnitten, daß die Axiome keine unmittelbare Aussage darüber machen, wie die explizite Zuordnung von Gesamtheiten zu statistischen Operatoren und Observablen zu selbstadjungierten Operatoren erfolgen soll. Aus dem Meß– und Mischungsaxiom kann man aber für den Fall, daß an der Gesamtheit eine sogenannte Präparationsmessung ausgeführt wurde, eine Zuordnung der Gesamtheit zu einem statistischen Operator ableiten.

Dazu betrachten wir die Messung einer Observablen mit diskretem, einfachen Spektrum

$$A = \sum_{\alpha \in S_A} \alpha P_\alpha$$

in einer beliebigen Gesamtheit ρ. Die möglichen Meßwerte sind durch $\alpha \in S_A$ gegeben und ein bestimmter Meßwert α wird mit der relativen Häufigkeit

$$\lambda_\alpha = \mathrm{Tr}(P_\alpha \rho) =< \phi_\alpha, \rho\phi_\alpha >$$

registriert. Die Teilgesamtheiten, die man durch Aussondern der Systeme zu einem bestimmten Meßwert erhält, ergeben sich nach dem Mischungsaxiom

$$\rho'_\alpha = \frac{P_\alpha \rho P_\alpha}{\mathrm{Tr}(P_\alpha \rho)} = P_\alpha$$

sofern der Meßwert α überhaupt vorkommt, da für alle $\psi \in \mathcal{H}$

$$\rho'_\alpha \psi = \frac{< \phi_\alpha, \psi > P_\alpha \rho \phi_\alpha}{< \phi_\alpha, \rho \phi_\alpha >} = \frac{< \phi_\alpha, \psi >< \phi_\alpha, \rho \phi_\alpha > \phi_\alpha}{< \phi_\alpha, \rho \phi_\alpha >} = P_\alpha \psi$$

Die ausgesonderten Teilgesamtheiten sind also völlig unabhängig von der Gesamtheit ρ vor der Messung von α und können jetzt zu einer neuen Gesamtheit gemischt werden. Faßt man beispielsweise alle ursprünglichen Systeme wieder zu einer Gesamtheit zusammen, und beschränkt sich auf die Messung der Gewichte λ_α, die natürlich von ρ abhängen, so erhält man

$$\rho' = \sum_{\alpha \in S_A} \lambda_\alpha P_\alpha$$

Damit hat man eine neue Gesamtheit „präpariert", die jetzt wohl bekannt ist und deren weiters Verhalten durch die Axiome festgelegt ist. Diese besteht zwar aus den ursprünglich betrachteten Systemen, aber i.a. gilt $\rho' \neq \rho$. Die Präparation ist daher nicht einfach eine Messung des statistischen Operators, sondern stellt einen aktiven Eingriff dar.

Soweit ist also im Rahmen der Axiome geklärt, wie einer Gesamtheit ein statistischer Operator zugeordnet werden kann, wobei allerdings die Frage der Vollständigkeit eines Systems von Operatoren zusätzlich geklärt werden muß. Die andere Frage, wie den Meßapparaten selbstadjungierte Operatoren zugeordnet werden können, und wie insbesondere der Hamiltonoperator eines Systems festgelegt wird, ist im Rahmen der Axiome nicht zu beantworten. Man mag sich mit dem sogenannten Korrespondenzprinzip zufriedengeben: Ist einer Meßgröße in der klassischen Mechanik die Phasenraumfunktion $a(q)$ bzw. $a(p)$ zugeordnet, so entspricht dies in der Quantenmechanik einem Operator $A = a(P)$ bzw $A = a(Q)$. Dieses Rezept zur Beschaffung der nötigen Operatoren hat zwei Schwachstellen. Es ergibt keine eindeutige Vorschrift sobald Mischungen von Ort– und Impuls im Spiel sind und es berücksichtigt keine Spinanteile. Der zweite Einwurf ist trivial, da der Spin ein typisch quantenmechanischer Effekt ist. Über die Konstruktion von Bahnobservablen wird noch zu sprechen sein.

1.8 Beispiel: Harmonischer Oszillator

1.8.1 Vorüberlegung

Um ein konkretes Beispiel für die Anwendung der Quantenmechanik zu geben, soll nun der 1–dimensionale harmonische Oszillator behandelt werden. Eine Klasse gleichartiger Systeme ist in diesem Fall durch die Systemkonstanten Masse m und Eigenfrequenz ω gekennzeichnet. Anwendung des Korrespondenzprinzips führt auf den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{\omega^2}{2}\hat{Q}^2$$

wobei für den Ortsoperator $\hat{Q}$ und den Impulsoperator $\hat{P}$ nach Axiom die Vertauschungsrelation

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = \frac{\hbar}{i}$$

gilt.

Es ist bequem, zu einer dimensionslosen Betrachtung überzugehen. Dazu wählen wir die Masseneinheit μ, die Zeiteinheit τ und die Längeneinheit ξ

$$\mu = m \quad , \quad \tau = \frac{1}{\omega} \quad , \quad \xi = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}$$

und definieren daher als dimensionslose Größen

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} \\ Q &= \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{-1/2}\hat{Q} \\ P &= (m\hbar\omega)^{-1/2}\hat{P} \end{aligned}$$

Damit erhält man

$$H = \frac{1}{2}(P^2 + Q^2) \quad , \quad [P, Q] = -i$$

Die Dynamik der statistischen Operatoren ist gegeben durch die unitären Operatoren $U(t, t_0)$:

$$\rho(t) = U(t, t_0)\rho_0 U(t, t_0)^+$$

mit $U(t,t_0)^+ = U(t_0,t)$ und $U(t,t) = 1$. Diese erfüllen die (dimensionslose) Schrödingergleichung

$$i\frac{d}{dt}U(t,t_0) = HU(t,t_0)$$

Da H nicht explizit zeitabhängig ist, folgt

$$U(t,t_0) = \exp(-i(t-t_0)H)$$

Zur expliziten Behandlung der Dynamik und um die möglichen Meßwerte von Energiemessungen zu bestimmen, ist es also nötig das Spektrum von H zu betrachten.

1.8.2 Eigenwertproblem

Für eine strenge Betrachtung benötigt man eine technische Verschärfung des Observablenaxioms. Dies entspricht der Situation bei Einführung der Ortsdarstellung, wo wir die entsprechende Diskussion vermieden haben. An die Stelle der obigen Vorüberlegung treten zwei Voraussetzungen.

Voraussetzung 1.8.1
Die Orts– und Impulsoperatoren P und Q seien abgeschlossene symmetrische Operatoren, so daß $D = D_P \cap D_Q$ dicht ist. Ferner sei für $\psi, \phi \in D$

$$< P\psi, Q\phi > - < Q\psi, P\phi > = -i < \psi, \phi >$$

und

$$(Q + iP)^+ = (Q - iP)^-$$

Der Hamiltonoperator des Systems ist gegeben durch

$$H = \frac{1}{2}(P^2 + Q^2)^-$$

Dabei bedeutet das hochgestellte - den Abschluß des entsprechenden Operators.

Satz 1.8.2 (diskretes Spektrum)
(i) Die abgeschlossenen Operatoren

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP) \quad \text{und} \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - iP)$$

genügen der Vertauschungsrelation

$$[a, a^+] = 1$$

und es gilt

$$H = N + \frac{1}{2}1 \quad \text{mit} \quad N = a^+ a$$

(ii) Der selbstadjungierte Operator N hat ein rein diskretes Spektrum, in dem alle Eigenwerte die gleiche Vielfachheit haben.

Voraussetzung 1.8.3
Die Vielfachheit der Eigenwerte von N sei 1.

Der Beweis des Satzes und eine Diskussion inwieweit die letzte Voraussetzung der Vollständigkeit von Q entspricht findet man ausführlich in [7]. Die restlichen Schritte zur Lösung des Eigenwertproblems von N und damit von H sollen hier explizit vorgeführt werden.

Als unmittelbare Folgerung aus $[a, a^+] = 1$ und $N = a^+ a$ erhält man:

Folgerung 1.8.4

$$Na = a(N-1) \quad \text{und} \quad Na^+ = a^+(N+1)$$

Zur Lösung des Eigenwertproblems ist nun der folgende Satz entscheidend.

Satz 1.8.5 (Eigenwertproblem)
Ist ϕ_ν Eigenvektor von N zum Eigenwert ν, so gilt:

(i) $\nu \geq 0$

(ii) Im Fall $\nu = 0$ ist $a\phi_\nu = 0$. Andernfalls ist $a\phi_\nu$ Eigenvektor von N zum Eigenwert $\nu - 1$ und $\|a\phi_\nu\| = \sqrt{\nu}\|\phi_\nu\|$.

(iii) $a^+\phi_\nu$ ist Eigenvektor von N zum Eigenwert $\nu+1$ und $\|a^+\phi_\nu\| = \sqrt{\nu+1}\|\phi_\nu\|$.

Beweis
Nach Voraussetzung gilt $N\phi_\nu = \nu\phi_\nu$ und $\|\phi_\nu\| > 0$. Damit und aus den bereits formulierten Eigenschaften von a, a^+ und N folgt

$$\|a\phi_\nu\|^2 =< a\phi_\nu, a\phi_\nu >=< \phi_\nu, N\phi_\nu >= \nu\|\phi_\nu\|^2$$

und

$$\|a^+\phi_\nu\|^2 =< a^+\phi_\nu, a^+\phi_\nu >=< \phi_\nu, (N+1)\phi_\nu >= (\nu+1)\|\phi_\nu\|^2$$

Damit erhält man:

(i) Aus $\|a\phi_\nu\|^2 = \nu\|\phi_\nu\|^2 \geq 0$ folgt $\nu \geq 0$.

(ii) Für $\nu = 0$ folgt aus $\|a\phi_\nu\|^2 = \nu\|\phi_\nu\|^2 = 0$ auch $a\phi_\nu = 0$. Ansonsten gilt $Na\phi_\nu = a(N-1)\phi_\nu = (\nu-1)a\phi_\nu$ und $\|a\phi_\nu\| > 0$.

(iii) $Na^+\phi_\nu = a^+(N+1)\phi_\nu = (\nu+1)a^+\phi_\nu$ und $\|a^+\phi_\nu\| > 0$.

■

Ausgehend von einem Eigenwert kann man also mit a und a^+ im Spektrum auf– und absteigen. Um keinen Widerspruch zur Positivität der Eigenwerte zu erzeugen, müssen diese ganzzahlig sein. Damit es überhaupt Eigenwerte gibt muß dann 0 der kleinste Eigenwert sein, aus dem man mit Hilfe von a^+ sukzessive alle anderen Eigenwerte erzeugen kann. Indem man noch normiert erhält man als Lösung:

Satz 1.8.6 (Spektraldarstellung)

$$N = \sum_{\nu=0}^{\infty} \nu P_{\phi_\nu} \quad \text{d.h.} \quad H = \sum_{\nu=0}^{\infty} (\nu + \frac{1}{2}) P_{\phi_\nu}$$

mit den ONB $\{\phi_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$

$$\phi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n\phi_0 \quad \text{und} \quad a\phi_0 = 0, \quad \|\phi_0\| = 1$$

Kapitel 2

Grundgrößen klassischer kinetischer Theorien

2.1 Vorbemerkungen

Im vorangegangenen Kapitel über Quantenmechanik hatten wir gesehen, daß die Nichtvertauschbarkeit von Orts– und Impulsoperatoren zu grundsätzlichen Schwierigkeiten führen muß, wenn man versucht allein auf quantenmechanischer Basis kinetische Theorien zu etablieren. Dadurch entsteht die Idee, die Beziehungen zwischen Quantenmechanik und klassischer Mechanik genauer zu untersuchen (Korrespondenzprinzip). Zunächst soll daher ein grober Blick auf die Grundlagen der klassischen kinetischen Theorien geworfen werden. Mikrotheorie ist in diesem Kapitel daher stets die klassische Mechanik in statistischer Formulierung (siehe Abschnitt 1.3). Es werden einige grundlegende Probleme der statistischen Mechanik angeschnitten, auf die aber nur sehr kurz eingegangen wird. Um die Dinge einfach zu halten, beschränken wir uns auf Systeme mit einer Teilchensorte in drei Dimensionen.

Grundgröße der klassischen kinetischen Theorien ist die sogenannte Boltzmanndichte $f(x,p,t)$, die als Dichte über dem Raum der Lage– und Impulskoordinaten die Verteilung der Teilchen in einem Einzelsystem beschreibt.

$$N_M(t) = \int_{M \subset \mu} f(x,p,t)\,dx\,dp$$

ist also die Anzahl der Teilchen zur Zeit t mit Lage– und Impulskoordinaten in $M \subset \mu$. Ziel der klassischen kinetischen Theorien ist es, diese Grundgröße auf der Basis der klassischen Mechanik als Mikrotheorie zu konstruieren und Bewegungsgleichungen für die neue Größe abzuleiten, was i.a. mit der Einführung von Annahmen verbunden ist, die über die Mikrotheorie hinausgehen. Ein Beispiel für eine solche Bewegungsgleichung (kinetische Gleichung) ist die bekannte Boltzmanngleichung (Teilchenmasse m)

$$\partial_t f + \frac{1}{m} p \cdot \nabla_x f = \mathcal{C}(f)$$

für verdünnte Gase kurzreichweitig wechselwirkender Teilchen (siehe dazu [8]).

Kinetische Theorien gewinnen ihre Bedeutung dadurch, daß sich in Abhängigkeit von der Boltzmanndichte f die Grundgrößen einer thermodynamischen Beschreibung der Systeme, als (modifizierte) Impulsmomente, angeben lassen. So gilt z.B. für ein Boltzmanngas (Boltzmannkonstante k)

(i) Teilchenzahldichte n:

$$n(x,t) = \int_{\mathbb{R}^3} f(x,p,t)dp$$

(ii) Mittlere Geschwindigkeit (Strömungsgeschwindigkeit) u:

$$n(x,t)u(x,t) = \frac{1}{m} \int_{\mathbb{R}^3} pf(x,p,t)dp$$

(iii) Temperaturfeld T:

$$\frac{3}{2} n(x,t)kT(x,t) = \frac{1}{2m} \int_{\mathbb{R}^3} (p - mu)^2 f(x,p,t)dp$$

Aus der kinetischen Gleichung kann man i.a. verschiedene thermodynamische Gleichungssyteme unter Hinzunahme von Nebenbedingungen (Limitierungsverfahren, Abschlußrelationen) gewinnen. Die kinetische Theorie ist also die umfassendere Theorie, die Nebenbedingungen sind Ausdruck des eingeschränkten Anwendungsbereichs der thermodynamischen Theorien. Aus der Boltzmanngleichung kann man in diesem Sinne u.a. die Eulergleichungen ableiten.

In der Literatur wird häufig die Boltzmanndichte in Abhängigkeit von Geschwindigkeiten statt von Impulsen eingeführt. Bezeichnen wir diese Größe mit f_v, so gilt

$$f_v(x,v,t) = m^3 f(x,mv,t)$$

Die Bewegungsgleichungen und Definitionen der thermodynamischen Größen sind entsprechend zu transformieren. Insbesondere für die Boltzmanngleichung ist es günstiger die Geschwindigkeit als Variable zu wählen, für unsere an der Quantenmechanik ausgerichteten Betrachtungen sind die impulsabhängigen Boltzmanndichten geeigneter. Eine weitere Möglichkeit ergibt sich durch Umnormierung der Boltzmanndichten. Allgemein gilt

$$\int_\mu f(x,p,t)dxdp = C$$

wobei nach der oben getroffenen Konvention die Boltzmanndichte eine Teilchenzahldichte ist, und daher die Normierungskonstante C die Gesamtzahl der Teilchen N im System ist. Weiter anzutreffende Möglichkeiten sind die Wahl $C = 1$ (relative Teilchenzahldichten) und $C = Nm$ (Massendichten). Bei Vergleich verschiedener Resultate sollte man die jeweiligen Konventionen überprüfen.

2.2 Mikroskopische Boltzmanndichten

Um in der klassischen Mechanik auf mikroskopischer Ebene eine Observable einzuführen, die die Teilchendichte über dem μ–Raum beschreibt, definieren wir mit Hilfe von δ–Distributionen die sogenannten mikroskopischen Boltzmanndichten.

Definition 2.2.1 (mikroskopische Boltzmanndichten)
Für $Z = (w_1, \ldots, w_N) = (x_1, p_1, \ldots, x_N, p_N) \in \Gamma$ und $w = (x,p) \in \mu$ heißt

$$f^m(w,Z) = \sum_{j=1}^{N} \delta(w - w_j)$$

mikroskopische Boltzmanndichte.

Für die hier und nachfolgend gewählten Bezeichnungen verweisen wir auf Abschnitt 1.3. f^m ist im Sinne der dortigen Überlegungen eine Familie von Observablen (Parameter $w = (x,p) \in \mu$), wenn man die Axiome auf Distributionen des obigen Typs erweitert.

Für die Beschreibung eines Einzelsystems betrachtet man formal (vgl. Abschnitt 1.3) die distributiven Verteilungsfunktionen

$$F^\delta_{Z_0}(Z,t) = \delta(Z - \xi(t,t_0,Z_0))$$

Daher ergibt sich für ein Einzelsystem mit Zustand Z_0 zur Zeit t_0

$$f^m_{Z_0}(w,t) = \int_\Gamma f^m(w,Z) F^\delta_{Z_0}(Z,t)dZ = \sum_{j=1}^{N} \delta(w - \xi_j(t,t_0,Z_0))$$

wobei $\xi_j = (\alpha_j, \beta_j)$ die Bahn des $j$ten Teilchens im μ–Raum beschreibt.

Am Rande sei erwähnt, daß analog zur Quantenmechanik $f^m_{Z_0}$ auch als die zu f^m gehörige Heisenbergobservable betrachtet werden kann. Diese Sicht ist aber in der klassischen Theorie nicht sehr verbreitet.

Scheinbar hat man damit eine befriedigende Situation erreicht, denn man behandelt Einzelsysteme und

$$N^m_M(t) = \int_{M\subset\mu} f^m_{Z_0}(w,t)dw$$

ist offenbar die Anzahl der Teilchen mit Lage– und Impulskoordinaten in $M \subset \mu$ zur Zeit t. Dies war die in den Vorüberlegungen aufgeführte charakteristische Eigenschaft der Boltzmanndichten. Man könnte nun versucht sein, aus den Hamiltonschen Gleichungen eine Bewegungsgleichung für $f^m_{Z_0}$ abzuleiten, um so eine kinetische Theorie mit $f^m_{Z_0}$ als Grundgröße zu etablieren. Das ist mathematisch machbar, führt aber zu keinen befriedigenden Ergebnissen, da sich u.a. keine Beschreibung von irreversiblem Verhalten und Gleichgewichtsphänomenen ergibt. Den tieferen Grund dafür kann man plakativ wie folgt formulieren:

- Die mikroskopischen Boltzmanndichten beschreiben als distributive Verteilungen ein makroskopisches System zu fein.

Etwas präziser ausgedrückt gibt es bei der Beschreibung eines makroskopisches System, das ja typischerweise 10^{23} Teilchen enthält, zwei Probleme:

- Die Lage– und Impulskoordianten aller Teilchen können zu keinem Zeitpunkt exakt gemessen werden, d.h. f^m ist keine echte Meßgröße am System.

- Die Lage– und Impulskoordinaten aller Teilchen können auch zur Zeit t_0 unmöglich präpariert werden, d.h. Z_0 ist nicht bekannt.

Es sollen nun sehr verkürzt die Konzepte der Statistischen Mechanik dargestellt werden, mit denen man versucht diese Schwierigkeiten zu überwinden (siehe auch [9]).

2.3 Mollifying und Coarse graining

Es ist naheliegend den oben genannten Schwierigkeiten mit einer geeigneten „Vergröberungsstrategie“ zu begegnen. Dazu dient die folgende Definition

Definition 2.3.1 (Mollifier)
Eine Funktion $G : \mu \to \mathbb{R}_0^+$ mit den nachfolgenden Eigenschaften heißt Mollifier.

(i)

$$\int_\mu G(w)dw = 1$$

(ii)

$$\int_\mu wG(w)dw = 0$$

(iii)

$$\int_\mu x^2 G(w)dw = \epsilon_x^2 \quad , \quad \int_\mu p^2 G(w)dw = \epsilon_p^2$$

Dabei sind $\epsilon_x > 0$ und $\epsilon_p > 0$ von der Größenordnung der Meßgenauigkeiten in Ort und Impuls, mit denen bei Makrosystemen die Lage und Impulskoordinaten der Teilchen gemessen werden können.

Sofern dies für die Betrachtungen nötig ist mag man die Eigenschaften der Mollifier verschärfen, oder sie sogar explizit wählen. Für den Moment ist nur wichtig, daß es sich um auf 1 normierte positive Funktionen handelt, die um ihren Schwerpunkt 0 im μ–Raum stark lokalisiert sind. Dies macht sie geeignet, die mikroskopischen Boltzmanndichten sinnvoll zu vergröbern.

Definition 2.3.2 (Boltzmannobservable)
Die vergröberten mikroskopischen Boltzmanndichten

$$f^B(w, Z) = \int_\mu G(w - w')f^m(w', Z)dw'$$

nennen wir Boltzmannobservablen.

Damit könnte man wieder durch Verwendung der distributiven Verteilungsfunktion $F^{\delta}_{Z_0}$ zur Beschreibung von Einzelsystemen übergehen, mit der bereits erwähnten Problematik, daß so eine Abhängigkeit von dem makroskopisch ebenfalls nicht zugänglichen Präparationszustand Z_0 entsteht. Es liegt daher nahe, über andere, geeignet zu wählende Gesamtheiten zu mitteln, um die Grundgrößen der kinetischen Theorien einzuführen. Diese Mittelung bezeichnet man als „coarse graining“.

Definition 2.3.3 (Boltzmanndichten)
Die durch sogenannte makroskopische Gesamtheiten (s.u.) gemittelten Boltzmannobservablen

$$f(w,t) = \int_{\Gamma} f^B(w,Z)F(Z,t)dZ$$

heißen Boltzmanndichten.

Die Einführung echter Gesamtheiten erscheint auch vor dem Hintergrund der Quantenmechanik notwendig, da diese ja sicher die umfassendere Mikrotheorie ist, aber es in dieser Theorie keine Möglichkeit gibt die Satistik in der Art und Weise der klassischen Mechanik zu eliminieren. Trotzdem steht man jetzt vor einem Problem, da es ja die erklärte Absicht war, mit den Boltzmanndichten Einzelsysteme zu beschreiben. Damit zusammen hängt die Frage, was in der obigen Definition „makroskopische Gesamtheiten“ heißen soll. Ausgangspunkt zur Beantwortung dieser Frage ist die Forderung:

- Die bei der Definition der Boltzmanndichten eingeführten makroskopischen Gesamtheiten sollen in der Lage sein, auf makroskopischer Ebene Einzelsysteme zu beschreiben.

Man mag nun meinen, daß man mit dieser Forderung wieder bei den ja grade verworfenen Gesamtheiten $F^{\delta}_{Z_0}$ landet, aber die Betonung in der obigen Forderung liegt auf dem Ausdruck „makroskopische Ebene“. Man erinnere sich daran, daß eine Gesamtheit genau dann Einzelsysteme beschreibt, wenn sie die Observablen der Theorie streuungsfrei mittelt. Die Idee des „coarse graining“ beruht nun auf folgender Annahme:

- Auf makroskopischer Ebene gibt es nur noch ganz bestimmte Observable. Diese sind sämtlich funktional abhängig von den Boltzmannobservablen.

Beispiele für solche Observable sind Dichte, Strömungsgeschwindigkeit, Temperatur usw. Die Annahme stimmt mit der Idee überein, Thermodynamiken aus kinetischen Theorien abzuleiten. Damit sind die einzig wesentlichen Observablen der Theorie die Boltzmannobservablen und die „makroskopischen Gesamtheiten" sind gekennzeichnet durch:

- Die makroskopischen Gesamtheiten mitteln die Boltzmannobservablen im Rahmen der Meßungenauigkeit streuungsfrei. Makroskopische Gesamtheiten sind symmetrisch.

Falls man explizite Ausdrücke benötigt, wählt man häufig (mangels weiterer Kenntnis) Gleichverteilungen im Γ–Raum über entsprechende Mengen. Die Forderung nach Symmetrie entspricht der Idee der Ununterscheidbarkeit der Teilchen. Die Ableitung weiterer expliziter Eigenschaften makroskopischer Gesamtheiten, soll hier nicht weiter verfolgt werden. Damit sind die Boltzmanndichten als Grundgrößen kinetischer Theorien zwar eingeführt, aber man ist noch weit entfernt von der Ableitung kinetischer Gleichungen. Diese ergeben sich i.a. erst durch Hinzunahme weiterer Annahmen. Im Fall der Boltzmanngleichung sei auf den Boltzmann–Grad–Limes verwiesen. Für Fragen der Dynamik ist aber noch ein anderer Aspekt der statistischen Mechanik von Bedeutung.

2.4 BBGKY–Hierarchie

Definition 2.4.1 (reduzierte Wahrscheinlichkeitsdichten)
Für symmetrische Gesamtheiten F bezeichnet man

$$F_s(w_1, \ldots, w_s, t) = \int_{\mu^{N-s}} F(Z, t) dw_{s+1} \cdots dw_N$$

für $s = 1, \ldots, N$ als reduzierte Wahrscheinlichkeitsdichten.

Reduzierte Wahrscheinlichkeitsdichten spielen bei der Berechnung von Erwartungswerten der sogenannten s–Teilchen–Observablen eine wichtige Rolle.

Definition 2.4.2 (s–Teilchen–Observable)
Man bezeichnet eine Observable a als s–Teilchen–Observable, wenn eine Funktion $\hat{a} : \mu^s \to \mathbb{R}$ existiert, so daß gilt

$$a(Z) = \frac{1}{s!} \sum_{j_1,\ldots,j_s=1}^{N} {}^{\neq} \hat{a}(w_{j_1}, \ldots, w_{j_s})$$

Das Symbol $\sum^{\neq}$ soll besagen, daß nur über paarweise verschiedene Indizes summiert wird. $\hat{a}$ nennen wir Erzeugende der s–Teilchen–Observable.

Diese Begriffsbildung ist mathematisch einfach aber sehr nützlich, da die meisten physikalisch relevanten Observablen 1– oder 2–Teilchen–Observable sind. Betrachten wir als Beispiel die recht allgemeine Klasse der Systeme von Teilchen mit Paarwechselwirkung in einem zeitabhängigen äußeren Potential, d.h. mit einer Hamiltonfunktion der Form

$$h(Z,t) = \sum_{j=1}^{N} \frac{p_j^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^{N} V(x_j, x_k) + \sum_{j=1}^{N} U(x_j, t)$$

O.B.d.A wählt man V symmetrisch. Diese Hamiltonfunktion zerfällt in eine 1–Teilchen–Observable mit Erzeugender

$$\hat{h}_1(w) = \frac{p^2}{2m} + U(x,t)$$

und eine 2–Teilchen–Observable mit Erzeugender

$$\hat{h}_2(w_1, w_2) = V(x_1, x_2)$$

Folgerung 2.4.3
Sei a eine s–Teilchen–Observable mit Erzeugender $\hat{a}_s$ und F eine symmetrische Gesamtheit, so gilt

$$\begin{aligned} M_t(a) = \bar{a}(t) = \int_\Gamma a(Z) F(Z,t) dZ \\ = \quad \frac{N!}{s!(N-s)!} \int_{\mu^s} \hat{a}(w_1, \ldots, w_s) F_s(w_1, \ldots, w_s, t) dw_1 \cdots dw_s \end{aligned}$$

Die Berechnung von Erwartungswerten vereinfacht sich also enorm und es wäre sehr wichtig, direkt Bewgungsgleichungen für die F_s anzugeben (besonders für die Fälle $s = 1, 2$). Ein Schritt in diese Richtung ist die sogenannte BBGKY–Hierarchie, für die oben angesprochene Klasse von Systemen mit Paarwechselwirkung.

Satz 2.4.4 (BBGKY–Hierarchie)
Wir betrachten die reduzierten Wahrscheinlichkeitsdichten F_s, $s = 1, \ldots, N$ symmetrischer Gesamtheiten F von Systemen mit Hamiltonfunktion

$$h(Z) = \sum_{j=1}^{N} \frac{p_j^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^{N} V(x_j, x_k) + \sum_{j=1}^{N} U(x_j, t)$$

O.b.d.A sei V symmetrisch. Wir benutzen die Abkürzungen

$$\mathcal{D}_j = \nabla_{x_j} U(x_j, t) \cdot \nabla_{p_j}$$

und

$$\mathcal{D}_{jk} = \nabla_{x_j} V(x_j, x_k) \cdot \nabla_{p_j} + \nabla_{x_k} V(x_j, x_k) \cdot \nabla_{p_k}$$

Falls F am Rande des Definitionsbereichs verschwindet und mit hinreichenden Differentiationseigenschaften gilt

$$\begin{aligned} \partial_t F_s + \sum_{j=1}^{s} \frac{1}{m} p_j \cdot \nabla_{x_j} F_s - \sum_{j=1}^{s} \mathcal{D}_j F_s & \\ - \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^{s} \mathcal{D}_{jk} F_s - (N - s) \sum_{j=1}^{s} \int_{\mu} \mathcal{D}_{j\,s+1} F_{s+1} dw_{s+1} &= 0 \end{aligned}$$

für $s = 1, \ldots, N$ mit der formalen Abkürzung $F_{N+1} = 0$

Beweis
Die Liouvillegleichung für $F = F_N$ lautet in den oben angegebenen Ausdrücken

$$\partial_t F + \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{m} p_j \cdot \nabla_{x_j} F - \sum_{j=1}^{N} \mathcal{D}_j F - \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^{N} \mathcal{D}_{jk} F = 0$$

Alle weiteren Gleichungen für $s < N$ folgen durch Integration und Ausnutzung der Symmetrie und Randbedingungen. ■

Falls man nicht fordert, daß F am Rand verschwindet, erhält man zusätzliche Randterme. Man spricht von einer Hierarchie, da die Gleichung für F_s von F_{s+1} abhängt. Diese Aufwärtskopplung wird erst für $s = N$ abgebrochen, so daß formal betrachtet nichts gewonnen ist, was über die Liouvillegleichung hinausgeht. Diese Situation ändert sich natürlich, wenn eine sogenannte Abschlußrelation

$$F_{s+1} = \mathcal{F}(F_s)$$

eingeführt wird. Diese sollte idealerweise aus zusätzlichen Eigenschaften der Gesamtheit gefolgert werden. Die am häufigsten gemachte Annahme ist die sogenannte Produktannahme (chaos assumption) auf der Ebene $s = 1$

$$F_2(w_1, w_2, t) = F_1(w_1, t)F_1(w_2, t)$$

2.5 Boltzmann– und reduzierte Wahrscheinlichkeitsdichten

In den vorangegangenen Abschnitten haben wir Boltzmanndichten und reduzierte Wahrscheinlichkeitsdichten eingeführt. Was haben nun die Boltzmanndichten f mit den reduzierten Wahrscheinlichkeitsdichten F_1 zu tun? Im allgemeinen selbstverständlich nichts, da die Boltzmanndichte die Teilchendichte über dem μ–Raum eines einzelnen Systems beschreibt und reduzierte Wahrscheinlichkeitsdichten einer Gesamtheit von Systemen zugeordnet sind. Trotzdem gibt es bei der Beschränkung auf makroskopische Gesamtheiten einen Zusammenhang.

Satz 2.5.1 (Boltzmann– und reduzierte Wahrscheinlichkeitsdichte)
Sei F eine makroskopische Gesamtheit und f die zugehörige Boltzmanndichte, dann gilt

(i)

$$NF_1(w, t) = \int_\Gamma f^m(w, Z)F(Z, t)dZ$$

(ii)

$$f(w, t) = N \int_\mu G(w - w')F_1(w', t)dw'$$

Beweis
Die mikroskopischen Boltzmanndichten

$$f^m(w, Z) = \sum_{j=1}^{N} \delta(x - x_j)\delta(p - p_j)$$

sind (formale) Familien von 1–Teilchen–Observablen mit Erzeugenden

$$\hat{f}^m(w, w_1) = \delta(w - w_1)$$

Damit folgt bereits die erste Behauptung

$$\int_\Gamma f^m(w,Z)F(Z,t)dZ = N\int_\mu \hat{f}^m(w,w_1)F_1(w_1,t)dw_1 = NF_1(w,t)$$

Der zweite Teil ergibt sich damit unmittelbar aus der Definition der Boltzmanndichten.

$$f(x,p,t) = \int_\Gamma\int_\mu G(w-w')f^m(w',Z)F(Z,t)dw'dZ = N\int_\mu G(w-w')F_1(w',t)dw'$$

■

Häufig verwendet man nun, um die unterste Gleichung der BBGKY–Hierarchie als Ausgangspunkt zur Ableitung kinetischer Gleichungen verwenden zu können, eine sogenannte Glattheitsannahme

$$F_1(w,t) = \int G(w-w')F_1(w',t)dw'$$

Ist diese erfüllt, können f und NF_1 identifiziert werden. Zusammen mit den bereits angesprochenen weiteren Forderungen (Abschlußrelation, Limitierungsverfahren) leitet man dann aus der BBGKY–Hierarchie kinetische Gleichungen ab. Für die Boltzmanngleichung sei auf [10],[11] und [8] verwiesen.

Kapitel 3

Wignertransformation

3.1 Vorbemerkungen

Im vorangegangenen Kapitel haben wir den klassischen Zugang zu kinetischen Gleichungen grob skizziert. Die Schwierigkeiten diesen Zugang auf quantenmechanischer Basis zu wiederholen, wurden bereits mehrfach erwähnt und diskutiert. Der nun vorgestellte Ansatz zur Lösung dieser Probleme beruht auf der sogenannten Wignertransformation. Mit dieser Transformation wird die Quantenmechanik in eine der klassischen Beschreibung analoge Form gebracht.

Eng mit der Wignertransformation verbunden ist die Weyltransformation. Wir führen beide Transformationen zunächst rein formal ein und diskutieren anschließend das oben angesprochene Problem. Die Zusammenhänge zwischen Wigner– und Weyltransformation (eingeführt in [12] und [13]) findet man mit weiteren Literaturhinweisen in kompakter Form in [14]. Für diese Vorlesung wurde insbesondere auch die ausführliche Darstellung in [15] herangezogen.

3.2 Weyltransformation

Wir betrachten nun im Rahmen der Quantenmechanik wieder Systeme mit n Freiheitsgraden ohne Berücksichtigung des Spins (vergleiche Abschnitt 1.6.3). Darunter fallen 1–Teilchen–Systeme mit n Freiheitsgraden, aber beispielsweise auch N-Teilchen-Systeme in 3d, für die $n = 3N$ gilt. Allerdings werden solche Systeme zunächst nur als Systeme unterscheidbarer Teilchen behandelt.

Für ein System mit N Teilchen in 3d hatten wir

$$Z = (x_1, p_1, \ldots, x_N, p_N) \in \mathbb{R}^{6N} = \mathbb{R}^{2n},$$

$$x_j = (x_{j1}, x_{j2}, x_{j3}) \in \mathbb{R}^3, \quad p_j = (p_{j1}, p_{j2}, p_{j3}) \in \mathbb{R}^3$$

als Bezeichnung eingeführt. Hier ist es nun bequemer die Koordinaten umzuordnen:

$$Z = (x, p) \in \mathbb{R}^{6N} = \mathbb{R}^{2n},$$

$$x = (x_1, \ldots, x_N) \in \mathbb{R}^{3N} = \mathbb{R}^n, \quad p = (p_1, \ldots, p_N) \in \mathbb{R}^{3N} = \mathbb{R}^n$$

Sofern dies die Schreibweisen vereinfacht benutzen wir auch die durchgehende Indizierung

$$x = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n,\ p = (p_1, \ldots, p_n) \in \mathbb{R}^n$$

Dies dürfte wohl kaum zu Schwierigkeiten führen und wird nachfolgend stillschweigend verwendet.

Die nachfolgenden Bezeichnungen und die Wahl der Vorzeichen variieren in der Literatur.

Definition 3.2.1 (Weyloperatoren)
Seien $Q = (Q_1, \ldots, Q_n)$ und $P = (P_1, \ldots, P_n)$ die Orts- und Impulsoperatoren unseres Systems. Für $\eta, \xi \in \mathbb{R}^n$ heißen

$$V(\eta, \xi) = \exp(\frac{i}{\hbar}(\eta \cdot Q - \xi \cdot P))$$

Weyloperatoren. Dabei verwenden wir die Abkürzungen

$$\eta \cdot Q = \sum_{j=1}^{n} \eta_j Q_j \quad \text{und} \quad \xi \cdot P = \sum_{j=1}^{n} \xi_j P_j$$

Wir werden nachfolgend einige Details des Kalküls mit Weyloperatoren benötigen.

Satz 3.2.2 (Weyloperatoren)

(i)

$$V(\eta, \xi) = \exp(-\frac{i}{2\hbar}\eta \cdot \xi) \exp(\frac{i}{\hbar}\eta \cdot Q) \exp(-\frac{i}{\hbar}\xi \cdot P)$$

(ii)

$$V(\eta,\xi)V(\eta',\xi') = V(\eta+\eta',\xi+\xi')\exp(\frac{i}{2\hbar}(\eta\cdot\xi'-\eta'\cdot\xi))$$

(iii)

$$V^{+}(\eta,\xi) = V(-\eta,-\xi) = V^{-1}(\eta,\xi)$$

Beweis

(i) Man erhält die obige Behauptung unter Ausnutzung der Vertauschungsrelationen für P und Q bei Anwendung der Baker-Hausdorff-Formel: Falls $[[A,B],B] = [A,[A,B]] = 0$, so gilt

$$\exp(A+B) = \exp(A)\exp(B)\exp(-\frac{1}{2}[A,B])$$

(ii) Die Kompositionsregel ergibt sich durch Anwendung von Baker-Hausdorff auf

$$V(\eta+\eta',\xi+\xi') = \exp(\frac{i}{\hbar}(\eta\cdot Q-\xi\cdot P)+\frac{i}{\hbar}(\eta'\cdot Q-\xi'\cdot P))$$

(iii) Die Berechnung der Inversen folgt mit der Kompositionsregel.

■

Mit den Bezeichnungen aus Abschnitt 1.6.3 gilt speziell in Ortsdarstellung:

Satz 3.2.3 (Weyloperatoren in Ortsdarstellung)

$$(V(\eta,\xi)\psi)_Q(x) = \exp(\frac{i}{\hbar}\eta\cdot(x-\frac{\xi}{2}))\psi_Q(x-\xi)$$

und damit in der Integralkernschreibweise

$$(\tilde{V}(\eta,\xi))_Q(x,y) = \exp(\frac{i}{\hbar}\eta\cdot(x-\frac{\xi}{2}))\delta(x-y-\xi)$$

Beweis

$$(V(\eta,\xi)\psi)_Q(x) = \exp(-\frac{i}{2\hbar}\eta\cdot\xi)\exp(\frac{i}{\hbar}\eta\cdot x)\left(\exp(-\frac{i}{\hbar}\xi\cdot P)\psi\right)_Q(x)$$

Dabei gilt zunächst in Impulsdarstellung

$$\left(\exp(-\frac{i}{\hbar}\xi\cdot P)\psi\right)_P(p) = \exp(-\frac{i}{\hbar}p\cdot\xi)\psi_P(p)$$

Durch Wechsel zur Ortsdarstellung folgt

$$\begin{aligned}
&\left(\exp(-\frac{i}{\hbar}\xi\cdot P)\psi\right)_Q(x) \\
= \;& (2\pi\hbar)^{-n/2}\int_{\mathbb{R}^n}\exp(\frac{i}{\hbar}p\cdot x)\exp(-\frac{i}{\hbar}p\cdot\xi)\psi_P(p)dp \\
= \;& (2\pi\hbar)^{-n/2}\int_{\mathbb{R}^n}\exp(\frac{i}{\hbar}p\cdot(x-\xi))\psi_P(p)dp \\
= \;& \psi_Q(x-\xi)
\end{aligned}$$

■

Nützlich ist noch die folgende Identität:

Satz 3.2.4 (Orthogonalität)

$$\mathrm{Tr}(V(\eta,\xi)V^{-1}(\eta',\xi')) = (2\pi\hbar)^n\delta(\eta-\eta')\delta(\xi-\xi')$$

Beweis
Mit Kalkül in der Ortsdarstellung erhält man

$$\mathrm{Tr}(V(\eta,\xi)) = (2\pi\hbar)^n\delta(\eta)\delta(\xi)$$

Mit der Kompositionsregel folgt die Behauptung. ■

Definition 3.2.5 (Weyltransformation)
Für $\alpha\in L^2(\mathbb{R}^{2n})$ ist die Weyltransformation Ω definiert durch

$$A = \Omega\alpha = (2\pi\hbar)^{-n}\int_{\mathbb{R}^{2n}}V(\eta,\xi)\alpha(\eta,\xi)d\eta d\xi$$

Satz 3.2.6 (Weyltransformation)
Die Weyltransformation ist eine Isometrie $\Omega : L_2(\mathbb{R}^{2n}) \to S(\mathcal{H})$ auf den Raum der Hilbert-Schmidt-Operatoren $S(\mathcal{H})$. Es gilt

(i)

$$\alpha(\eta, \xi) = (\Omega^{-1}A)(\eta, \xi) = \mathrm{Tr}(AV^{-1}(\eta, \xi))$$

(ii)

$$\mathrm{Tr}(A^{+}B) = (2\pi\hbar)^{-n} \int_{\mathbb{R}^{2n}} \alpha^{*}(\eta, \xi)\beta(\eta, \xi) d\eta d\xi$$

für $A = \Omega\alpha$ und $B = \Omega\beta$.

Beweis (Skizze)
Man beweist zunächst die Identität

$$A = (2\pi\hbar)^{-n} \int_{\mathbb{R}^{2n}} V(\eta, \xi)\mathrm{Tr}(AV^{-1}(\eta, \xi)) d\eta d\xi$$

Dies ist unter Ausnutzung der bisherigen Regeln in der Ortsdarstellung einfaches Kalkül. Damit existiert eine Darstellung für A der Form

$$A = \Omega\alpha = (2\pi\hbar)^{-n} \int_{\mathbb{R}^{2n}} V(\eta, \xi)\alpha(\eta, \xi) d\eta d\xi$$

Diese impliziert aber die angegebene Form von α.

$$\mathrm{Tr}(AV^{-1}(\eta, \xi)) = (2\pi\hbar)^{-n} \int_{\mathbb{R}^{2n}} \mathrm{Tr}(V(\eta', \xi')V^{-1}(\eta, \xi))\alpha(\eta', \xi') d\eta' d\xi' = \alpha(\eta, \xi)$$

Ähnlich beweist man den zweiten Teil der Aussage. ∎

Satz 3.2.7 (Weyltransformation in Ortsdarstellung)
In Ortsdarstellung gilt für die Weyltransformation

(i)

$$\tilde{A}_Q(x, y) = (\Omega\alpha)\tilde{}_Q(x, y) = (2\pi\hbar)^{-n} \int_{\mathbb{R}^n} \exp(\frac{i}{\hbar}\eta \cdot \frac{x+y}{2})\alpha(\eta, x-y) d\eta$$

(ii)

$$\alpha(\eta, \xi) = (\Omega^{-1}A)(\eta, \xi) = \int_{\mathbb{R}^n} \exp(-\frac{i}{\hbar}\eta \cdot x)\tilde{A}_Q(x + \frac{\xi}{2}, x - \frac{\xi}{2}) dx$$

Beweis

(i)

$$\tilde{A}_Q(x,y) = (2\pi\hbar)^{-n}\int_{\mathbb{R}^{2n}} (\tilde{V}(\eta,\xi))_Q(x,y)\alpha(\eta,\xi)d\eta d\xi$$

Mit
$$(\tilde{V}(\eta,\xi))_Q(x,y) = \exp(\frac{i}{\hbar}\eta\cdot(x-\frac{\xi}{2}))\delta(x-y-\xi)$$
folgt die erste Behauptung.

(ii)

$$\begin{aligned}
\alpha(\eta,\xi) &= \mathrm{Tr}(AV^{-1})(\eta,\xi)\\
&= \int_{\mathbb{R}^{2n}} \tilde{A}_Q(y,x)(\tilde{V}(-\eta,-\xi))_Q(x,y)dxdy\\
&= \int_{\mathbb{R}^{2n}} \tilde{A}_Q(y,x)\exp(-\frac{i}{\hbar}\eta\cdot(x+\frac{\xi}{2}))\delta(x-y+\xi)dxdy\\
&= \int_{\mathbb{R}^{n}} \tilde{A}_Q(x+\xi,x)\exp(-\frac{i}{\hbar}\eta\cdot(x+\frac{\xi}{2}))dx\\
&= \int_{\mathbb{R}^{n}} \exp(-\frac{i}{\hbar}\eta\cdot x)\tilde{A}_Q(x+\frac{\xi}{2},x-\frac{\xi}{2})dx
\end{aligned}$$

■

Bemerkung 3.2.8

Der obige Beweis macht keinen Gebrauch von der Invertierbarkeit der Weyltransformation. Alternativ zur angegebenen Beweisskizze von 3.2.6 kann dieser Satz daher auch aus der Ortsdarstellung gefolgert werden. Mit

$$\tilde{A}_Q(x,y) = (2\pi\hbar)^{-n}\int_{\mathbb{R}^{n}} \exp(\frac{i}{\hbar}\eta\cdot\frac{x+y}{2})\alpha(\eta,x-y)d\eta$$

gilt nämlich

$$\tilde{A}_Q(x+\frac{\xi}{2},x-\frac{\xi}{2}) = (2\pi\hbar)^{-n}\int_{\mathbb{R}^{n}} \exp(\frac{i}{\hbar}\eta\cdot x)\alpha(\eta,\xi)d\eta$$

Mit den Eigenschaften der Fouriertransformation und den obigen Überlegungen folgt dann
$$\Omega^{-1}A = \mathrm{Tr}(AV^{-1})$$

3.3 Wignertransformation

Definition 3.3.1 (Wignertransformation)
Die Wignertransformation $\mathcal{W} : S(\mathcal{H}) \to L_2(\mathbb{R}^{2n})$ ist definiert durch

$$\mathcal{W} = \hat{\mathcal{F}}^{-1} \circ \Omega^{-1}$$

mit

$$\alpha(\eta, \xi) = (\hat{\mathcal{F}}a)(\eta, \xi) = (2\pi\hbar)^{-n} \int_{\mathbb{R}^{2n}} \exp(-\frac{i}{\hbar}(\eta \cdot x - p \cdot \xi))a(x, p)dxdp$$

und daher

$$a(x, p) = (\hat{\mathcal{F}}^{-1}\alpha)(x, p) = (2\pi\hbar)^{-n} \int_{\mathbb{R}^{2n}} \exp(\frac{i}{\hbar}(\eta \cdot x - p \cdot \xi))\alpha(\eta, \xi)d\eta d\xi$$

Satz 3.3.2 (Wignertransformation)
Die Wignertransformation $\mathcal{W} : S(\mathcal{H}) \to L_2(\mathbb{R}^{2n})$ ist eine Isometrie. Es gilt

(i)

$$\mathcal{W}^{-1} = \Omega \circ \hat{\mathcal{F}}$$

(ii)

$$\mathrm{Tr}(A^+ B) = (2\pi\hbar)^{-n} \int_{\mathbb{R}^{2n}} a^*(x, p)b(x, p)dxdp$$

für $a = \mathcal{W}A$ und $b = \mathcal{W}B$.

Beweis
Die Aussagen folgen aus den entsprechenden Aussagen über die Weyl– und Fouriertransformation. ∎

Satz 3.3.3 (Wignertransformation in Ortsdarstellung)
In Ortsdarstellung gilt für die Wignertransformation

(i)

$$a(x, p) = (\mathcal{W}A)(x, p) = \int_{\mathbb{R}^n} \exp(\frac{i}{\hbar}p \cdot y)\tilde{A}_Q(x - \frac{y}{2}, x + \frac{y}{2})dy$$

(ii)

$$\tilde{A}_Q(x,y) = (\mathcal{W}^{-1}a)\tilde{}_Q(x,y) = (2\pi\hbar)^{-n}\int_{\mathbb{R}^n}\exp(-\frac{i}{\hbar}p\cdot(y-x))a(\frac{x+y}{2},p)dp$$

Beweis

(i)

$$a(x,p) = (\mathcal{W}A)(x,p) = (\hat{\mathcal{F}}^{-1}\alpha)(x,p)$$

Dabei gilt $\alpha = \Omega^{-1}A$ und die Berechnung in Ortsdarstellung lieferte (Satz 3.2.7)

$$\alpha(\eta,\xi) = (\Omega^{-1}A)(\eta,\xi) = \int_{\mathbb{R}^n}\exp(-\frac{i}{\hbar}\eta\cdot y)\tilde{A}_Q(y+\frac{\xi}{2},y-\frac{\xi}{2})dy$$

Damit folgt

$$\begin{aligned}
a(x,p) &= (2\pi\hbar)^{-n}\int_{\mathbb{R}^{3n}}\exp(\frac{i}{\hbar}(\eta\cdot x - p\cdot\xi))\exp(-\frac{i}{\hbar}\eta\cdot y) \\
&\qquad \tilde{A}_Q(y+\frac{\xi}{2},y-\frac{\xi}{2})dyd\eta d\xi \\
&= \int_{\mathbb{R}^n}\exp(-\frac{i}{\hbar}p\cdot\xi)\tilde{A}_Q(x+\frac{\xi}{2},x-\frac{\xi}{2})d\xi \\
&= \int_{\mathbb{R}^n}\exp(\frac{i}{\hbar}p\cdot y)\tilde{A}_Q(x-\frac{y}{2},x+\frac{y}{2})dy
\end{aligned}$$

(ii) Mit

$$a(x,p) = \int_{\mathbb{R}^n}\exp(\frac{i}{\hbar}p\cdot y)\tilde{A}_Q(x-\frac{y}{2},x+\frac{y}{2})dy$$

gilt

$$\tilde{A}_Q(x-\frac{y}{2},x+\frac{y}{2}) = (2\pi\hbar)^{-n}\int_{\mathbb{R}^n}\exp(-\frac{i}{\hbar}p\cdot y)a(x,p)dp$$

und es folgt die zweite Behauptung.

■

Folgerung 3.3.4

In Impulsdarstellung gilt

(i)

$$a(x,p) = (\mathcal{W}A)(x,p) = \int_{\mathbb{R}^n}\exp(-\frac{i}{\hbar}k\cdot x)\tilde{A}_P(p-\frac{k}{2},p+\frac{k}{2})dk$$

(ii)

$$\tilde{A}_P(p,k) = (\mathcal{W}^{-1}a)\tilde{}_P(p,k) = (2\pi\hbar)^{-n}\int_{\mathbb{R}^n}\exp(\frac{i}{\hbar}(k-p)\cdot x)a(x,\frac{p+k}{2})dx$$

Beweis

(i) Die Isometrie zum Darstellungswechsel $\mathcal{F} = V_P \circ V_Q^{-1}$ von der Orts– zur Impulsdarstellung ist nach den Überlegungen aus Abschnitt 1.6.3 die Fouriertransformation

$$(\mathcal{F}\psi_Q)(p) = \psi_P(p) = (2\pi\hbar)^{-n/2}\int_{\mathbb{R}^n}\exp(-\frac{i}{\hbar}p\cdot x)\psi_Q(x)dx$$

Damit gilt

$$\tilde{A}_Q(x,y) = (2\pi\hbar)^{-n}\int_{\mathbb{R}^{2n}}\exp(\frac{i}{\hbar}(p\cdot x - k\cdot y))\tilde{A}_P(p,k)dpdk$$

und

$$\begin{aligned}&\tilde{A}_Q(x-\frac{y}{2},x+\frac{y}{2})\\ =\ &(2\pi\hbar)^{-n}\int_{\mathbb{R}^{2n}}\exp(-\frac{i}{\hbar}((k-p)\cdot x+\frac{k+p}{2}\cdot y))\tilde{A}_P(p,k)dpdk\end{aligned}$$

Mit der Substitution $k' = k-p$, $p' = (k+p)/2$ und Umbenennung folgt

$$\tilde{A}_Q(x-\frac{y}{2},x+\frac{y}{2}) = (2\pi\hbar)^{-n}\int_{\mathbb{R}^{2n}}\exp(-\frac{i}{\hbar}(k\cdot x+p\cdot y))\tilde{A}_P(p-\frac{k}{2},p+\frac{k}{2})dpdk$$

und damit über die Ortsdarstellung

$$a(x,p) = (\mathcal{W}A)(x,p) = \int_{\mathbb{R}^n}\exp(-\frac{i}{\hbar}k\cdot x)\tilde{A}_P(p-\frac{k}{2},p+\frac{k}{2})dk$$

(ii) Umgekehrt gilt

$$\tilde{A}_P(p-\frac{k}{2},p+\frac{k}{2}) = (2\pi\hbar)^{-n}\int_{\mathbb{R}^{2n}}\exp(\frac{i}{\hbar}k\cdot x)a(x,p)dx$$

und es folgt die zweite Behauptung.

■

In der Literatur findet man teilweise im obigen Zusammenhang die Wignertransformation zunächst für Funktionen eingeführt. Die Übertragung auf Operatoren erfolgt dann über die Ortsdarstellung.

Definition 3.3.5 (Wignertransformation für Funktionen)
Die Wignertransformation $g_\epsilon^w = \mathcal{W}_\epsilon(g) : \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{C}$ einer Funktion $g \in L_2(\mathbb{R}^{2n})$ zum Parameter $\epsilon \in \mathbb{R}^+$ ist gegeben durch

$$g_\epsilon^w(x,p) = \epsilon^n \int_{\mathbb{R}^n} \exp(ip\cdot\zeta) g(x - \frac{\epsilon}{2}\zeta, x + \frac{\epsilon}{2}\zeta) d\zeta$$

Bemerkung 3.3.6
Da die Wignertransformation in diesem Fall in Abhängigkeit von der Fouriertransformation eingeführt wurde, können alle benötigten Eigenschaften (Definitionsbereich, Umkehrung, Erweiterung auf Distributionen usw.) leicht beschafft werden.

Folgerung 3.3.7
In den bisherigen Schreibweisen gilt einfach

$$\mathcal{W}A = \mathcal{W}_\hbar \tilde{A}_Q$$

Die Rückführung auf Fouriertransformationen in Ortsdarstellung ermöglicht eine Erweiterung der Wignertransformation auf unbeschränkte Operatoren (z.B. der Ortsoperator Q_j). Wir verwenden dies ohne weitere Bemerkungen.

3.4 Korrespondenzprinzip

Für eine Observable $a(x)$ der klassischen Mechanik, die speziell nur vom Ort abhängt, gilt für die zugehörige Wignertransformierte (bei entsprechender Fortsetzung des Definitionsbereichs auf Distributionen)

$$\tilde{A}_Q(x,y) = (\mathcal{W}^{-1}a)_Q(x,y) = \delta(x-y)a(\frac{x+y}{2}) = \delta(x-y)a(x)$$

Damit folgt

$$A = \mathcal{W}^{-1}a = a(Q)$$

Genauso ist für eine Observable $a(p)$ der klassischen Mechanik, die nur vom Impuls abhängt, die Wignertransformierte gegeben durch

$$A = \mathcal{W}^{-1}a = a(P)$$

Insbesondere entspricht der klassische Ort x dem Operator Q und der klassische Impuls p dem Operator P.

In der bisherigen Diskussion wurde bereits häufiger das sogenannte Korrespondenzprinzip erwähnt, mit dem die Verbindung zwischen den Observablen der klassischen Mechanik und den Bahnobservablen der Quantenmechanik hergestellt wird. Die oben diskutierten Eigenschaften zeigen, daß die Wignertransformation die minimalen Forderungen an ein Korrespondenzprinzip erfüllt. Dies ist die Motivation zu folgendem Postulat.

Postulat (Korrespondenzprinzip)
Sei a die in der klassischen Mechanik einer Observablen zugeordnete Funktion über dem Γ–Raum, so wird in der Quantenmechanik dieser Bahnobservablen der Operator

$$A = \mathcal{W}^{-1} a$$

zugeordnet.

Mit diesem Postulat geht man natürlich weit über die obige Motivation hinaus. Eine Liste von Eigenschaften zur Festlegung der Wignertransformation und weitere Literaturhinweise zu diesem Problem findet man in [16]. Mit veränderten – und auch nicht unplausiblen – Forderungen gelangt man aber auch zu anderen Transformationen. Der wesentliche Unterschied liegt in der Transformation von Produkten aus Orts- und Impulskoordinaten (operator ordering). Es ist aber keineswegs klar, welches die gewünschte Form für solche Produkte ist (siehe auch dazu [16]).

3.5 Wignerfunktionen

Definition 3.5.1 (Wignerfunktion)
Sei ρ der statistische Operator einer Gesamtheit von Systemen mit n Freiheitsgraden. Dann heißt

$$F^w(x,p,t) = (2\pi\hbar)^{-n}(\mathcal{W}\rho(t))(x,p)$$

Wignerfunktion oder Wignerverteilung.

Nach den Überlegungen zur Wignertransformation in Ortsdarstellung folgt:

Satz 3.5.2 (Wignerfunktion und Ortsdarstellung)

$$F^w(x,p,t) = \mathcal{F}_0^{-1}\hat{F}^w = (2\pi)^{-n/2}\int_{\mathbb{R}^n} \exp(ip\cdot\zeta)\hat{F}^w(x,\zeta,t)d\zeta$$

mit

$$\hat{F}^w(x,\zeta,t) = (2\pi)^{-n/2}\tilde{\rho}(x-\frac{\hbar}{2}\zeta, x+\frac{\hbar}{2}\zeta, t)$$

$\mathcal{F}_0$ und $\mathcal{F}_0^{-1}$ bezeichnen dabei hier wie auch nachfolgend die gewöhnliche Fourier– und Fourierrücktransformation (ohne Zusatzfaktoren wie $\hbar$). $\tilde{\rho} = \tilde{\rho}_Q$ ist die sogenannte Dichtematrix, der Integralkern des statistischen Operators ρ in Ortsdarstellung.

Als unmittelbare Folge der Isometrieeigenschaft der Wignertransformation erhalten wir

Satz 3.5.3 (Erwartungswerte quantenmechanischer Observabler)
Sei a eine Observable der klassischen Mechanik und $A = \mathcal{W}^{-1}a$ die entsprechende Observable in der Quantenmechanik. Dann gilt für den quantenmechanischen Erwartungswert in einer Gesamtheit $\rho(t)$

$$M_t(A) = \mathrm{Tr}(A\rho) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} a(x,p)F^w(x,p,t)dxdp$$

Mit diesem Satz erhalten die Wignerfunktionen ihre Bedeutung: Im Rahmen einer klassischen Mittelungsprozedur mit den klassischen Observablen kann man mit Hilfe der Wignerfunktion quantenmechanische Erwartungswerte berechnen. Die Wignerfunktionen F^w sind das quantenmechanische Analogon der klassischen Verteilungsfunktionen F.

Kapitel 4

Quanten–Liouville–Gleichung

4.1 Ableitung der Gleichung

Wir betrachten Systeme von N Teilchen mit drei Freiheitsgraden, d.h $n = 3N$. Diese sollen im Rahmen der klassischen Mechanik durch die Hamiltonfunktion

$$\begin{aligned} h(Z,t) &= \sum_{j=1}^{N} \frac{p_j^2}{2m} + W(x_1,\ldots,x_N,t) \\ &= h(x,p,t) = \frac{1}{2m} p^2 + W(x,t) \end{aligned}$$

mit

$$W(x,t) = W(x_1,\ldots,x_N,t) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^{N} V(x_j,x_k) + \sum_{j=1}^{N} U(x_j,t)$$

gekennzeichnet sein. Die explizite Festlegung von W ist für die nachfolgenden Überlegungen zunächst unwichtig, sie stellt aber den Zusammenhang mit Abschnitt 2.4 her. Eine Verallgemeinerung der Resultate dieses Abschnitts auf andere Arten von Systemen dürfte unproblematisch sein. Es sei nochmals angemerkt, daß wir für quantenmechanische Betrachtungen zunächst an der Unterscheidbarkeit der Teilchen festhalten.

Im Rahmen der klassischen Mechanik wird die Dynamik von Gesamtheiten solcher Systeme durch die Liouvillegleichung beschrieben. Sie lautet in diesem Fall (vergleiche Abschnitt 2.4):

$$\partial_t F(x,p,t) + \frac{1}{m} p \cdot \nabla_x F(x,p,t) - \nabla_x W(x,t) \cdot \nabla_p F(x,p,t) = 0$$

Wie beschrieben erhält man die BBGKY–Hierarchie als Folge der Liouvillegleichung und damit nach den Überlegungen in Kapitel 2 einen Zugang zu kinetischen Gleichungen.

Wie steht es nun mit der Dynamik der eingeführten Wignerfunktionen? Diese ist durch die Dynamik der statistischen Operatoren, also durch die von Neumann–Gleichung, festgelegt.

Gemäß dem Korrespondenzprinzip (Wignerrücktransformation) ist der Hamiltonoperator für die oben beschriebene Systemklasse gegeben durch

$$H(t) = \mathcal{W}^{-1}h(\cdot, t) = \frac{1}{2m}P^2 + W(Q, t)$$

Wir machen den ersten Schritt zu einer Bewegungsgleichung für die Wignerfunktion durch Formulierung der von Neumann–Gleichung in Ortsdarstellung. In [17] wird diese Gleichung als Heisenberggleichung bezeichnet.

Satz 4.1.1 (von Neumann–Gleichung in Ortsdarstellung)
Für einen Hamiltonoperator der obigen Form lautet die von Neumann–Gleichung in Ortsdarstellung

$$i\hbar\partial_t\tilde{\rho}(x, y, t) = [-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_x - \Delta_y) + (W(x, t) - W(y, t))]\tilde{\rho}(x, y, t)$$

Beweis
Als Folge der von Neumann–Gleichung (vgl. Abschnitt 1.5.1)

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}[H(t), \rho(t)]$$

erhält man in Ortsdarstellung für $\phi \in \mathcal{H}$

$$i\hbar\partial_t(\rho\phi)_Q(x, t) = (H\rho\phi)_Q(x, t) - (\rho H\phi)_Q(x, t)$$

Dabei gilt

(i)

$$(\rho\phi)_Q(x, t) = \int_{\mathbb{R}^n} \tilde{\rho}(x, y, t)\phi_Q(y)dy$$

(ii)

$$(H\phi)_Q(x,t) = [-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x + W(x,t)]\phi_Q(x)$$

so daß

(i)

$$\partial_t(\rho\phi)_Q(x,t) = \partial_t \int_{\mathbb{R}^n} \tilde{\rho}(x,y,t)\phi_Q(y)dy = \int_{\mathbb{R}^n} \partial_t\tilde{\rho}(x,y,t)\phi_Q(y)dy$$

(ii)

$$\begin{aligned}
&(H\rho\phi)_Q(x,t) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x \int_{\mathbb{R}^n} \tilde{\rho}(x,y,t)\phi_Q(y)dy + W(x,t)\int_{\mathbb{R}^n} \tilde{\rho}(x,y,t)\phi_Q(y)dy \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} [-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x + W(x,t)]\tilde{\rho}(x,y,t)\phi_Q(y)dy
\end{aligned}$$

(iii)

$$\begin{aligned}
&(\rho H\phi)_Q(x,t) \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} \tilde{\rho}(x,y,t)[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_y + W(y,t)]\phi_Q(y)dy \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} ([-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_y + W(y,t)]\tilde{\rho}(y,t))\phi_Q(y)dy
\end{aligned}$$

Damit folgt die Behauptung. ■

In einem zweiten Schritt erhalten wir eine Bewegungsgleichung für die Fouriertransformierte der Wignerfunktion.

Satz 4.1.2 (Fouriertransformierte der Wignerfunktion)
Die Fouriertransformierte der Wignerfunktion $\hat{F}^w = \mathcal{F}_0 F^w$ genügt der Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned}
&\partial_t\hat{F}^w(x,\zeta,t) + \frac{1}{m}i\nabla_\zeta \cdot \nabla_x\hat{F}^w(x,\zeta,t) \\
&\quad -\frac{i}{\hbar}(W(x+\frac{\hbar}{2}\zeta,t) - W(x-\frac{\hbar}{2}\zeta,t))\hat{F}^w(x,\zeta,t) = 0
\end{aligned}$$

Beweis

Nach Satz 3.5.2 ist die Fouriertransformierte der Wignerfunktion $\hat{F}^w = \mathcal{F}_0 F^w$ gegeben durch

$$\hat{F}^w(x,\zeta,t) = (2\pi)^{-n/2}\tilde{\rho}(x - \frac{\hbar}{2}\zeta, x + \frac{\hbar}{2}\zeta)$$

Damit gilt insbesondere

$$\nabla_\zeta \cdot \nabla_x \hat{F}^w(x,\zeta,t) = -(2\pi)^{-n/2}\frac{\hbar}{2}(\Delta_{x'} - \Delta_{y'})\tilde{\rho}(x',y',t)\Big|_{x' = x - \frac{\hbar}{2}\zeta,\, y' = x + \frac{\hbar}{2}\zeta}$$

Durch Variablentransformation in der von Neumann–Gleichung in Ortsdarstellung folgt

$$\begin{aligned} &i\hbar\partial_t \hat{F}^w(x,\zeta,t) \\ &= \frac{\hbar}{m}\nabla_\zeta \cdot \nabla_x \hat{F}^w(x,\zeta,t) + (W(x - \frac{\hbar}{2}\zeta,t) - W(x + \frac{\hbar}{2}\zeta,t))\hat{F}^w(x,\zeta,t) \end{aligned}$$

Damit erhält man die Behauptung. ■

Im dritten und letzten Schritt folgt damit die Bewegungsgleichung für die Wignerfunktion, die sogenannte Quanten–Liouville–Gleichung.

Satz 4.1.3 (Quanten–Liouville–Gleichung)

Die Wignerfunktion genügt der Bewegungsgleichung

$$\partial_t F^w(x,p,t) + \frac{1}{m}p \cdot \nabla_x F^w(x,p,t) - \theta[W]F^w(x,p,t) = 0$$

Dabei ist der Operator $\theta[W]$ der Pseudo–Differentialoperator (bzgl. p) mit Symbol

$$(\delta W)(x,\zeta,t) = \frac{i}{\hbar}(W(x + \frac{\hbar}{2}\zeta,t) - W(x - \frac{\hbar}{2}\zeta,t))$$

Beweis

Der Beweis ergibt sich unmittelbar durch Fouriertransformation aus der Bewegungsgleichung für $\hat{F}^w(x,p,t)$ ■

Bemerkung 4.1.4

Ein Pseudo–Differentialoperator θ mit Symbol δ ist gegeben durch

$$(\mathcal{F}_0\theta g)(\zeta) = \delta(\zeta)(\mathcal{F}_0 g)(\zeta)$$

Das bedeutet explizit für den obigen Operator

$$\theta[W]F^w(x,p,t) = (2\pi)^{-n}\int_{\mathbb{R}^{2n}}(\delta W)(x,\zeta,t)F^w(x,p',t)\exp(i(p-p')\cdot\zeta)dp'd\zeta$$

Ausführliche Darstellungen der Theorie der Pseudo–Differemtialoperatoren findet man in [18] und [19]. Wir begnügen uns mit einer Bemerkung.

Für den Multiindex

$$\alpha = (j_1, \dots, j_{|\alpha|}) \quad \text{mit} \quad j_i \in \{1, \dots, n\},\ i = 1, ..., |\alpha|$$

definiert man

$$\zeta^\alpha = \zeta_{j_1} \cdots \zeta_{j_{|\alpha|}}$$

Betrachtet man nun

$$\delta(\zeta) = \sum_{|\alpha| \le k} a_\alpha \zeta^\alpha$$

als Symbol eines Pseudo–Differentialoperators θ, so ist dieser ein echter Differentialoperator gegeben durch

$$\theta = \sum_{|\alpha| \le k} a_\alpha D^\alpha$$

mit

$$D^\alpha = D_{j_1} \cdots D_{j_{|\alpha|}} \quad \text{und} \quad D_j = \frac{1}{i}\partial_j$$

Dies rechtfertigt die auf den allgemeinen Fall erweiterte Schreibweise

$$\theta = \delta(\frac{1}{i}\nabla)$$

Die Quanten–Liouville–Gleichung lautet in dieser Schreibweise

$$\begin{aligned} &\partial_t F^w(x,p,t) + \frac{1}{m} p \cdot \nabla_x F^w(x,p,t) \\ &\quad - \frac{i}{\hbar}(W(x + \frac{\hbar}{2i}\nabla_p, t) - W(x - \frac{\hbar}{2i}\nabla_p, t))F^w(x,p,t) = 0 \end{aligned}$$

4.2 Vergleich mit der klassischen Theorie

Der Vergleich mit der klassischen Theorie soll durch zwei Fragen geleitet werden.

- Ergibt sich im üblichen formalen Grenzübergang $\hbar \to 0$ die klassische Liouvillegleichung aus der Quanten–Liouville–Gleichung?

- Können die Wignerfunktionen als klassische Verteilungsfunktionen betrachtet werden, die nur einer modifizierten Bewegungsgleichung genügen?

Wir begnügen uns zur Beantwortung der ersten Frage mit einer formalen Betrachtung auf der Ebene der Fouriertransformierten. Die Liouvillegleichung für die untersuchte Systemklasse lautete

$$\partial_t F(x,p,t) + \frac{1}{m} p \cdot \nabla_x F(x,p,t) - \nabla_x W(x,t) \cdot \nabla_p F(x,p,t) = 0$$

Durch Fouriertransformation $\hat{F} = \mathcal{F}_0 F$ erhält man

$$\partial_t \hat{F}(x,\zeta,t) + \frac{1}{m} i \nabla_\zeta \cdot \nabla_x \hat{F}(x,\zeta,t) - i \nabla_x W(x,t) \cdot \zeta \hat{F}(x,\zeta,t) = 0$$

Dies ist genau die Gleichung, die man durch formale Grenzwertbildung $\hbar \to 0$ aus der Bewegungsgleichung für die Fouriertransformierte der Wignerfunktion $\hat{F}^w$ erhält, da für $\hbar \to 0$ gilt

$$(\delta W)(x,\zeta,t) \to i \nabla_x W(x,t) \cdot \zeta$$

Das bedeutet auf der Ebene der Wignerfunktionen für $\hbar \to 0$

$$\theta[W] \to \nabla_x W \cdot \nabla_p$$

Für weitere Untersuchungen sei auf [17] S.48-50 und die dort angegebene Literatur verwiesen. Jedenfalls ist unsere erste Frage positiv zu beantworten und mit Hilfe der Quanten–Liouville–Gleichung können Quantenkorrekturen zur gewöhnlichen Liouvillegleichung in verschiedener Ordnung von $\hbar$ untersucht werden.

Genauso klar ist die zweite Frage negativ zu beantworten, da der Wignerfunktion eine grunsätzliche Eigenschaft klassischer Wahrscheinlichkeitsverteilungen fehlt. Wignerfunktionen nehmen nämlich i.a. auch negative Funktionswerte an. Etwas genauer gesprochen gilt zu einem festen Zeitpunkt t der folgende Satz (siehe [20]):

Satz 4.2.1 (Positivität)
Sei F^w die Wignerfunktion zu einem statistischen Operator $\rho = P_\psi$, $\|\psi\| = 1$ (reine Gesamtheit), d.h.

$$F^w(x,p) = (2\pi)^{-n} \int_{\mathbb{R}^n} \exp(ip \cdot \zeta) \psi_Q(x - \frac{\hbar}{2}\zeta) \psi_Q^*(x + \frac{\hbar}{2}\zeta) d\zeta$$

Dann gilt $F^w \geq 0$ auf dem gesamten Definitionsbereich genau dann, wenn ψ von folgender Form ist:

$$\psi_Q(x) = \exp(-\frac{1}{2}x^T \Lambda x - \alpha \cdot x + \beta)$$

mit einer $n \times n$-Matrix Λ mit positiv definitem symmetrischen Realteil, $\alpha \in \mathbb{C}^n$ und $\beta \in \mathbb{C}$.

Ein kurzer Beweis für den Fall $n = 1$ findet man in [17].

Lösungen der Quanten–Liouville–Gleichung von dieser Form für alle Zeiten, findet man aber nur für quadratische Potentiale. I.a. hat man es also auch mit negativen Funktionswerten zu tun, und kann daher die Wignerfunktionen nicht als Verteilungsfunktionen im Γ–Raum deuten. In der Literatur wird daher teilweise der Begriff Quasiverteilung verwendet. Der mathematische Formalismus zur Berechnung quantenmechanischer Erwartungswerte durch Integration im Γ–Raum ist von diesem Deutungsproblem natürlich völlig unberührt.

4.3 Quantenmechanische Hierarchie

Voraussetzung 4.3.1
Die betrachteten $\tilde{\rho}(x, y, t)$ seien symmetrisch, d.h. für jede Permutation σ der Indexmenge $\{1, \ldots, N\}$ gilt

$$\tilde{\rho}(x, y, t) = \tilde{\rho}(x_1, \ldots, x_N, y_1, \ldots, y_N, t) = \tilde{\rho}(x_{\sigma(1)}, \ldots, x_{\sigma(N)}, y_{\sigma(1)}, \ldots, y_{\sigma(N)}, t)$$

Bemerkung 4.3.2

(i) Betrachtet man die von Neumann–Gleichung in Ortsdarstellung, so ist leicht nachzuweisen, daß die obige Eigenschaft in der zeitlichen Entwicklung erhalten bleibt, da W die entsprechende Symmetrieeigenschaft hat (V wurde symmetrisch gewählt).

(ii) Die Symmetrie von $\tilde{\rho}$ ist für die Behandlung ununterscheidbarer Teilchen automatisch erfüllt. Es sei aber betont, daß wir nach wie vor unterscheidbare Teilchen betrachten, d.h. die zugrundeliegende Quantenmechanik findet auf dem Tensorprodukt der Einteilchenräume statt und nicht nur auf dem symmetrischen oder antisymmetrischen Teilraum.

(iii) Die Symmetrie von $\tilde{\rho}$ ist äquivalent zur Symmetrie der zugehörigen Wignerfunktion.

Definition 4.3.3 (reduzierte Dichtematrizen)
Für symmetrische $\tilde{\rho}$ bezeichnet man

$$\begin{aligned}&\tilde{\rho}_s(x_1,\dots,x_s,y_1,\dots,y_s,t)\\ &\quad= \int_{\mathbb{R}^{3(N-s)}} \tilde{\rho}(x_1,\dots,x_s,z_{s+1},\dots,z_N,y_1,\dots,y_s,z_{s+1},\dots,z_N)dz_{s+1}\cdots dz_N\end{aligned}$$

für $s=1,\dots,N$ als reduzierte Dichtematrix.

Als Folge der von Neumann–Gleichung in Ortsdarstellung (Satz 4.1.1) erhält man, geeignetes Abfallverhalten von $\tilde{\rho}$ und hinreichende Differentiationseigenschaften vorausgesetzt:

Satz 4.3.4 (quantenmechanische Hierarchie)
Unter den angesprochenen Voraussetzungen gilt

$$\begin{aligned}i\hbar\partial_t\tilde{\rho}_s &= -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{j=1}^{s}(\Delta_{x_j}-\Delta_{y_j})\tilde{\rho}_s + \sum_{j=1}^{s}(U(x_j,t)-U(y_j,t))\tilde{\rho}_s\\ &\quad +\frac{1}{2}\sum_{\substack{j,k=1\\ j\neq k}}^{s}(V(x_j,x_k)-V(y_j,y_k))\tilde{\rho}_s\\ &\quad +(N-s)\sum_{j=1}^{s}\int_{\mathbb{R}^3}(V(x_j,z)-V(y_j,z))\,\tilde{\rho}_{s+1}\Big|_{x_{s+1}=y_{s+1}=z}dz\end{aligned}$$

für $s=1,\dots,N$ mit der formalen Abkürzung $\tilde{\rho}_{N+1}=0$.

Es sei erwähnt, daß es nicht notwendig ist, die obigen Zusammenhänge in einer Darstellung zu formulieren. Stattdessen kann man darstellungsfrei den Begriff der reduzierten Spur einführen und die Hierarchie elegant im Stil der von Neumann–Gleichung formulieren. Dies ist z.B. in [15] ausgeführt. Da wir aber die obigen Hierarchiegleichungen in Zusammenhang mit der Wignertransformation behandeln wollen, ist die Ortsdarstellung geeigneter.

4.4 Quanten–BBGKY–Hierarchie

Definition 4.4.1 (reduzierte Wignerfunktionen)
Für symmetrische F^w (also symmetrische $\tilde{\rho}$) bezeichnet man

$$F_s^w(x_1,\ldots,x_s,p_1,\ldots,p_s,t) = \int_{\mathbb{R}^{6(N-s)}} F^w(x,p,t)dx_{s+1}\cdots dx_N dp_{s+1}\cdots dp_N$$

als reduzierte Wignerfunktion.

Als Folge von Satz 3.5.2 und Definition 4.3.3 gilt

Satz 4.4.2 (reduzierte Wignerfunktionen)
Ist F^w die Wignerfunktion zu $\tilde{\rho}$, so ist f_s^wdie Wignerfunktion zu $\tilde{\rho}_s$,d.h.

$$\begin{aligned}
&F_s^w(x_1,\ldots,x_s,p_1,\ldots,p_s,t)\\
&= (2\pi)^{-3s/2}\int_{\mathbb{R}^{3s}} \exp(i\sum_{j=1}^{s} p_j\cdot\zeta_j)\hat{F}_s^w(x_1,\ldots,x_s,\zeta_1,\ldots,\zeta_s,t)d\zeta_1\cdots d\zeta_s
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
&\hat{F}_s^w(x_1,\ldots,x_s,\zeta_1,\ldots,\zeta_s,t)\\
&= (2\pi)^{-3s/2}\tilde{\rho}_s(x_1-\frac{\hbar}{2}\zeta_1,\ldots,x_s-\frac{\hbar}{2}\zeta_s,x_1+\frac{\hbar}{2}\zeta_1,\ldots,x_s+\frac{\hbar}{2}\zeta_s,t)
\end{aligned}$$

für $s=1,\ldots,N$

Bei der Ableitung von Bewegungsgleichungen für die F_s^w stehen damit zwei Wege zur Verfügung: Reduktion auf Grundlage der Quanten–Liouville–Gleichung (Satz 4.1.3) oder eine Wignertransformation der quantenmechanischen Hierarchie (Satz 4.3.4). Auf beiden Wegen gelangt man zur sogenannten Quanten–BBGKY–Hierarchie.

Definition 4.4.3 (Pseudo–Differentialoperatoren zu U und V)
$\theta[U]$ bezeichnet den Pseudo–Differentialoperaor in $\mathbb{R}^3$ zum Symbol

$$(\delta U)(x,\zeta,t) = \frac{i}{\hbar}(U(x+\frac{\hbar}{2}\zeta,t) - U(x-\frac{\hbar}{2}\zeta,t))$$

und analog $\theta[V]$ den Pseudodifferentialoperator in $\mathbb{R}^6$ zum Symbol

$$(\delta V)(x_1,\zeta_1,x_2,\zeta_2) = \frac{i}{\hbar}(V(x_1+\frac{\hbar}{2}\zeta_1,x_2+\frac{\hbar}{2}\zeta_2) - V(x_1-\frac{\hbar}{2}\zeta_1,x_2-\frac{\hbar}{2}\zeta_2))$$

Falls $\theta[U]$ und $\theta[V]$ auf Funktionen mit weiteren Variablen wirken, werden die ausgezeichneten Variablen durch einen Index gekennzeichnet. Die unten verwendete Schreibweise dürfte selbsterklärend sein.

Satz 4.4.4 (Quanten–BBGKY–Hierarchie)
Bei hinreichendem Abfallverhalten und Differentiationseigenschaften gilt

$$\begin{aligned}\partial_t F_s^w + \sum_{j=1}^{s} \frac{1}{m} p_j \cdot \nabla_{x_j} F_s^w - \sum_{j=1}^{s} \theta[U]_j F_s^w \\ -\frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j\neq k}}^{s} \theta[V]_{jk} F_s^w - (N-s) \sum_{j=1}^{s} \int_{\mathbb{R}^6} \theta[V]_{js+1} F_{s+1}^w dx_{s+1} dp_{s+1} = 0\end{aligned}$$

für $s = 1, \ldots, N$ mit der formalen Abkürzung $F_{N+1}^w = 0$.

Beweis (Skizze)
Die beiden möglichen Beweisstrategien wurden bereits aufgezeigt. Startet man bei der Quanten–Liouville–Gleichung, so führt

$$\theta[W] F^w = \sum_{j=1}^{N} \theta[U]_j F^w + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j\neq k}}^{N} \theta[V]_{jk} F^w$$

mit $F^w = F_N^w$ unmittelbar auf die Gleichung für $s = N$. Alle weiteren Gleichungen für $s < N$ folgen durch Integration. ∎

Bemerkung 4.4.5
Der formale Grenzübergang $\hbar \to 0$ liefert analog zur Argumentation bei der Quanten–Liouville–Gleichung

$$\theta[U]_j \to \mathcal{D}_j = \nabla_{x_j} U(x_j, t) \cdot \nabla_{p_j}$$

und

$$\theta[V]_{jk} \to \mathcal{D}_{jk} = \nabla_{x_j} V(x_j, x_k) \cdot \nabla_{p_j} + \nabla_{x_k} V(x_j, x_k) \cdot \nabla_{p_k}$$

Damit erhält man die klassische BBGKY–Hierarchie.

4.5 Grundlagem kinetischer Theorien

Mit den letzten Abschnitten ist natürlich bereits ein guter Schritt in Richtung quantenmechanisch fundierter kinetischer Theorien getan. Trotzdem kann man die bisherigen Überlegungen auch nur als eine besondere Art der Darstellung der quantenmechanischen Dynamik betrachten. Nun wird analog zu den Überlegungen in der klassischen Theorie der Zusammenhang zu kinetischen Gleichungen hergestellt. Die Behandlung von Stoßprozessen sparen wir dabei völlig aus.

In Kapitel 2 wurden die mikroskopischen Boltzmanndichten f^m und durch Mollifying dieser mikroskopischen Dichten die Boltzmannobservablen f^B als Familien von klassischen Observablen eingeführt.

Mit dem durch die Wignertransformation festgelegten Korrespondenzprinzip lassen sich die zugehörigen Familien von Operatoren in der Quantenmechanik auffinden und ihre Erwartungswerte in beliebigen Gesamtheiten berechnen. Sehr viel einfacher kommt man aber wie folgt zum Ziel: Man etabliert im Rahmen der Quantenmechanik makroskopische Gesamtheiten analog zum Vorgehen in der klassischen Theorie. Die Berechnung der Erwartungswerte der kinetischen Observablen erfolgt dann über die Wignertransformation und es gilt wie in der klassischen Theorie (vgl. Satz 2.5.1) der folgende Satz:

Satz 4.5.1 (Boltzmann– und reduzierte Wahrscheinlichkeitsdichte)
Sei F^w die Wignerfunktion zu einer makroskopischen Gesamtheit und f die zugehörige Boltzmanndichte, so gilt

(i)

$$NF_1^w(w,t) = \int_{\mathbb{R}^{6N}} f^m(w,x,p)F^w(x,p,t)dxdp$$

(ii)

$$f(w,t) = N\int_{\mathbb{R}^6} G(w-w')F_1^w(w',t)dw'$$

Die Bedeutung der Quanten–BBGKY–Hierarchie für quantenmechanisch fundierte kinetische Theorien entspricht damit der Bedeutung der gewöhnlichen

BBGKY–Hierarchie im klassischen Rahmen. Der Schritt zu kinetischen Theorien erfolgt wie in der klassischen Theorie durch Abschluß der Hierarchie und Skalierungsverfahren.

Die Verschmierung von F_1^w zur Berechnung von f bietet die Möglichkeit durch geeignete Wahl der Verschmierer die Nichtnegativität von f sicherzustellen. Dies führt auf die sogenannten Husimi–Verteilungen. Wir wollen hier auf dieses Problem nicht weiter eingehen und verweisen auf [15]. Nachfolgend werden stattdessen f und NF_1^w identifiziert (Glattheitsannahme).

4.6 Abschluß der Hierarchie

Um also in diesem Rahmen zu einer kinetischen Theorie zu gelangen, verbleibt wie in der klassischen Theorie die Aufgabe, die Hierarchie geeignet abzuschließen. Dazu gibt es im wesentlichen zwei Strategien: Entweder versucht man alle F_s^w in Termen von F_1^w auszudrücken, derart daß die gesamte Hierarchie im Limes $N \to \infty$ sich zu einer einzigen Bestimmungsgleichung für F_1^w reduziert (siehe dazu [17]). Oder man begnügt sich — wie wir nachfolgend — mit einem Ansatz, der F_2^w in Abhängigkeit von F_1^w liefert, so daß die unterste Gleichung der Hierarchie zu einer Bestimmungsgleichung für F_1^w wird. Naheliegend ist es in Analogie zum klassischen Fall eine Produktannahme (chaos assumption) zu betrachten:

$$F_2^w(x_1, x_2, p_1, p_2, t) = F_1^w(x_1, p_1, t) F_1^w(x_1, p_1, t)$$

Dies ist wegen der Eigenschaften der Wignertransformation auf der Ebene der reduzierten Dichtematrizen äquivalent zu

$$\tilde{\rho}_2(x_1, x_2, y_1, y_2, t) = \tilde{\rho}_1(x_1, y_1, t) \tilde{\rho}_1(x_1, y_1, t)$$

Diese als Hartree–Ansatz bekannte Abschlußrelation hat offenbar die richtigen Symmetrie– und Normierungseigenschaften, wobei nochmals erwähnt sei, daß wir an der Unterscheidbarkeit der Teilchen festhalten.

Mit einigen trivialen Umformungen der Pseudo–Differentialoperatoren erhält man aus der Produktannahme und der Glattheitsannahme $f = NF_1^w$ eine kinetische Gleichung:

Satz 4.6.1 (kinetische Gleichung)
Unter den angegebenen Annahmen und Voraussetzungen gilt für die Boltzmanndichten

$$\partial_t f + \frac{1}{m} p \cdot \nabla_x f - \theta[\bar{V}]f = 0$$

Dabei bezeichnet $\theta[\bar{V}]$ den Pseudo–Differentialoperator in $\mathbb{R}^3$ mit Symbol

$$(\delta\bar{V})(x,\zeta,t) = \frac{i}{\hbar}(\bar{V}(x+\frac{\hbar}{2}\zeta,t) - \bar{V}(x-\frac{\hbar}{2}\zeta,t))$$

Das selbstkonsistente Potential $\bar{V}$ hängt über die Teilchenzahldichte n von f ab:

$$\bar{V}(x,t) = U(x,t) + \epsilon(N)\int_{\mathbb{R}^3} V(x,y)n(y,t)\,dy \quad \text{mit} \quad n(x,t) = \int_{\mathbb{R}^3} f(x,p,t)dp$$

Der Parameter $\epsilon(N) = 1 - 1/N$ geht für $N \to \infty$ gegen 1.

Diese Gleichung wird häufig etwas irreführend als 1–Teilchen–Quanten–Liouville–Gleichung bezeichnet.

Für den Fall elektrostatischer Wechselwirkung kann man explizit das Coulomb–Potential einsetzten oder das Potential selbstkonsistent durch eine Poissongleichung festlegen. Die obige kinetische Gleichung wird dann als Quanten–Vlasov–Gleichung oder auch als Wigner–Poisson–System bezeichnet. Im Limes $\hbar \to 0$ erhält man mit der schon mehrfach verwendeten Argumentation die klassische Vlasovgleichung (Vlasov–Poisson–System).

Selbstverständlich kann man auch die zugehörige Gleichung für die reduzierten Dichtematrizen $\tilde{\rho}_1$ betrachten. Es gilt

Satz 4.6.2 (kinetische Gleichung: alternative Formulierung)
Für die der reduzierten Wignerfunktion f/N zugeordnete Dichtematrix $\tilde{\rho}_1$ gilt äquivalent zur obigen kinetischen Gleichung

$$i\hbar\partial_t\tilde{\rho}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_x - \Delta_y)\tilde{\rho}_1 + (\bar{V}(x,t) - \bar{V}(y,t))\tilde{\rho}_1$$

mit

$$\bar{V}(x,t) = U(x,t) + (N-1)\int_{\mathbb{R}^3} V(x,z)\tilde{\rho}_1(z,z,t)dz$$

Es ist schließlich sogar möglich zu einer Schrödingergleichung mit selbstkonsistenter Wechselwirkung überzugehen:

Satz 4.6.3 (selbstkonsistente Schrödingergleichung)
Seien ψ_k, $k \in \mathbb{N}$ Lösungen von

$$i\hbar\partial_t\psi_k = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x\psi_k + \bar{V}(x,t)\psi_k(x,t)$$

mit

$$\bar{V}(x,t) = U(x,t) + (N-1)\sum_{j=1}^{\infty}\omega_j\int_{\mathbb{R}^3}|\psi_j|^2(z,t)V(x,z)dz$$

So erfüllt die zugehörige Dichtematrix

$$\tilde{\rho}_1(x,y,t) = \sum_{k=1}^{\infty}\omega_k\psi_k(x,t)\psi_k^*(y,t)$$

die Gleichung aus Satz 4.6.2.

Für den Fall der Coulombwechselwirkung kann man wieder mit der Poisson–Gleichung koppeln. Das entsprechende Gleichungssystem wird als Schrödinger–Poisson–System bezeichnet. Interessanterweise arbeiten Existenz– und Eindeutigkeitsbeweise für Wigner–Poisson mit der Äquivalenz zu Schrödinger–Poisson [21].

4.7 Ununterscheidbare Teilchen

Zum Abschluß sollen noch einige Bemerkungen zu Systemen ununterscheidbarer Teilchen gemacht werden. Bisher hatten wir mehrfach betont, daß wir ausschließlich Systeme mit unterscheidbaren Teilchen betrachten. Unter dieser zumindest für makroskopische Systeme künstlichen Annahme konnten wir unsere quantenmechanischen Betrachtungen im Raum

$$\mathcal{H}_N = \bigotimes^N \mathcal{H}_1$$

(also dem Tensorprodukt der 1–Teilchenräume) durchführen. Bei ununterscheidbaren Teilchen ist aber nach den Axiomen der Quantenmechanik der Raum $\mathcal{H}_N^+$ für Bosonen und $\mathcal{H}_N^-$ für Fermionen grundlegend. Diese sind mit Hilfe der Projektoren $S_N^\pm$ als Teilräume von $\mathcal{H}_N$ definiert

$$\mathcal{H}_N^\pm = S_N^\pm[\mathcal{H}_N]$$

mit

$$S_N^{\pm} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} (\pm 1)^{J(\sigma)} U(\sigma)$$

Summiert wird dabei über alle Permutationen σ von $\{1, \ldots, N\}$, wobei $J(\sigma) = 1$ für ungerade Permutationen und $J(\sigma) = 0$ für gerade Permutationen gesetzt wird. Die unitären Operatoren $U(\sigma)$ sind definiert durch

$$U(\sigma)\phi_1 \otimes \cdots \otimes \phi_N = \phi_{\sigma^{-1}(1)} \otimes \cdots \otimes \phi_{\sigma^{-1}(N)}$$

und lineare Fortsetzung auf $\mathcal{H}_N$.

Mit der Festlegung des grundlegenden Hilbertraumes ist aus axiomatischer Sicht alles über die Besonderheiten bei der Behandlung von Systemen ununterscheidbarer Teilchen gesagt: Die statistischen Operatoren und Observablen müssen über $\mathcal{H}_N^{\pm}$ definiert werden. Da damit das gesamte Kalkül in $\mathcal{H}_N^{\pm}$ abläuft, könnte man mit Blick auf die bisherigen Betrachtungen sehr viel neue Arbeit erwarten. Folgende leicht zu beweisende Feststellung erleichtert das Leben aber ungemein:

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_N^{+} \oplus \mathcal{H}_N^{-} \oplus \bar{\mathcal{H}}_N$$

mit

$$\bar{\mathcal{H}}_N = \bar{S}_N[\mathcal{H}_N] \qquad \bar{S}_N = 1 - S_N^{+} - S_N^{-}$$

Sie ist die Grundlage für folgende Überlegungen:

(i) Betrachten wir einen statistischen Operator ρ auf $\mathcal{H}_N^{\pm}$, so gilt

$$\rho = \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k P_{\psi_k}, \quad \psi_k \in \mathcal{H}_N^{\pm}, \|\psi_k\| = 1$$

d.h. ρ wird trivial auf $\mathcal{H}_N$ fortgesetzt, so daß

$$\rho = S_N^{\pm} \rho S_N^{\pm} = \rho S_N^{\pm} = S_N^{\pm} \rho$$

(ii) Observable A sind häufig auf $\mathcal{H}_N$ definiert. Man bezeichnet sie als sinnvolle Observable (zur Beschreibung ununterscheidbarer Teilchen), wenn

$$A[\mathcal{H}_N^{\pm}] \subset \mathcal{H}_N^{\pm}$$

Diese Forderung ist äquivalent zu

$$A = S_N^{+} A S_N^{+} + S_N^{-} A S_N^{-} + \bar{S}_N A \bar{S}_N$$

Eine hinreichende Bedingung ist

$$A = U(\sigma)AU^{-1}(\sigma)$$

für alle Permutationen σ von $\{1, \ldots, N\}$. Das entspricht für die korrespondierenden klssischen Observablen gewöhnlicher Permutationsinvarianz. Für die Berechnung von Mittelwerten sinnvoller Observabler gilt

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_N^\pm}(A|_{\mathcal{H}_N^\pm}\rho) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_N}(A\rho S_N^\pm) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_N}(A\rho)$$

(iii) Sei eine Observable auf $\mathcal{H}_N^\pm$ gegeben, so setzt man kanonisch auf $\mathcal{H}_N$ fort:

$$\tilde{A} = AS_N^\pm$$

Es gilt dann

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_N^\pm}(A\rho) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_N}(AS_N^\pm \rho S^\pm) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_N}(\tilde{A}\rho)$$

In allen relevanten Fällen kann man also wie bisher auf $\mathcal{H}_N$ die Erwartungswerte berechnen. Für unsere Betrachtungen zur Wignertransformation und zur Quanten–BBGKY–Hierarchie ändert sich nichts, da die Boltzmannobservablen sinnvolle Observable im obigen Sinne sind. Es ist aber zu beachten, daß die zugrundeliegenden statistischen Operatoren ρ auf $\mathcal{H}_N^\pm$ definiert sind.

In Ortsdarstellung bedeutet das folgende Form für die Dichtematrix und die zugehörigen reduzierten Dichtematrizen

$$\tilde{\rho}_s(x_1, \ldots, x_s, y_1, \ldots y_s) = \sum_{k=1}^{\infty} \omega_{sk}\psi_{sk}(x_1, \ldots, x_s)\psi_{sk}^*(y_1, \ldots, y_s)$$

mit der Symmetrieeigenschaft

$$\psi_{sk}(x_1, \ldots, x_j, \ldots, x_k, \ldots, x_s) = \pm\psi_{sk}(x_1, \ldots, x_k, \ldots, x_j, \ldots, x_s)$$

Für Fermionen (-) folgt: $j \neq k$, $x_j = x_k$ impliziert

$$\psi_{sk}(x_1, \ldots, x_j, \ldots, x_k, \ldots, x_s) = 0$$

Diese Eigenschaft bezeichnet man häufig als Pauli–Verbot.

Das hat nun für unsere kinetische Theorie eine unangenehme Konsequenz. Das Pauli–Verbot steht offenbar im Gegensatz zum Hartree–Ansatz. Für Fermionen ersetzt man daher den Hartree–Ansatz durch den sogenannten Hartree–Fock–Ansatz:

$$\tilde{\rho}_2(x_1, x_2, y_1, y_2, t) = \tilde{\rho}_1(x_1, y_1, t)\tilde{\rho}_1(x_2, y_2, t) - \tilde{\rho}_1(x_1, y_2, t)\tilde{\rho}_1(x_2, y_1, t)$$

Dies führt zu einem zusätzlichen Term in der kinetischen Gleichung und ihren äquivalenten Formen, den Gleichungen für $\tilde{\rho}_1$ und die $\psi_k = \psi_{1k}$. Dieser wird als Austauschwechselwirkung bezeichnet und ist Ausgangspunkt für weitere Überlegungen und Näherungen (siehe [22]).

Literaturverzeichnis

[1] A. Böhm. *Quantum Mechanics.* Springer, New York, Heidelberg, Berlin, 1979.

[2] E. Fick. *Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie.* Akademische Verlagsgesellschaft, Wiesbaden, 4th edition, 1979.

[3] A. Messiah. *Quantenmechanik.* Walter de Gruyter, Berlin, NewYork, 1976.

[4] J. Schröter. *Vorlesung über Quantenmechanik.* Universität Paderborn.

[5] M. Reed and B. Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics.* Academic Press, London, 1975.

[6] K. Kraus and J. Schröter. Expectation values of unbounded observables. *Int. J. Theor. Phys.*, 7:431, 1973.

[7] C.R. Putnam. *Commutation Properties of Hilbert Space and Related Topics.* Springer, Berlin, 1967.

[8] C. Cercignani, R. Illner, and M. Pulvirenti. *The Mathematical Theory of Dilute Gases.* Springer, NewYork, 1994.

[9] J. Schröter. The microscopic background of thermodynamics. *Journal of Non–Equilibrium Thermodynamics*, 11:315–326, 1985.

[10] C. Cercignani. On the Boltzmann equation for rigid spheres. *Transport Theory and Statistical Physics*, 2:211–225, 1972.

[11] O.E. Lanford III. Time evolution of large classical systems. In J. Moser, editor, *Dynamical Systems, Theory and Applications, Battelle Seattle 1974 Rencontres*, Lecture Notes in Physics 38, pages 1–111. Springer, Berlin Heidelberg New York, 1975.

[12] E. Wigner. On the quanten correction for thermodynamic equilibrium. *Physical Review*, 40:749, 1932.

[13] H. Weyl. *The Theory of Groups and Quantum Mechanics.* Dover Publications, New York, 1950.

[14] K. Imre, E. Özimir, M. Rosenbaum, and P.F. Zweifel. Wigner method in quantum statistical mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, 8:1097–1108, 1967.

[15] T. Hövelmeyer. *Diplomarbeit: Der Grundbegriff der kinetischen Theorie nach der Quantenmechanik.* Universität Paderborn, 1993.

[16] M. Hillery, R.F. O'Connell, M.O. Scully, and E.P. Wigner. Distribution functions in physics: Fundamentals. *Physics Reports*, 106:121–167, 1984.

[17] P.A. Markowich, C.A. Ringhofer, and C. Schmeiser. *Semiconductor Equations.* Springer, Wien New York, 1990.

[18] M. Taylor. *Pseudo Differential Operators.* Springer, Berlin Heidelberg New York, 1974.

[19] A. Shubin. *Pseudodifferential Operators and Spectral Theory.* Springer, New York, 1986.

[20] R.L. Hudson. When is the wigner quasiprobability nonnegative. *Reports on Mathematical Physics*, 6:249–252, 1974.

[21] F. Brezzi and P.A. Markowich. The three–dimensional Wigner–Poisson problem: Existence, uniqueness and approximation. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 14:35–61, 1991.

[22] H. Neunzert. The nuclear Vlasov equation. Methods and results that can(not) be taken over from the classical case. *Il Nuovo Cimento*, 87A:151–161, 1985.