

Zeit-Observable auf Bindungszuständen

Bolko Beutner
II. Institut für Theoretische Physik
Universität Hamburg

Diplomarbeit

10. März 2003

Gutachter der Diplomarbeit

Prof. Dr. K. Fredenhagen

Prof. Dr. G. Mack

Abstract

The subject of this diploma thesis is the construction of a quantum mechanical Time-Observable on bound states. On the basis of Brunetti and Fredenhagen's work[3] such observables are defined as positive operator valued measures. Almost periodicity as a property of the time-evolution of bound states is used to obtain probability measures. The theory of almost periodic functions allows to construct a compactification of time such that it is possible to give sense to a normalisation integral over time.

Zusammenfassung

Gegenstand dieser Diplomarbeit ist die Konstruktion quantenmechanischer Zeit-Observable auf Bindungszuständen. Ausgehend von einer Arbeit von Brunetti und Fredenhagen[3] werden solche Observable als positiv operatorwertiges Maße definiert. Um Wahrscheinlichkeitsmaße zu erhalten, wird die Fastperiodizität einer Zeitentwicklung von Bindungszuständen ausgenutzt. Die Theorie der fastperiodischen Funktionen erlaubt es, eine Kompaktifizierung der Zeit zu konstruieren, so dass es möglich wird, Normierungsintegralen über der Zeit einen Sinn zu geben.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Einführung	3
2.1	Observable als positiv operatorwertige Maße	3
2.1.1	Operatorwertige Maße	3
2.2	Zeit-Observable	8
2.2.1	Konstruktion einer Zeit-Observable	9
2.2.2	Streuzustände	11
2.2.3	Bindungszustände	15
3	Fastperiodische Funktionen	17
3.1	Eigenschaften fastperiodischer Funktionen	17
3.2	Die Algebra der fastperiodischen Funktionen	18
3.2.1	Die Struktur kommutativer C^* -Algebren	19
3.2.2	Die Bohrkompaktifizierung von \mathbb{R}	21
3.3	Konstruktion einer fastperiodischen Kompaktifizierung von \mathbb{R} . .	25
3.3.1	Die Topologie auf \mathbb{R} und seiner fastperiodischen Kompaktifizierung \mathbb{T}^n	28
4	Beispiele für gebundene Systeme mit Zeitobservable	31
4.1	Der harmonische Oszillator	31
4.2	Der Potentialkasten	36
5	Zeitobservable auf Bindungszuständen	43
5.1	Definition	43
5.2	Anwendung	45
5.2.1	Mögliche experimentelle Konsequenzen	46
6	Zusammenfassung und Ausblick	47

Kapitel 1

Einleitung

Sowohl in der klassischen, als auch in der Quantenphysik spielen Zeitmessungen eine besondere experimentelle Rolle. Während eine theoretische Beschreibung von Zeitmessungen in der klassischen Physik keine besonderen Probleme aufwirft, ist es im Rahmen der Quantenmechanik nicht ohne weiteres möglich, den Begriff der Messgröße Zeit genau zu erklären.

In der Quantenmechanik wird eine Observable in der Regel durch einen selbstadjungierten Operator auf einem Zustandshilbertraum beschrieben. Diesen Operatoren können nun die Erwartungswerte und Wahrscheinlichkeitsverteilungen einer Messgröße in einem Zustand zugeordnet werden. Dieses Verfahren hat sich als sehr erfolgreich erwiesen, so ist es z.B. möglich, das Spektrum des Wasserstoffatoms mit großer Genauigkeit zu berechnen.

Nun ist es im allgemeinen nicht möglich, einen selbstadjungierten Operator zu finden, welcher Zeitmessungen beschreibt [1]. Diese Tatsache führt zu der oft vertretenen Meinung, die Zeit sei keine echte quantenmechanische Observable, sondern lediglich ein Parameter. Da Zeitmessungen jedoch möglich sind und in vielen Experimenten eine wichtige Rolle spielen, scheint dieser Ansatz jedoch nicht wirklich befriedigend zu sein. Auch verschiedene andere Größen, wie z.B. der Radialimpuls in kugelsymmetrischen Quantensystemen, lassen sich nicht als selbstadjungierte Operatoren darstellen. Es liegt also nahe einen anderen Ausweg aus diesem Problem zu suchen.

Wie kann nun eine Beschreibung der Zeit als quantenmechanische Observable aussehen ?

Es ist möglich den Begriff einer Observablen in der Quantenmechanik zu verallgemeinern, so dass nicht nur selbstadjungierte Operatoren, sondern auch allgemeinere Objekte, die positiv operatorwertigen Maße einer Messvorschrift zugeordnet werden können [2]. Die Erwartungswerte dieser positiv operatorwertigen Maße können als eine Wahrscheinlichkeitsverteilung interpretiert werden. Sie geben an, zu welcher Wahrscheinlichkeit eine Messung einem bestimmten Wert ergibt.

Durch die Einführung von positiv operatorwertigen Maßen ist es nun möglich, auch die Zeit als quantenmechanische Observable aufzufassen. Es stellt sich also die Aufgabe, ein solches Maß zu konstruieren, welches sinnvoll zur Beschreibung von Zeitmessungen herangezogen werden kann. In Verbindung mit einem be-

stimmten Ereignis, wie z.B. die Anwesenheit eines Teilchens in einem Detektor, kann ein solches Maß gefunden werden[3]. Ein solches positiv operatorwertiges Maß beschreibt eine Wahrscheinlichkeitsverteilung in der Zeit. Diese beschreibt, wie wahrscheinlich das betrachtete Ereignis zu einem bestimmten Zeitpunkt ist. Ohne auf Details einzugehen, sei erwähnt, dass es mit Hilfe dieser Formulierung von Zeit-Observablen ebenfalls möglich ist, einen Beweis von Zeit-Energie Unschärferelationen zu finden. Die Struktur von positiv operatorwertigen Maßen führt sogar zu einer weiteren Unschärferelation. Diese beschreibt eine intrinsische Unschärfe von alleinigen Zeitmessungen[4].

Es stellt sich jedoch heraus, dass ein solches Maß zunächst nur für Streuzustände gefunden werden kann. Das Problem, welches auf Bindungszuständen auftaucht, hat damit zu tun, dass es nicht möglich ist, eine Normierung solcher Wahrscheinlichkeitsmaße in der Zeit zu definieren. Die übliche Messbarkeitsstruktur auf den reellen Zahlen, der Zeit, führt zu nicht existierenden Normierungsintegralen.

Ziel dieser Arbeit ist die Konstruktion einer Zeit-Observable für Bindungszustände. Wir werden dabei der Konstruktion einer quantenmechanischen Zeit-Observablen von R. Brunetti und K. Fredenhagen folgen [3] und diese dahingehend verallgemeinern, dass eine Beschreibung von Zeitmessungen auf Bindungszuständen möglich wird. Basierend auf der Theorie der fastperiodischen Funktionen werden wir eine alternative Messbarkeitsstruktur auf der Zeit einführen, so dass auch die "Gesamtdauer" fastperiodischer Vorgänge handhabbar wird.

Im Gegensatz zur Arbeit von D. T. Pegg [22] werden wir uns hier nicht auf Bindungszustände beschränken, welche rationale Verhältnisse zwischen den Eigenwerten der Energieeigenzustände aufweisen. Vielmehr betrachten wir eine fastperiodische Zeitevolution der betrachteten Quantensysteme, in denen keine rationalen Abhängigkeiten vorliegen.

In dieser Arbeit wird zunächst der Begriff der Observable als positiv operatorwertiges Maß eingeführt. Es folgt eine Diskussion von quantenmechanischen Zeit-Observablen und der damit verbundenen Probleme. Die Behandlung von Bindungszuständen führt dann auf die Theorie der fastperiodischen Funktionen, welche dann im Rahmen des Begriffes von C^* -Algebren vorgestellt wird. Bevor wir am Ende Zeit-Observable auf Bindungszuständen einführen, betrachten wir noch Beispiele gebundenen Quantensysteme.

Kapitel 2

Einführung

2.1 Observable als positiv operatorwertige Maße

Untersuchen wir zunächst, wie Observable in der Quantenmechanik als Maße behandelt werden können. Dieser Ansatz hat den Vorteil, dass er sich verallgemeinern lässt und somit eine größere Klasse von quantenmechanischen Observablen zulässt, als die übliche Darstellung durch selbstadjungierte Operatoren. Wir suchen nach einer Vorschrift, einem quantenmechanischen Zustand φ und einer beobachtbaren Größe O , eine Zahl, den Erwartungswert einer Messung von O im Zustand φ , zuzuordnen.

Um die Möglichkeit, Observable durch Maße auszudrücken, zu verdeutlichen, betrachten wir beispielsweise den Ortsoperator X der üblichen Schrödinger Quantenmechanik. Der Erwartungswert dieses Operators, in einem Zustand, der durch eine Lösung der Schrödingergleichung φ beschrieben wird, hat folgende Gestalt :

$$\langle X \rangle_{\varphi} = (\varphi, X\varphi) = \int_{\mathbb{R}} x |\varphi(x)|^2 dx \quad (2.1)$$

Fassen wir nun $|\varphi(x)|^2 dx =: d\mu_x^{\varphi}$ als neues Integrationsmaß auf, so erhalten wir als Erwartungswert

$$\langle X \rangle_{\varphi} = \int_{\mathbb{R}} x d\mu_x^{\varphi}. \quad (2.2)$$

Da in normierten Zuständen $\int_{\mathbb{R}} |\varphi(x)|^2 dx = 1$ gilt, kann man das Maß $d\mu_x^{\varphi}$ in sehr natürlicher Weise als Angabe der Wahrscheinlichkeit dafür verstehen, dass bei einer Messung des Ortes der Wert x eintritt.

Die Abbildung $\mathbb{R} \supset I \mapsto \int_I d\mu_x^{\varphi} = \int_I |\varphi(x)|^2 dx$ kann somit als Wahrscheinlichkeitsmaß aufgefasst werden. Der Erwartungswert $(\varphi, X\varphi)$ ergibt sich also als erstes Moment dieses Wahrscheinlichkeitsmaßes.

2.1.1 Operatorwertige Maße

Was ist genau der Zusammenhang zwischen Observablen und Wahrscheinlichkeitsmaßen? Hierzu betrachten wir zunächst projektorwertige Operatoren, aus denen wir eine Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Ergebnisse einer Messung konstruieren.

Beginnen wir damit, den Begriff des Maßes genauer zu fassen. Ein Maß soll eine Abbildung sein, welche einer Menge ihren "Inhalt" zuordnet. Man könnte z.B. an das Lebesgue-Maß denken, welches einem Intervall (a, b) auf \mathbb{R} die "Länge" $|b - a|$ zuordnet. Es stellt sich zunächst die Frage, ob jeder Menge ein wohldefinierter "Inhalt" zugeordnet werden kann. Im Rahmen der Maßtheorie¹ kann gezeigt werden, dass die sogenannten σ -Algebren die nötigen Eigenschaften besitzen.

Definition 2.1.1. Eine σ -Algebra \mathcal{F} einer nichtleeren Menge Ω ist eine nichtleere Familie von Teilmengen von Ω mit den Eigenschaften :

- (i) Die leere Menge ist in \mathcal{F} .
- (ii) Ist $A \in \mathcal{F}$ so auch das Komplement von A .
- (iii) Die Vereinigung einer Folge von Elementen aus \mathcal{F} A_n ist wieder in \mathcal{F} .

Das Paar (Ω, \mathcal{F}) , wird messbarer Raum genannt.

Definition 2.1.2. Ein (reellwertiges) Maß auf einem messbaren Raum (Ω, \mathcal{F}) ist eine nichtnegative Abbildung $\mu : \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R}$ mit den Eigenschaften :

- (i) $\mu(\emptyset) = 0$
- (ii) Ist A_n eine abzählbare Folge in \mathcal{F} , so gilt

$$\mu \left(\bigcup_n A_n \right) = \sum_n \mu(A_n) \quad (2.3)$$

für paarweise disjunkte A_n .

Gilt zusätzlich noch $\mu(\Omega) = 1$, so nennt man μ ein Wahrscheinlichkeitsmaß. Wirkt auf Ω eine Gruppe von Verschiebungen und ist ein Maß invariant unter Gruppentranslationen, so nennt man dieses invariantes oder Haar-Maß.

Mit Hilfe eines Maßes ist man nun z.B. in der Lage, ohne dass wir hier auf Details eingehen wollen, über

$$\int f d\mu := \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{m}{n} \mu \left(f^{-1} \left[\left[\frac{m}{n}, \frac{m+1}{n} \right) \right] \right) \quad (2.4)$$

ein Integral positiver reellwertiger Funktionen f auf Ω zu definieren. Verwenden wir bei dieser maßabhängigen Definition beispielsweise das Lebesgue Maß, so erhalten wir das Lebesgue Integral.

Dieses Konzept ist sehr allgemein. Charakterisieren wir die messbaren Mengen konkret durch Elemente einer Topologie, so führt dies auf den Begriff der Borelmengen.

Definition 2.1.3. Die Borelmengen $\mathcal{B}(\Omega)$ eines topologischen Raumes Ω sind die Elemente der σ -Algebra, welche von den offenen Mengen erzeugt werden.

¹Siehe hierzu z.B. Halmos [15].

Nun ist es zweckmäßig, auch “Maße” zu betrachten, welche ihre Werte nicht in den reellen Zahlen, sondern auf Operatoren haben.

Definition 2.1.4. Eine Abbildung $E : \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$, von einer σ -Algebra eines messbaren Raumes (Ω, \mathcal{F}) auf die beschränkten linearen Operatoren auf einem Hilbertraum \mathcal{H} , nennt man projektorwertiges Maß oder Spektralmaß, wenn

$$E(X) = E(X)^* = E(X)^2 \quad \forall X \in \mathcal{F} \quad (2.5)$$

$$E(\Omega) = \mathbb{1} \quad (2.6)$$

$$E(\cup_i X_i) = \sum_{i \in I \subset \mathbb{N}} E(X_i) \quad \forall X_i \in \mathcal{F} \text{ mit } X_i \cap X_j = \emptyset \text{ und } i \neq j. \quad (2.7)$$

Die Reihe in (2.7) soll in der schwachen Operatortopologie auf $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ konvergieren.

Konvergenz in der schwachen Operatortopologie² wird hier gefordert, um sicherzustellen, dass der Ausdruck

$$\sum_{i \in I \subset \mathbb{N}} (\varphi, E(X_i)\psi) \quad (2.8)$$

wohldefiniert ist.

Haben wir nun ein solches projektorwertiges Maß, so können wir ein Wahrscheinlichkeitsmaß

$$X \mapsto \frac{1}{(\varphi, \varphi)} (\varphi, E(X)\varphi) \quad (2.9)$$

definieren³. Wollen wir nun dieses Maß mit einer Observablen identifizieren, müssen wir einen Zusammenhang zwischen diesem Wahrscheinlichkeitsmaß und den selbstadjungierten Operatoren aus der Quantenmechanik herstellen. Mit $d(\varphi, E(x)\varphi)$ wollen wir die Integration bezüglich des reellwertigen Maßes $X \mapsto (\varphi, E(X)\varphi)$ bezeichnen.

Der Spektralsatz liefert nun einen Zusammenhang zwischen Spektralmaßen und selbstadjungierten Operatoren.

Satz 2.1.5 (Spektralsatz). Ist A ein selbstadjungierter Operator mit Definitionsbereich $\mathfrak{D}(A) \subset \mathcal{H}$, dann existiert ein eindeutig bestimmtes projektorwertiges Maß $E : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ auf den Borelmengen der reellen Zahlen, so dass

$$\mathfrak{D}(A) = \left\{ \varphi \in \mathcal{H} \mid \int_{\mathbb{R}} x^2 d(\varphi, E(x)\varphi) < \infty \right\} \quad (2.10)$$

und

$$(\varphi, A\varphi) = \int_{\mathbb{R}} x d(\varphi, E(x)\varphi) \quad \forall \varphi \in \mathfrak{D}(A) \quad (2.11)$$

gilt.

Beweis. Siehe z.B. Reed, Simon [6]. □

²Die schwache Operatortopologie wird durch die Halbnorm $\|A\|_{\varphi, \psi} = |(\varphi, A\psi)|$ erzeugt.

³Auch wenn wir auf die Normierung $\frac{1}{(\varphi, \varphi)}$ verzichten, erhalten wir ein reelles Maß.

Durch den Spektralsatz ist eine Eins zu Eins Korrespondenz zwischen projektorwertigen Maßen und selbstadjungierten Operatoren erklärt. Der Erwartungswert $(\varphi, A\varphi)$ einer Observable A ergibt sich somit als erstes Moment des Wahrscheinlichkeitsmaßes (2.9). Die Zahl $\frac{1}{(\varphi, \varphi)}(\varphi, E(X)\varphi)$ kann als Wahrscheinlichkeit dafür aufgefasst werden, dass das Ergebnis einer Messung in X liegt.

Da nicht die Idempotenz, sondern nur die Positivität von $E(X)$ benötigt wird, um aus (2.9) ein Wahrscheinlichkeitsmaß zu machen, liegt es nahe, bei der Konstruktion von Observablen als Maße auf die Idempotenz zu verzichten. Wir werden also versuchen, Observable als Objekte aufzufassen, welche nicht zwangsläufig selbstadjungierte Operatoren sind.

Definition 2.1.6. Sei Ω eine nichtleere Menge und \mathcal{F} eine σ -Algebra von Teilmengen auf Ω . Definieren wir nun ein positiv operatorwertiges Maß $E : \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ auf dem messbaren Raum (Ω, \mathcal{F}) durch

$$E(X) \geq 0 \quad \forall X \in \mathcal{F} \quad (2.12)$$

$$E(\Omega) = \mathbb{1} \quad (2.13)$$

$$E(\cup_i X_i) = \sum_{i \in I \subset \mathbb{N}} E(X_i) \quad \forall X_i \in \mathcal{F} \text{ mit } X_i \cap X_j = \emptyset \quad (2.14)$$

Die Reihe in (2.14) soll in der schwachen Operatortopologie auf $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ konvergieren.

Wir machen jetzt den Schritt, dass wir nicht mehr selbstadjungierte Operatoren, sondern die positiv operatorwertigen Maße als unsere Observablen auffassen. Definieren wir die zugehörigen Operatoren als die ersten Momente des entsprechenden Maßes⁴, so ergeben sich die Erwartungswerte wie im Fall der projektorwertigen Maße. Die Selbstadjungiertheit dieser Operatoren ist allerdings nur gegeben, wenn das positiv operatorwertige Maß auch noch idempotent ist. Die Menge Ω kann man nun als die Menge der möglichen Zeigereinstellungen am Messgerät auffassen, denen wir jeweils eine Wahrscheinlichkeit zuordnen.

Bei Bush, Grabowski und Lahti [2] findet sich der folgende Satz (ohne Beweis).

Satz 2.1.7. Für ein positiv operatorwertiges Maß E sind folgende Aussagen äquivalent :

$$(i) \quad E(X)^2 = E(X) \quad \forall X \in \mathcal{F} \quad (2.15)$$

$$(ii) \quad E(X \cap Y) = E(X)E(Y) \quad \forall X, Y \in \mathcal{F} \quad (2.16)$$

Beweis. Ergänzen wir nun den Beweis. Die Richtung (2.16) \Rightarrow (2.15) erhält man, wenn man X gleich Y setzt.

Für die entgegengesetzte Richtung betrachten wir zunächst disjunkte Elemente X und Y der σ -Algebra \mathcal{F} .

⁴Ist der zugrundeliegende messbare Raum nicht \mathbb{R} , so ist nicht klar, wie das erste Moment eines Maßes definiert werden kann. Beschränken wir uns hier also der Einfachheit halber auf den Fall, dass wir wie bei der Formulierung des Spektralsatzes auf \mathbb{R} arbeiten.

$$E(X \cup Y)^2 = E(X)^2 + E(Y)^2 + E(X)E(Y) + E(Y)E(X) \quad (2.17)$$

$$E(X \cup Y)^2 = E(X) + E(Y) + [E(X), E(Y)]_+ \quad (2.18)$$

$$E(X \cup Y)^2 = E(X \cup Y) + [E(X), E(Y)]_+ \quad (2.19)$$

$$\Rightarrow [E(X), E(Y)]_+ = 0 \quad (2.20)$$

$$\Rightarrow E(X)E(Y) = E(X)E(X)E(Y) \quad (2.21)$$

$$= -E(X)E(Y)E(X) \quad (2.22)$$

$$= E(Y)E(X)E(X) = E(Y)E(X) \quad (2.23)$$

$$\Rightarrow [E(X), E(Y)] = 0 \quad (2.24)$$

$$\Rightarrow E(X)E(Y) = 0 \quad \forall X, Y \text{ mit } X \cap Y = \emptyset \quad (2.25)$$

Mit (2.25) können wir nun beliebige Mengen X, Y untersuchen. Zerlegen wir diese Mengen nun in die disjunkten Komponenten $X' = (X \setminus Y)$, $Y' = (Y \setminus X)$ und $(X \cap Y)$.

$$E(X \cap Y) = E(X \cap Y)^2 \quad (2.26)$$

$$= E(X \cap Y)E(X \cap Y) \quad (2.27)$$

$$\stackrel{(2.25)}{=} E(X \cap Y)E(X \cap Y) + E(X')E(Y') + E(X')E(X \cap Y) + E(X \cap Y)E(Y') \quad (2.28)$$

$$= (E(X') + E(X \cap Y))(E(Y') + E(X \cap Y)) \quad (2.29)$$

$$= E(X' \cup (X \cap Y))E(Y' \cup (X \cap Y)) \quad (2.30)$$

$$= E(X)E(Y) \quad (2.31)$$

□

Ein positiv operatorwertiges Maß auf den Borelmengen der reellen Zahlen ist also projektorwertig, wenn es die Multiplikationseigenschaft (2.16) besitzt. In diesem Fall erhalten wir den üblichen Observablenbegriff durch die entsprechenden, eindeutig durch das Maß bestimmte, selbstadjungierte Operatoren (Satz 2.1.5).

2.2 Zeit-Observable

Wie kann man nun im Rahmen der Quantenmechanik Zeitmessungen beschreiben? Wir sind an einer quantenmechanischen Observablen interessiert, welche beschreibt, wann ein bestimmtes Ereignis eintritt. Genauer gesagt sind wir auf der Suche nach einem Verfahren, welches einem Ereignis eine Wahrscheinlichkeitsverteilung in der Zeit zuordnet.

Durch Fouriertransformation könnte man sich ganz analog zum Impuls einen Zeitoperator verschaffen, wenn man davon ausgeht, dass Zeit und Energie wie Impuls und Ort konjugierte Größen sind. Gehen wir also davon aus, dass wir über einen Zeitoperator $T = (-i\partial_E)$ auf Zuständen φ verfügen. Seien diese Zustände auf einem kontinuierlichen, nicht entarteten Energiespektrum definiert. Der Operator wird auf gewissen Funktionen, welche auf dem Spektrum des Hamiltonoperators definiert sind, erklärt, wobei wir zunächst annehmen, dass ein kontinuierliches Spektrum \mathbb{R}^+ vorliegt. Nun stellt sich die Frage, ob solch ein Operator selbstadjungiert ist und somit eine konventionelle Behandlung im Rahmen der Quantenmechanik möglich ist.

Schränken wir den Definitionsbereich unseres Zeitoperators T auf

$$\mathfrak{D}(T) = \{\varphi \in L^2(\mathbb{R}^+, \mathbb{C}), \varphi' \in L^2(\mathbb{R}^+, \mathbb{C}), \varphi(0) = 0, \text{supp } \varphi \subset \mathbb{R}^+\}$$

ein, um zu erreichen, dass T hermitesch ist. Nun lässt sich die Selbstadjungiertheit prüfen. Der adjungierte Operator T^* zu T wird nun auf

$$\mathfrak{D}(T^*) = \{\varphi \in L^2(\mathbb{R}^+, \mathbb{C}), \varphi' \in L^2(\mathbb{R}^+, \mathbb{C})\}$$

definiert. Da die Randterme aus der partiellen Integration von $(\psi, (-i\partial_E)\varphi)$ mit $\psi \in \mathfrak{D}(T^*)$ und $\varphi \in \mathfrak{D}(T)$ bereits durch die Randbedingung an φ verschwinden, ist der zu T adjungierte Operator T^* also auch von der Gestalt $(-i\partial_E)$, da nun $((-i\partial_E)\psi, \varphi) = (\psi, (-i\partial_E)\varphi)$ gilt. Berechnen wir die Defektindizes⁵ N_{\pm} von T , also die Dimension der Eigenräume zu den Eigenwerten $+i$ und $-i$ des adjungierten Operators T^* .

$$N_+ = \dim \{\varphi \in \mathfrak{D}(T^*), T^*\varphi = +i\varphi\}$$

$$N_- = \dim \{\varphi \in \mathfrak{D}(T^*), T^*\varphi = -i\varphi\}$$

$$T^*\varphi = \pm i\varphi \tag{2.32}$$

$$(-i\partial_E)\varphi = \pm i\varphi \tag{2.33}$$

$$\Rightarrow \varphi_+ = e^{-E} \tag{2.34}$$

$$\varphi_- = e^E \tag{2.35}$$

Während φ_+ in $L^2(\mathbb{R}^+, \mathbb{C})$ liegt, ist φ_- nicht quadratintegrabel auf der positiven Halbachse. Die Defektindizes sind also

$$N_+ = 1 \quad N_- = 0. \tag{2.36}$$

Diese Indizes erlauben nun die Struktur des Operators T genauer zu bestimmen. Es gilt

⁵Siehe hierzu Reed und Simon [7].

Satz 2.2.1. *Ist A ein abgeschlossener symmetrischer Operator mit Defektindizes N_+ und N_- , dann gilt*

- (a) *A ist genau dann selbstadjungiert, wenn $N_+ = N_- = 0$.*
- (b) *A besitzt selbstadjungierte Erweiterungen, wenn $N_+ = N_- \neq 0$.*
- (c) *Ist entweder $N_+ = 0 \neq N_-$ oder $N_- = 0 \neq N_+$, dann besitzt A keine nichttrivialen symmetrischen Erweiterungen.*

Beweis. Ein Beweis ist bei Reed und Simon nachzulesen [7]. □

Da die Defektindizes ungleich Null sind, ist der Operator T also nicht selbstadjungiert. Zu T lässt sich nicht einmal eine selbstadjungierte Erweiterung finden, da N_+ und N_- unterschiedlich sind. Der Zeitoperator $T = (-i\partial_E)$ ist also nicht selbstadjungiert, wenn das Energiespektrum nach unten beschränkt ist.

Ist es möglich einen selbstadjungierten Zeit-Operator zu definieren? Nehmen wir nun an, dass wir uns einen selbstadjungierten Zeit-Operator T verschaffen können. Dieser selbstadjungierte Operator T sollte bei Vertauschung mit dem Hamiltonoperator

$$[T, H] = i \tag{2.37}$$

erfüllen, um sinnvoll als Zeit-Observable interpretierbar zu sein. Dieser Operator würde also als Generator einer einparametrischen unitären Gruppe $U(E) := e^{iET}$ von Energietranslationen wirken. Das Spektrum selbstadjungierter Operatoren ist invariant unter unitären Transformationen.⁶ Es folgt

$$\text{sp}(H) = \text{sp}(H + E) \tag{2.38}$$

für alle $E \in \mathbb{R}$. Da E beliebig aus \mathbb{R} gewählt werden kann, ist das Spektrum von H gleich ganz \mathbb{R} .

Durch diese Überlegung sehen wir also, dass die Selbstadjungiertheit von T erzwingt, dass unser Energiespektrum gleich ganz \mathbb{R} ist. In quantenmechanischen Systemen mit Zuständen niedrigster Energie oder diskreten Energiespektren ist dieses jedoch nicht möglich. Wir sind also im allgemeinen nicht in der Lage, einen selbstadjungierten Zeitoperator zu definieren. Verzichten wir auf die Selbstadjungiertheit, so müssen wir unsere Observable durch ein positiv operatorwertiges Maß beschreiben.

2.2.1 Konstruktion einer Zeit-Observable

Wie sieht nun eine Zeit-Observable als *positiv operatorwertiges Maß* auf den reellen Zahlen der Zeitgeraden aus? Überlegen wir uns zunächst, wie wir Zeiten messen können. Zeitmessungen machen nur in Verbindung mit einem bestimmten Ereignis einen Sinn. Man könnte zum Beispiel danach fragen, wann eine Lampe anfängt zu leuchten oder zu welchem Zeitpunkt ein fallender Stein auf dem Boden aufschlägt.

⁶Näheren Hintergründen dieses Sachverhaltes finden sich bei Reed und Simon.[6]

Folgen wir nun R. Brunetti und K. Fredenhagen [3], so beginnen wir mit einem positiven beschränkten Operator A auf dem Hilbertraum⁷ \mathcal{H} , welcher die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten eines Ereignisses zur Zeit $t = 0$ misst. Denken wir an einen Projektor auf einen Teil des Hilbertraumes. Wir könnten beispielsweise einen Multiplikationsoperator mit der charakteristischen Funktion eines Gebietes G untersuchen. Dieser Operator würde die Wahrscheinlichkeit dafür messen, dass unser Zustand im Gebiet G lokalisiert ist. Eine andere Möglichkeit wäre ein Projektor der Form $A = |\psi\rangle\langle\psi|$. Hier wählen wir also einen quantenmechanischen *Effekt* aus, welcher dem zu messenden Ereignis entspricht.

Nun können wir untersuchen, wie sich diese Wahrscheinlichkeit in der Zeit entwickelt. Mit einer unitären Zeitentwicklung $\alpha_t(A) := e^{iHt} A e^{-iHt}$ können wir für $I \subset \mathbb{R}$ den Ausdruck

$$B(I) = \int_I \alpha_t(A) dt \quad (2.39)$$

betrachten. Dieser Operator ist bereits ein positiv operatorwertiges Maß auf \mathbb{R} , $(\varphi, B(I)\varphi)$ ist jedoch kein Wahrscheinlichkeitsmaß. Es stellt sich also die Frage, wie eine Normierung erreicht werden kann. Aus $B(I)$ lässt sich der Operator

$$B = \int_{\mathbb{R}} \alpha_t(A) dt \quad (2.40)$$

gewinnen, den wir als totale Dauer des Effektes interpretieren können. B können wir nutzen, um die Wahrscheinlichkeitsdichte in der Zeit zu normieren. Hierbei ist jedoch zu beachten, dass der Ausdruck B nicht immer sinnvoll zur Normierung herangezogen werden kann. So könnte das gewünschte Ereignis nie stattfinden oder unendlich lange dauern.

Eine Wahrscheinlichkeitsverteilung lässt sich sicher nur dann konstruieren, wenn B einen endlichen Ausdruck liefert. Um diese Überlegungen zu berücksichtigen, bietet es sich an, den Hilbertraum \mathcal{H} in drei Teile, $\mathcal{H}_0, \mathcal{H}_{\text{finite}}$ und \mathcal{H}_∞ , zu zerlegen, in denen der die ‘‘Gesamtdauer’’ des Ereignisses entweder verschwindet, endlich oder unendlich ist.

Wie lassen sich diese Teilräume nun charakterisieren? Betrachten wir die Operatoren $(B(I) + \mathbb{1})^{-1}$. Diese bilden ein fallendes Netz⁸ von positiv beschränkten Operatoren mit größter unterer Schranke C . Diese Schranke C ist kleiner oder gleich $\mathbb{1}$. Den Kern von C , welcher einen Hilbertraum bildet, nennen wir \mathcal{H}_∞ . Einen weiteren Teilraum von \mathcal{H} , nämlich \mathcal{H}_0 , definieren wir als den gemeinsamen Kern aller $\alpha_t(A)$. Zustände, für die eine Wahrscheinlichkeitsverteilung in der Zeit sinnvoll zu definieren ist, befinden sich weder in \mathcal{H}_0 noch in \mathcal{H}_∞ , so dass wir $\mathcal{H}_{\text{finite}}$, als das orthogonale Komplement von $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_\infty$, in \mathcal{H} definieren. Auf $\mathcal{H}_{\text{finite}}$ führen wir den positiven selbstadjungierten, im allgemeinen jedoch unbeschränkten, Operator $B = C^{-1} - \mathbb{1}$ ein. B dominiert auf $\mathcal{H}_{\text{finite}}$ alle Operatoren $B(I)$.

⁷Betrachten wir komplexe Hilberträume \mathcal{H} , so ist A selbstadjungiert.

⁸Netze sind eine verallgemeinerte Folgen, in dem Sinne, dass sie nicht mehr zwangsläufig auf \mathbb{N} , sondern auf beliebigen teilgeordneten Mengen definiert sind. Näheres ist bei Reed und Simon [6] nachzulesen.

Für Zustände in $\mathcal{H}_{\text{finite}}$ ist eine Normierung ohne weiteres möglich. Es zeigt sich jedoch, dass die Bindungszustände leider nicht in $\mathcal{H}_{\text{finite}}$, sondern in \mathcal{H}_{∞} liegen, da sich z.B. im Wasserstoffatomen das Elektron immer wieder in der Nähe des Kernes aufhält. Dieses Problem stellen wir etwas zurück und betrachten zunächst den unproblematischen Fall von Streuzuständen, in dem die Zustände in $\mathcal{H}_{\text{finite}}$ liegen.

Der erste Gedanke zur Wahl einer Normierungsvorschrift könnte sein, die Erwartungswerte der Operatoren $B(I)$ und B durcheinander zu dividieren. Der Ausdruck

$$P_{\varphi}(I) = \frac{(\varphi, B(I)\varphi)}{(\varphi, B\varphi)} \quad (2.41)$$

ist jedoch nicht linear in $B(I)$, so dass eine elegantere Methode darin besteht, die Normierung vor der Bildung von Erwartungswerten, also auf der Ebene der Operatoren, durchzuführen. Setzen wir

$$P(I) = B^{-\frac{1}{2}}B(I)B^{-\frac{1}{2}}, \quad (2.42)$$

so erhalten wir positive durch $\mathbb{1}$ beschränkte Operatoren. Aus der Definition (2.42) kann man leicht erkennen, dass es sich hierbei tatsächlich um ein positiv operatorwertiges Maß handelt.

Betrachten wir das Verhalten von $P(I)$ unter Zeittranslationen, so ergibt sich wie erwartet

$$\alpha_t(P(I)) = P(I + t). \quad (2.43)$$

Mit $P(I)$, als positiv operatorwertiges Wahrscheinlichkeitsmaß auf \mathbb{R} , sind wir nun in der Lage, einen Zeitoperator zu erklären. Das erste Moment unseres Wahrscheinlichkeitsmaßes auf \mathbb{R}

$$T_A = \int_{\mathbb{R}} tP(dt) \quad (2.44)$$

liefert die Erwartungswerte für das Eintreten des Ereignisses A in dem jeweiligen Zustand. Ist das erste Moment wohldefiniert, können wir also einen Zeit-Operator angeben. Man könnte nun noch die quadratische Unschärfe dieser Observable untersuchen, in dem wir mit Hilfe des zweiten Momentes unseres Maßes T_A^2 definieren. Die Unschärfe würde sich dann wie üblich als

$$(\varphi, \Delta T_A^2 \varphi) = (\varphi, T_A^2 \varphi) - (\varphi, T_A \varphi)^2 \quad (2.45)$$

ergeben.

2.2.2 Streuzustände

Das oben beschriebene Verfahren lässt sich nun auf verschiedene Situationen anwenden. Betrachten wir nun zunächst eine Zeitmessung auf Streuzuständen, also auf Zuständen in denen die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\int_G |\varphi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}$ für jedes Gebiet G im Limes grosser Zeiten verschwindet.

Beispiel 2.2.1. Ein Teilchen mit Masse $m = 1$, Energie E und Impuls $k = +\sqrt{2E}$, welches sich in einer Dimension durch den Raum bewegt, beschreiben wir durch ein Wellenpaket $\varphi(t, x)$. Dieses bilden wir durch Superposition von Lösungen der freien Schrödingergleichung, den ebenen Wellen mit positiven und negativen Frequenzen, da die Zustände gleicher Energie E bezüglich der Richtung des Impulses entartet sind.

Stellen wir nun am Ort 0 einen Detektor auf, welcher die Anwesenheit des Teilches registriert. Verwenden wir also den Projektor A_ε auf das Intervall $(-\frac{\varepsilon}{2}, \frac{\varepsilon}{2})$, um dieses zu formalisieren. Für einen normierten Zustand der Form

$$\varphi(t, x) = \int dE e^{-iEt} \left(g_+(E) e^{ikx} + g_-(E) e^{-ikx} \right) \quad (2.46)$$

mit $g_\pm(E) \in L^2(\mathbb{R}^+, \mathbb{C})$ und $\int dE \frac{2\pi}{\sqrt{2E}} (|g_+(E)|^2 + |g_-(E)|^2) = 1$, bestimmen wir nun die Wahrscheinlichkeit $W(t) = (\varphi, A_\varepsilon \varphi)$

$$\begin{aligned} W(t) &= \int dE \int dE' \int_{-\varepsilon/2}^{+\varepsilon/2} dx \left(\overline{g_+(E)} e^{-ikx} + \overline{g_-(E)} e^{ikx} \right) \\ &\quad \left(g_+(E') e^{ik'x} + g_-(E') e^{-ik'x} \right) e^{-i(E'-E)t}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Die Zustände in den zweidimensionalen Energieeigenräumen können wir also durch Vektoren

$$\varphi(E) = \begin{pmatrix} g_+(E) \\ g_-(E) \end{pmatrix}$$

dargestellen. In den Entartungsräumen gleicher Energie können wir diesen Operator als Matrix auffassen, sie ergibt sich zu

$$A_\varepsilon(k, k', t) = \begin{pmatrix} \frac{\sin \frac{\varepsilon}{2}(k-k')}{\frac{\varepsilon}{2}(k-k')} & \frac{\sin \frac{\varepsilon}{2}(k+k')}{\frac{\varepsilon}{2}(k+k')} \\ \frac{\sin \frac{\varepsilon}{2}(k+k')}{\frac{\varepsilon}{2}(k+k')} & \frac{\sin \frac{\varepsilon}{2}(k-k')}{\frac{\varepsilon}{2}(k-k')} \end{pmatrix} e^{-i(E'-E)t}.$$

Das Integral von $W(t)$ über die ganze Zeit, können wir als Gesamtaufenthaltsdauer $(\varphi, B\varphi)$ im Intervall $(-\varepsilon/2, +\varepsilon/2)$ auffassen. Sie ergibt sich zu

$$\begin{aligned} (\varphi, B\varphi) &= \int_{\mathbb{R}} dt \int dE \int dE' \int_{-\varepsilon/2}^{+\varepsilon/2} dx \left(\overline{g_+(E)} e^{-ikx} + \overline{g_-(E)} e^{ikx} \right) \\ &\quad \left(g_+(E') e^{ik'x} + g_-(E') e^{-ik'x} \right) e^{-i(E'-E)t} \end{aligned} \quad (2.48)$$

$$\begin{aligned} &= 2\pi \int dE \int_{-\varepsilon/2}^{+\varepsilon/2} dx \left(|g_+(E)|^2 + |g_-(E)|^2 + \right. \\ &\quad \left. + \overline{g_+(E)} g_-(E) e^{-i2kx} + \overline{g_-(E)} g_+(E) e^{i2kx} \right) \end{aligned} \quad (2.49)$$

Fassen wir auch B als Matrix auf, so erhalten wir

$$B(k) = 2\pi \begin{pmatrix} \varepsilon & \frac{\sin \varepsilon k}{k} \\ \frac{\sin \varepsilon k}{k} & \varepsilon \end{pmatrix}.$$

Um fortzufahren berechnen wir jetzt $B^{-1/2}$. Mit

$$\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \sigma = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

erhalten wir

$$B(k) = 2\pi\varepsilon \left(\mathbb{1} + \frac{\sin k\varepsilon}{k\varepsilon} \sigma \right) \quad (2.50)$$

$$B(k)^{-1/2} = (2\pi\varepsilon)^{-1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \binom{-1/2}{n} \left(\frac{\sin k\varepsilon}{k\varepsilon} \right)^n \sigma^n \quad (2.51)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2\pi\varepsilon} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \binom{-1/2}{2n} \left(\frac{\sin k\varepsilon}{k\varepsilon} \right)^{2n} \mathbb{1} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{n=0}^{\infty} \binom{-1/2}{2n+1} \left(\frac{\sin k\varepsilon}{k\varepsilon} \right)^{2n+1} \sigma \right) \quad (2.52) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2\pi\varepsilon} \frac{1}{2} \left(\left(\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\sin k\varepsilon}{k\varepsilon}}} + \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\sin k\varepsilon}{k\varepsilon}}} \right) \mathbb{1} \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\sin k\varepsilon}{k\varepsilon}}} - \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\sin k\varepsilon}{k\varepsilon}}} \right) \sigma \right) \quad (2.53) \end{aligned}$$

Berechnen wir nun die Wahrscheinlichkeitsdichte in der Zeit $\rho_t = \rho(k, k', \varepsilon, t) = 2\pi B(k)^{-1/2} A_\varepsilon(k, k', t) B(k')^{-1/2}$ für den Effekt A_ε . Sie ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \rho_t &= \frac{1}{2} \left\{ \mathbb{1} \left[\frac{\sin \frac{k-k'}{2} \varepsilon}{\frac{k-k'}{2} \varepsilon} \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\sin k\varepsilon}{k\varepsilon}} \sqrt{1 + \frac{\sin k'\varepsilon}{k'\varepsilon}}} + \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\sin k\varepsilon}{k\varepsilon}} \sqrt{1 - \frac{\sin k'\varepsilon}{k'\varepsilon}}} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\sin \frac{k+k'}{2} \varepsilon}{\frac{k+k'}{2} \varepsilon} \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\sin k\varepsilon}{k\varepsilon}} \sqrt{1 + \frac{\sin k'\varepsilon}{k'\varepsilon}}} - \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\sin k\varepsilon}{k\varepsilon}} \sqrt{1 - \frac{\sin k'\varepsilon}{k'\varepsilon}}} \right) \right] \right. \\ &\quad \left. + \sigma \left[\frac{\sin \frac{k-k'}{2} \varepsilon}{\frac{k-k'}{2} \varepsilon} \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\sin k\varepsilon}{k\varepsilon}} \sqrt{1 + \frac{\sin k'\varepsilon}{k'\varepsilon}}} - \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\sin k\varepsilon}{k\varepsilon}} \sqrt{1 - \frac{\sin k'\varepsilon}{k'\varepsilon}}} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\sin \frac{k+k'}{2} \varepsilon}{\frac{k+k'}{2} \varepsilon} \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\sin k\varepsilon}{k\varepsilon}} \sqrt{1 + \frac{\sin k'\varepsilon}{k'\varepsilon}}} + \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\sin k\varepsilon}{k\varepsilon}} \sqrt{1 - \frac{\sin k'\varepsilon}{k'\varepsilon}}} \right) \right] \right\} \\ &\quad \left. \right\} e^{-i(E'-E)t} \quad (2.54) \end{aligned}$$

Als positiv operatorwertiges Maß erhalten wir also

$$P(I) = \int_I dt \rho_t. \quad (2.55)$$

Führen wir die Integration über die gesamte Zeit aus, so erhalten wir $P(\mathbb{R}) = 1$. Dies folgt aus $\int_{\mathbb{R}} e^{-i(E'-E)t} dt = \frac{1}{2\pi} \delta(E' - E)$, da aus $E = E'$ $k = k'$ folgt. Wir hatten uns in der Definition von k ja bereits auf die positive Wurzel beschränkt.

Aus diesen Maß können wir nun durch Bildung des ersten Momentes den Zeitoperator gewinnen.

$$T_A = \int dt \int dE \int dE' t \frac{e^{-i(E'-E)t}}{2\pi} \rho_0 \quad (2.56)$$

$$= \int dt \int dE \int dE' \frac{(i\partial_{E'} e^{-i(E'-E)t})}{2\pi} \rho_0 \quad (2.57)$$

$$= \int dt \int dE \int dE' \frac{e^{-i(E'-E)t}}{2\pi} (-i\partial_{E'}) \rho_0 \quad (2.58)$$

Sind wir daran interessiert, wann unserer Zustand das Intervall $(a - \frac{\varepsilon}{2}, a + \frac{\varepsilon}{2})$ erreicht, so können wir dies dadurch beschreiben, dass wir mittels des Impulsoperators eine Translation des Systems vermitteln. Wir erhalten mit

$$U(a) = \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix}$$

den Zeitoperator T_ε^a am Ort a durch $T_\varepsilon^a := U(a)T_\varepsilon U(-a)$.

Als Erwartungswert von T_ε^a berechnen wir

$$\langle T_\varepsilon^a \rangle = \int dE \int dE' \delta(k - k') \varphi(E)^\dagger U(a) (-i) \frac{\partial k'}{\partial E'} \partial_{k'} (\rho_t U(-a) \varphi(E')) \quad (2.59)$$

$$= \int dE \int dE' \delta(k - k') \varphi(E)^\dagger U(a) \left(\frac{-i}{\sqrt{2E'}} \left((\partial_{k'} \rho(k, k')) U(-a) + \right. \right. \\ \left. \left. + \rho(k, k') (\partial_{k'} U(-a)) + \rho(k, k') U(-a) \partial_{k'} \right) \right) \varphi(E') \quad (2.60)$$

Nach etwas Rechenarbeit ergibt sich $\partial_{k'} \rho(k, k')|_{k=k'} = 0$. Für $\langle \Delta T_\varepsilon \rangle := \langle T_\varepsilon^a \rangle - \langle T_\varepsilon \rangle$, also beträgt die Zeit, in der sich unser System von 0 nach a bewegt hat,

$$\langle \Delta T_\varepsilon \rangle = \int dE \varphi(E)^\dagger \left(\frac{1}{\sqrt{2E}} \begin{pmatrix} -a & 0 \\ 0 & a \end{pmatrix} + -i\partial_E \right) \varphi(E) \\ - \int dE \varphi(E)^\dagger (-i\partial_E) \varphi(E) \quad (2.61)$$

$$= \int dE \varphi(E)^\dagger \frac{1}{\sqrt{2E}} \begin{pmatrix} -a & 0 \\ 0 & a \end{pmatrix} \varphi(E). \quad (2.62)$$

Betrachten wir z.B. Zustände bei denen $g_+(E)$ verschwindet, das Teilchen also nur in eine Richtung fliegt und gehen nun noch davon aus, dass die Gewichtungsfunktion $g_-(E)$ um Energien E_0 konzentriert ist. Wir erhalten

$$\langle \Delta T_\varepsilon \rangle \approx \frac{a}{\sqrt{2E_0}}, \quad (2.63)$$

also die Zeit, welche ein klassisches Teilchen benötigt, um eine Strecke der Länge a zurückzulegen.

2.2.3 Bindungszustände

Versuchen wir nun, die bisherige Begriffsbildung einer Zeit-Observable auf Bindungszustände zu übertragen. Unter Bindungszuständen verstehen wir quantenmechanische Zustände $\varphi(\mathbf{x}, t)$, welche zu allen Zeiten in einem Gebiet G lokalisiert sind. Genauer gesagt, zu jedem beliebig klein vorgegebenen $\varepsilon > 0$ gibt es ein endlich ausgedehntes Gebiet G , so dass für die Wahrscheinlichkeit

$$\int_G dx |\varphi(\mathbf{x}, t)|^2 \geq 1 - \varepsilon \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad (2.64)$$

gilt.

Die einfachsten Beispiele für Bindungszustände sind die Eigenzustände des Hamiltonoperators. Diese Zustände sind von der Form $\varphi(\mathbf{x}, t) = e^{-iEt} \varphi(\mathbf{x})$, ihre Erwartungswerte sind demnach nicht von der Zeit abhängig. Superpositionen solcher stationären Zustände sind wieder Bindungszustände. Tatsächlich lassen sich sogar alle Bindungszustände als Superposition stationärer Zustände darstellen. Beschränken wir uns im Folgenden auf die Bindungszustände, welche durch endliche Superpositionen, nicht entarteter, stationärer Zustände dargestellt werden können.

Die zeitliche Entwicklung der Erwartungswerte unseres "Messgerätes", des Operators A ,

$$\langle A \rangle_t = (\varphi(\mathbf{x}), e^{iHt} A e^{-iHt} \varphi(\mathbf{x})),$$

im Zustand $\varphi(\mathbf{x}) = \sum_n a_n \varphi_n(\mathbf{x})$, verhält sich bei orthogonalen φ_n folgendermaßen :

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_t &= (\varphi, A\varphi) & (2.65) \\ &= \sum_{n=0}^N |a_n|^2 (\varphi_n, A\varphi_n) + \\ &\quad + 2 \sum_{n=1}^N \sum_{n'=0}^{N-n} \operatorname{Re} \left(\overline{a_{n'}} a_{n'+n} (\varphi_{n'}, A\varphi_{n'+n}) e^{-i(E_{n'+n} - E_{n'})t} \right). \end{aligned} \quad (2.66)$$

Wobei die Zustände als Superposition von Hamiltoneigenzuständen φ_n mit $H\varphi_n = E_n\varphi_n$ und $\sum |a_n|^2 = 1$ dargestellt werden. Diese Erwartungswerte sind Überlagerungen periodischer Funktionen mit unterschiedlichen Frequenzen, sie verhalten sich in der Zeit also periodisch oder zumindest fastperiodisch.

Versuchen wir nun ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf \mathbb{R} zu konstruieren, welches der Zeitmessung des Auftretens eines Effektes A entspricht. Der Ausdruck

$$(\varphi, B_A(I)\varphi) = (\varphi, \int_I \alpha_t(A) dt \varphi) \quad (2.67)$$

gibt für $I \subset \mathbb{R}$ ein positives Maß auf den reellen Zahlen, das man wie oben

$$(\varphi, P_A(I)\varphi) = (\varphi, B_A^{-1/2} B_A(I) B_A^{-1/2} \varphi) \quad (2.68)$$

definieren möchte. Wir stehen hier allerdings vor dem Problem, dass die Funktion $\langle A \rangle_t$ nicht integrierbar ist. Es macht also keinen Sinn, den Operator B_A

wie im Falle der Streuzustände einzuführen. Was tritt also an die Stelle der "Gesamtdauer" B_A , welche für Streuzustände noch existierte.

Zur Illustration stellen wir uns vor, dass wir z.B. daran interessiert sind, wann ein Elektron eines Atoms in einem bestimmten Gebiet um den Kern auftaucht. Da das Teilchen an den Kern gebunden ist, wird dieses Ereignis beliebig oft "eintreten", das Integral über die Zeit hat keinen Grund zu konvergieren. Der Zustand befindet sich also im Teilraum \mathcal{H}_∞ , in dem es keinen Sinn macht, eine Gesamtdauer von Ereignissen zu betrachten.

Das zentrale Problem, da \mathbb{R} nicht kompakt ist, wird es sein, dem Normierungsintegral über \mathbb{R} einen Sinn zu geben. Die Idee, die wir nun verfolgen wollen besteht darin, die Zeit zu kompaktifizieren. Im Falle periodischer Vorgänge ist dies nicht sehr überraschend. Wir untersuchen alle Vorgänge nur in einer Periode, betrachten als kompaktifizierte Zeit also die S^1 , den Kreis.⁹ Alle Aussagen, welche wir aus diesem Bild gewinnen, sind sicher nur modulo der Periode zu verstehen, was genau den Erwartungen entspricht.

Die Frage stellt sich nun, wie dieser Ansatz verallgemeinert werden kann, wenn keine echte Periodizität vorliegt. In unseren Fall ist das Zeitverhalten jedoch fastperiodisch. Es lässt sich als Superposition periodischer Funktionen beschreiben, welche in der Regel keine rationalen Frequenzverhältnisse aufweisen. Um hier sinnvolle Aussagen machen zu können, wird es nötig sein, fastperiodische Funktionen genauer zu studieren.

⁹Genau genommen wird nicht \mathbb{R} , sondern das Intervall $(0, 2\pi)$ in die S^1 eingebettet.

Kapitel 3

Fastperiodische Funktionen

3.1 Eigenschaften fastperiodischer Funktionen

Wie wir gesehen haben, reichen periodische Funktionen zur Beschreibung der Zeitentwicklung von Bindungszuständen nicht aus. Es wird nötig sein, den Begriff der periodischen Funktion auf \mathbb{R} zu verallgemeinern. Für eine periodische Funktion P auf \mathbb{R} , mit der Periode p , gilt die Beziehung

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} |P(x + p) - P(x)| = 0. \quad (3.1)$$

Weichen wir diese Definition etwas auf, so führt dies auf die fastperiodischen Funktionen.

Definition 3.1.1. *Eine stetige Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ heißt fastperiodisch, wenn es zu f und zu jedem $\varepsilon > 0$ eine Zahl $L(\varepsilon) \in \mathbb{R}$ gibt, so dass für jedes $a \in \mathbb{R}$ in dem Intervall $[a, a + L(\varepsilon)]$ mindestens eine Zahl $\tau \in \mathbb{R}$ enthalten ist, für die*

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} |f(x + \tau) - f(x)| < \varepsilon \quad (3.2)$$

gilt.

Wir haben also den Begriff der periodischen Funktion dahingehend verallgemeinert, dass wir nicht mehr fordern, nach einer (verallgemeinerten) Periode τ *genau* den gleichen Funktionswert zu erhalten. Studieren wir nun die Eigenschaften fastperiodischer Funktionen¹.

Die Menge der fastperiodischen Funktionen ist im Gegensatz zu der Menge der periodischen Funktionen abgeschlossen unter der Addition. So ist beispielsweise die Funktion $\sin(x) + \sin(\sqrt{2}x)$ nicht periodisch, aber fastperiodisch. Insgesamt lässt sich sogar zeigen, dass gilt:

Satz 3.1.2. *Sind f und g fastperiodisch, so sind es auch die Abbildungen von $x \in \mathbb{R}$ nach $f(x + a), \overline{f(x)}, \alpha f(x), f(-x), f(x) + g(x)$ und $f(x)g(x)$ für $a \in \mathbb{R}$ und $\alpha \in \mathbb{C}$. Konvergiert eine Folge f_n fastperiodischer Funktionen gleichmäßig gegen f , so ist auch f fastperiodisch.*

¹Für nähere Einzelheiten und die Beweise der Sätze möchte ich auf [8],[10],[11] und [12] verweisen.

Satz 3.1.3. *Jede fastperiodische Funktion ist beschränkt.*

Da wir nun einige Eigenschaften fastperiodischer Funktionen kennengelernt haben, sind wir daran interessiert, wie sich solche Funktionen darstellen lassen. Betrachten wir nun fastperiodische Funktionen auf \mathbb{R} , welche durch eine Reihe der Form

$$f(x) = \sum_{k=1}^N a_k e^{i\lambda_k x} \quad a_k \in \mathbb{C}, \lambda_k \in \mathbb{R} \quad (3.3)$$

gebildet werden. Dies sind genau die Funktionen, an denen wir interessiert sind, da sie das Zeitverhalten auf Bindungszuständen beschreiben. Der Abschluss dieser Funktionenmenge bezüglich der Supremumsnorm bildet sogar die Menge aller fastperiodischen Funktionen². Es lässt sich also jede fastperiodische Funktion als Limes gleichmäßiger Konvergenz dieser *trigonometrischen Polynome* (3.3) darstellen. Wir hätten die Menge der fastperiodischen Funktionen also auch als den Abschluss der Menge aller trigonometrischen Polynome bezüglich der Supremumsnorm definieren können. Dann hätten sich die Eigenschaften aus Satz 3.1.2 sofort ergeben. Sind die Exponenten λ_k dieser Reihe (3.3) in einem rationalen Verhältnis zueinander, so ist diese sogar periodisch.

Da die fastperiodischen Funktionen abgeschlossen sind unter der inneren Addition, der punktweisen und äußeren Multiplikation, der komplexen Konjugation und vollständig bezüglich der Supremumsnorm, liegt es nahe, genauer zu untersuchen, welche algebraische Struktur vorliegt.

3.2 Die Algebra der fastperiodischen Funktionen

Betrachten wir nun die Struktur von fastperiodischen Funktionen auf \mathbb{R} etwas genauer. Da die Menge der fastperiodischen Funktionen abgeschlossen bezüglich der Addition, Multiplikation, der Limesbildung bezüglich der Supremumsnorm, sowie der komplexen Konjugation ist und

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} |f(x)\overline{f(x)}| = \sup_{x \in \mathbb{R}} |f(x)|^2 = \left(\sup_{x \in \mathbb{R}} |f(x)| \right)^2 \quad (3.4)$$

gilt, ist es möglich, sie als C^* -Algebra aufzufassen.

Definition 3.2.1. *Eine $*$ -Algebra \mathcal{A} ist ein \mathbb{C} -Vektorraum, auf dem zusätzlich ein assoziatives, bilineares inneres Produkt $\mathcal{A} \times \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$ und eine Involution $*$: $\mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$ mit folgenden Eigenschaften :*

$$(a^*)^* = a \quad (3.5)$$

$$(\lambda a + \mu b)^* = \bar{\lambda} a^* + \bar{\mu} b^* \quad (3.6)$$

$$(ab)^* = b^* a^* \quad (3.7)$$

für alle $a, b \in \mathcal{A}$ und $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$ erklärt ist.

²Siehe z.B. Loomis[8].

Definition 3.2.2. Ist auf einer $*$ -Algebra \mathcal{A} eine Norm mit der Eigenschaft $\|aa^*\| = \|a\|^2$ für alle $a \in \mathcal{A}$ erklärt und bezüglich dieser vollständig, so heißt die Algebra C^* -Algebra.

Seien f und g komplexwertige fastperiodische Funktionen auf \mathbb{R} , so erklären wir eine C^* -Algebra durch :

$$(f + g)(x) := f(x) + g(x) \quad (3.8)$$

$$(\alpha f)(x) := \alpha f(x) \quad (3.9)$$

$$(fg)(x) := f(x)g(x) \quad (3.10)$$

$$f^*(x) := \overline{f(x)} \quad (3.11)$$

mit der Norm

$$\|f\| := \sup_{x \in \mathbb{R}} |f(x)|. \quad (3.12)$$

Aus der Definition folgt, dass $\|f^*f\| = \|f\|^2$ ist. Aufgrund der definierten Multiplikation (3.10) haben wir es mit einer kommutativen C^* -Algebra zu tun. Desweiteren hat die Algebra sogar ein Einselement, da die konstanten Funktionen ebenfalls fastperiodisch sind.

3.2.1 Die Struktur kommutativer C^* -Algebren

Auf einer kommutativen C^* -Algebra kann man nun die *Charaktere* ω betrachten.

Definition 3.2.3. Sei \mathcal{A} eine abelsche C^* -Algebra. Ein Charakter ω von \mathcal{A} ist eine nichtverschwindende lineare Abbildung $\omega : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{C}$, $A \mapsto \omega(A)$, welche die Eigenschaft $\omega(AB) = \omega(A)\omega(B)$ für alle $A, B \in \mathcal{A}$ besitzt. Die Menge aller Charaktere von \mathcal{A} heißt das Spektrum $\sigma(\mathcal{A})$ von \mathcal{A} .

Die Charaktere bilden eine Teilmenge des Dualraums von \mathcal{A} , welchen wir mit \mathcal{A}^* bezeichnen. Nun kann man auf \mathcal{A}^* verschiedene Topologien betrachten. In unserem Fall ist es besonders interessant, zwischen punktwiser und gleichmäßiger Konvergenz auf \mathcal{A}^* zu unterscheiden.

Definition 3.2.4. Die durch die Umgebungsbasen

$$\mathcal{U}_N(\omega, \varepsilon) = \left\{ \omega' \mid \omega' \in \mathcal{A}^*, \|\omega - \omega'\| < \varepsilon \right\} \quad (3.13)$$

mit der Norm $\|\omega\| = \sup_{\|A\|=1} |\omega(A)|$ erzeugte Topologie auf \mathcal{A}^* heißt *uniforme oder Normtopologie*. Dies ist die Topologie der *gleichmäßigen Konvergenz*.

Durch $A_1, A_2, \dots, A_n \in \mathcal{A}$, $n \in \mathbb{N}$ und $\varepsilon > 0$ erklären wir mit den Umgebungsbasen

$$\mathcal{U}_G(\omega, A_1, \dots, A_n, \varepsilon) = \left\{ \omega' \mid \omega' \in \mathcal{A}^*, |\omega'(A_i) - \omega(A_i)| < \varepsilon, \forall i = \{1, \dots, n\} \right\} \quad (3.14)$$

die *schwach*- oder Gelfand-Topologie* auf \mathcal{A}^* . Diese Topologie beschreibt die *punktweise Konvergenz* auf \mathcal{A}^* .

Untersuchen wir nun die topologische Struktur des Spektrums $\sigma(\mathcal{A})$, einer kommutativen C^* -Algebra. Da die Charaktere von \mathcal{A} eine Teilmenge des Dualraums \mathcal{A}^* von \mathcal{A} sind, können wir nun die Relativtopologie auf $\sigma(\mathcal{A})$ bezüglich der schwach*- Topologie auf \mathcal{A}^* betrachten. Es gilt folgender Satz :

Satz 3.2.5 (Gelfand). *Sei \mathcal{A} eine kommutative C^* -Algebra und \mathcal{X} die Menge aller Charaktere zusammen mit der Relativtopologie bezüglich der schwach*- Topologie auf \mathcal{A}^* , dann ist \mathcal{X} ein lokalkompakter topologischer Hausdorffraum. \mathcal{X} ist genau dann kompakt, wenn \mathcal{A} eine Identität besitzt.*

*$a \mapsto \hat{a} \in C_0(\mathcal{X})$ mit $a \in \mathcal{A}$ und $\hat{a}(\omega) := \omega(a)$ definiert einen *-Isomorphismus, welcher Gelfandtransformation genannt wird.*

Beweis. Siehe Bratteli, Robinson [16]. □

Eine kommutative C^* -Algebra mit Einselement ist also isomorph zu der Algebra der stetigen Funktionen auf einer kompakten Menge. Wir erhalten das Resultat, dass die Algebra der fastperiodischen Funktionen isomorph zu einer Algebra bestimmten Funktionen auf einer kompakten Menge ist. Durch Satz 3.2.5 sind wir nun in der Lage, Kompaktifizierungen von Mengen und darauf definierten Funktionen zu konstruieren.

Beispiel 3.2.1. *Betrachten wir die C^* -Algebra \mathcal{A} der stetigen Funktionen $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, für die die Grenzwerte $\lim_{x \rightarrow +\infty} f(x)$ und $\lim_{x \rightarrow -\infty} f(x)$ existieren. Um die Struktur einer C^* -Algebra zu erhalten definieren wir :*

$$(f + g)(x) := f(x) + g(x) \quad (3.15)$$

$$(fg)(x) := f(x)g(x) \quad (3.16)$$

$$(\alpha f)(x) := \alpha f(x) \quad (3.17)$$

$$f^*(x) := \overline{f(x)} \quad (3.18)$$

$$\|f\|_{\mathcal{A}} := \sup_{x \in \mathbb{R}} |f(x)| \quad (3.19)$$

Diese Algebra besitzt eine Identität, da $f_1(x) = 1$ ebenfalls in dieser Klasse von Funktionen enthalten ist.

Suche wir nun nach den Charakteren auf dieser Algebra. Zunächst haben wir folgende lineare Abbildungen, welche $\omega(AB) = \omega(A)\omega(B)$ erfüllen :

$$\omega_x(f) := f(x) \quad \forall x \in \mathbb{R}. \quad (3.20)$$

Aber auch

$$\omega_{+\infty}(f) := \lim_{x \rightarrow +\infty} f(x) \text{ und} \quad (3.21)$$

$$\omega_{-\infty}(f) := \lim_{x \rightarrow -\infty} f(x) \quad (3.22)$$

sind Charaktere von \mathcal{A} . Diese sind alle Charaktere von \mathcal{A} . Die Menge der Charaktere \mathcal{X} ist nach dem Satz von Gelfand kompakt bezüglich der schwach- Topologie.*

Führen wir nun die Indexmenge $\tilde{\mathbb{R}} := \{-\infty\} \cup \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ ein, so dass die Charaktere durch ω_α mit $\alpha \in \tilde{\mathbb{R}}$ beschrieben werden können. Da es eine

bijektive Abbildung h zwischen \mathcal{X} und $\tilde{\mathbb{R}}$ gibt, können wir auf $\tilde{\mathbb{R}}$ eine Topologie definieren. Die Urbilder offener Teilmengen $\mathcal{O}_{\mathcal{X}}$ von \mathcal{X}

$$\mathcal{O}_{\tilde{\mathbb{R}}} := h[\mathcal{O}_{\mathcal{X}}] \tag{3.23}$$

fassen wir nun als die offenen Mengen in $\tilde{\mathbb{R}}$ auf.

Wir wissen aus Satz 3.2.5, dass die Menge der Charaktere kompakt ist, also auch $\tilde{\mathbb{R}}$. Desweiteren stellen wir fest, dass \mathbb{R} dicht in $\tilde{\mathbb{R}}$ liegt. Mit dieser Methode haben wir eine Kompaktifizierung von \mathbb{R} gewonnen.

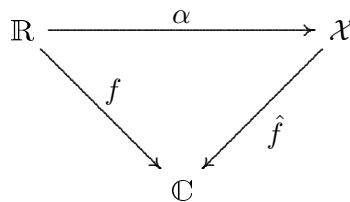
Beispiel 3.2.2. Definieren wir ähnlich wie im Beispiel 3.2.1 die C^* -Algebra \mathcal{P} der stetigen periodischen Funktionen auf \mathbb{R} mit Periode P . Als Charaktere fassen wir die Abbildungen

$$\omega_x(f) := f(x + nP) \quad x \in [0, P), \forall n \in \mathbb{N} \tag{3.24}$$

auf. Die Einschränkung auf diese Indermenge ist nötig, da durch die Periodizität von f sonst einzelne Charaktere mehrfach gezählt würden. Auch in diesen Beispiel erhalten wir einen kompakten, hausdorffschen topologischen Raum, nämlich die Einpunktkompaktifizierung vom Intervall $(0, P)$.

3.2.2 Die Bohrkompaktifizierung von \mathbb{R}

Betrachten wir eine C^* -Algebra \mathcal{A} von Funktionen $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ auf der additiven Gruppe der reellen Zahlen mit Werten in den komplexen Zahlen, so kann man die Frage stellen, wie das Verhältnis zwischen \mathbb{R} und der Menge der Charaktere \mathcal{X} ist.



\hat{f} ist die in Satz 3.2.5 definierte Abbildung $\mathcal{X} \rightarrow \mathbb{C}$, $\alpha : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{X}$ wird durch $f(x) = \hat{f}(\alpha(x))$ definiert. Wir wählen die Gelfandtransformierte \hat{f} von f also so, dass die Charaktere $\omega \in \mathcal{X}$, wie in den Beispielen, die Eigenschaft $\omega_x(f) = f(x)$ haben³.

Wir zeigen nun, dass \mathbb{R} in gewisser Weise dicht in \mathcal{X} eingebettet werden kann.

Satz 3.2.6. Das Bild $\alpha[\mathbb{R}] := \left\{ \omega \mid \omega \in \mathcal{X}, \omega = \alpha(x), x \in \mathbb{R} \right\}$ liegt dicht in \mathcal{X} .

Beweis. Die schwach*-Topologie auf \mathcal{X} überträgt man, mittels α auf die Urbilder offener Mengen, nach \mathbb{R} , so dass α stetig ist. Sei $\alpha[\mathbb{R}]$ nicht dicht in \mathcal{X} , so existiert mindestens eine offene Umgebung \mathcal{U} auf \mathcal{X} , in der kein Element aus $\alpha[\mathbb{R}]$ liegt. Betrachten wir nun $\hat{f} \in \mathcal{C}_0(\mathcal{X})$, welche nur in \mathcal{U} nicht verschwindet. Diese nichtverschwindende Abbildung ist nicht die Gelfandtransformierte der Nullabbildung auf \mathbb{R} , ein Widerspruch. \square

³Lassen wir hier zunächst offen, welche Eigenschaften wir von den x fordern.

Fassen wir nun die bisherigen Sätze zusammen, bleibt für den folgenden Satz zu zeigen, dass sich die Gruppenstruktur von \mathbb{R} auf ganz \mathcal{X} überträgt.

Satz 3.2.7. *Ist $(\mathbb{R}, +, 0)$ die topologische Gruppe der reellen Zahlen mit der Addition, so gibt es eine kompakte Gruppe \mathcal{X} und einen stetigen Homomorphismus α auf \mathbb{R} in eine dichte Untergruppe von \mathcal{X} , so dass eine Funktion f auf \mathbb{R} dann und nur dann fastperiodisch ist, wenn es eine stetige Funktion \hat{f} auf \mathcal{X} mit $f(x) = \hat{f}(\alpha(x))$ gibt.*

Beweis. Siehe Loomis [8]. □

Die kompakte Gruppe des vorangegangenen Satzes ist in gewisser Weise sogar eindeutig, denn es gilt

Satz 3.2.8. *Sei G eine topologische Gruppe, dann existiert eine kompakte Gruppe Σ und ein stetiger Homomorphismus $\alpha : G \rightarrow \Sigma$ mit der folgenden Eigenschaft : Für jede kompakte Gruppe Σ' und jeden stetigen Homomorphismus $\alpha' : G \rightarrow \Sigma'$ existiert ein eindeutiger Homomorphismus $\gamma : \Sigma \rightarrow \Sigma'$, so dass $\alpha' = \gamma \circ \alpha$ ist.*

Beweis. Der Beweis ist bei Dixmier [9] nachzulesen. □

Die durch Satz 3.2.7 definierte kompakte Gruppe \mathcal{X} wird die *Bohrkompaktifizierung von \mathbb{R}* genannt.

Die Bohrkompaktifizierung ist eine kompakte Menge, welche $\alpha[\mathbb{R}]$ als dichte Teilmenge enthält. Weiter wissen wir, dass es eine Funktion \hat{f} auf \mathcal{X} gibt, für die $f(x) = \hat{f}(\alpha(x))$ gilt. Das Integral von \hat{f} über \mathcal{X} kann benutzt werden um ein Integral von Funktionen f auf \mathbb{R} zu definieren. Die Bohrkompaktifizierung ist allerdings ein abstraktes Objekt, so dass es nicht ohne weiteres möglich ist, eine solche Integration explizit auszuführen.

Nun haben wir es, wenn wir die Zeitentwicklung physikalischer Systemen in Bindungszuständen betrachten, nicht zwangsläufig mit der Menge aller fastperiodischen Funktionen zu tun. Erinnern wir uns an die physikalische Motivation unserer Untersuchungen und machen uns klar, dass wir bei Betrachtung einer Zeitentwicklung auf Bindungszuständen in der Regel endliche Linearkombinationen trigonometrischer Monome betrachten.⁴ Wir brauchen uns also nicht auf alle fastperiodischen Funktionen zu konzentrieren, es reicht aus, nur bestimmte Teilmengen der Algebra aller fastperiodischen Funktionen zu berücksichtigen. Betrachten wir einen Hamiltonoperator, welcher ein diskretes Spektrum besitzt. Die Zeitentwicklung eines Zustandes φ dieses Systems wird dann durch Terme der Form $\alpha e^{-i(E_n - E_{n'})t}$ gegeben, wobei E_n und $E_{n'}$ aus dem Energiespektrum sind.

Fahren wir nun fort, indem wir die C^* -Algebren betrachten, welche durch endlich viele Ausdrücke $T_\lambda := e^{i2\pi\lambda x}$ erzeugt werden. Um die Struktur einer Algebra zu erhalten, müssen wir sicherstellen, dass Linearkombinationen der T_λ , sowie innere Produkte wieder in unserer zu konstruierenden Menge enthalten

⁴Bindungszustände sind im allgemeinen keine endlichen Superpositionen stationärer Zustände. Gehen wir aber davon aus, dass sich Bindungszustände gut durch eine endliche Anzahl stationärer Zustände approximieren lassen.

sind. Es ist also nötig, bei gegebenen T_{λ_i} auch $T_{\sum_i \lambda_i}$ und $T_{n\lambda}$ $n \in \mathbb{N}$ mit einzubeziehen. Um auch noch zu erreichen, dass mit T_λ auch sein komplex konjugiertes $\overline{T_\lambda}$ in unserer "Algebra" liegen, nehmen wir noch $T_{-\lambda}$ mit hinzu.

Definition 3.2.9. Sei $\Gamma = \{\lambda_1, \dots, \lambda_N\} \subset \mathbb{R}$, so nennen wir $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ mit

$$f(x) = \sum_j \alpha_j e^{i2\pi \sum_k z_{jk} \lambda_{jk} x}, \quad (3.25)$$

$\alpha_j \in \mathbb{C}$, $z_{jk} \in \mathbb{Z}$ und $\lambda_{jk} \in \Gamma$ eine Γ -fastperiodische Funktion.

Die Γ -fastperiodischen Funktionen sind abgeschlossen unter der punktweisen Addition und Multiplikation sowie der äusseren Multiplikation. Erklären wir nun mit der komplexen Konjugation noch eine Involution, so folgt : Der Abschluss der Menge aller Γ -fastperiodischen Funktionen auf \mathbb{R} bezüglich der Supremumsnorm, ist eine kommutative C^* -Algebra mit Einselement, welche wir mit \mathcal{A}_Γ bezeichnen wollen.

Es ist zu beachten, dass \mathcal{A}_Γ nicht zwangsläufig von $\mathcal{A}_{\Gamma'}$ verschieden ist, auch wenn $\Gamma \neq \Gamma'$. So ist z.B. $\mathcal{A}_{\{1\}} = \mathcal{A}_{\{1,2\}}$, da mit 1 jeweils auch $2 \cdot 1$ als Exponent in Gleichung (3.25) vorhanden ist. Es gilt jedoch z.B. nicht, dass die fastperiodischen Funktionenalgebren $\mathcal{A}_{\{1\}}$ und $\mathcal{A}_{\{2\}}$ gleich sind, da $1 \neq 2z$ mit $z \in \mathbb{Z}$. Sind aber die $\lambda_i \in \Gamma$ durch \mathbb{Z} -Linearkombinationen von $\lambda'_i \in \Gamma'$ darstellbar, so gilt für die entsprechenden Algebren $\mathcal{A}_\Gamma \subset \mathcal{A}_{\Gamma'}$.

Nun können \mathbb{Z} -lineare Abhängigkeiten auch innerhalb von Γ vorliegen. Ist also ein λ_i als Linearkombination der anderen λ_j als $\lambda_i = \sum_{k \neq i} z_k \lambda_k$ darstellbar, so können wir auf dieses Element in Γ verzichten und erhalten dennoch die gleiche Algebra. Die minimale Anzahl der $\lambda \in \Gamma$, welche wir zur Charakterisierung einer Algebra Γ -fastperiodischer Funktionen benötigen, nennen wir den *Grad von Γ* . Betrachten wir z.B. eine Algebra Γ -fastperiodischer Funktionen mit $\Gamma = \{1, \sqrt{2}, 2\}$. Da sich die 2 als \mathbb{Z} -Linearkombination von $\{1, \sqrt{2}\}$ darstellen lässt, während $\sqrt{2}$ \mathbb{Z} -unabhängig von 1 und 2 ist, ergibt sich der Grad dieser Algebra \mathcal{A}_Γ zu zwei.

Sind alle $\lambda \in \Gamma$ unabhängig über \mathbb{Q} , so ist der Grad von Γ gleich der Mächtigkeit von Γ . In solch einer Situation ist es nicht möglich auf eine der "Frequenzen" zu verzichten. Gehen wir nun davon aus, dass die Differenzen der Energieeigenwerte unseres gebundenen Systems rational unabhängig sind. Da zur Bestimmung der Eigenwerte in der Regel transzendente Gleichungen zu lösen sind, sollte diese Annahme im Allgemeinen gerechtfertigt sein. Alternativ stellen wir uns vor, dass eine kleine Störung eines Quantensystems ausreichen würde rationale Abhängigkeiten zu zerstören. Die Energieeigenwerte eines gestörten Hamiltonoperators sollten ja stetig von der "Stärke" der Störung abhängen.

Ist $\Gamma = \mathbb{R}$, so ist $\mathcal{A}_\mathbb{R}$ die Algebra aller fastperiodischen Funktionen. \mathcal{A}_Γ ist demnach immer in $\mathcal{A}_\mathbb{R}$ enthalten. Wenden wir nun Satz 3.2.5 auf \mathcal{A}_Γ an, so erhalten wir, analog zur Bohrkompaktifizierung, eine kompakte Gruppe \mathcal{X}_Γ , welche wir als Γ -fastperiodische Kompaktifizierung oder fastperiodische Kompaktifizierung von \mathbb{R} bezeichnen.

Für eine Γ -fastperiodische Funktionen, mit \mathbb{Q} unabhängigen Γ , wird sich zeigen, dass wir als kompakte Gruppen \mathcal{X}_Γ den N -Torus $(S^1)^N$ erhalten, wobei

N der Grad von Γ ist. Die Gruppenstruktur von $(\mathbb{R}, +, 0)$ überträgt sich mittels $\mathbb{R} \ni x \mapsto (e^{i\lambda_i x}, i \in \{1, 2, \dots, N\}) \in (S^1)^N$ bezüglich der komponentenweisen Multiplikation auf den Torus.

Wir verfügen nun über die Werkzeuge, die wir benötigen, dem Integral in (2.68) einen Sinn zu geben. Machen wir uns nun daran, die Kompaktifizierung explizit zu konstruieren.

3.3 Konstruktion einer fastperiodischen Kompaktifizierung von \mathbb{R}

Im vorangegangenen Abschnitt haben wir gesehen, dass man eine Kompaktifizierung der reellen Zahlen finden kann. Genauer gesagt, sind wir in der Lage, einer fastperiodischen Funktion f eine kompakte Menge zuzuordnen, welche das homomorphe Bild von \mathbb{R} als dichte Teilmenge enthält. Auf diesem Kompaktum existiert eine Funktion \hat{f} , welche ausgewertet auf dem Bild von \mathbb{R} die gleichen Werte liefert wie f . Haben wir diese kompakte Menge gefunden, sind wir in der Lage, Integralen über beliebige fastperiodische Funktionen einen Sinn zu geben.

Versuchen wir nun eine kompakte Menge mit den nötigen Eigenschaften für Funktionen der Form

$$f(x) = \sum_{n=0}^N \alpha_n e^{i\lambda_n x} \quad (3.26)$$

zu konstruieren. Dabei gehen wir ähnlich vor wie in den Beispielen des vorangegangenen Abschnitts. Wir bestimmen das Spektrum einer C^* -Algebra von Funktionen, welches kompakt ist. Die ursprüngliche Funktionenalgebra ist dann isomorph zu Funktionen auf diesem Kompaktum. Bestimmen wir erst einmal die hier relevante Funktionenalgebra.

Wir haben es hier mit einer Überlagerung verschiedener periodischer Funktionen zu tun. Haben die Frequenzen zweier periodischer Funktionen λ_1 und λ_2 ein rationales Verhältnis zueinander, so ist die Summe dieser Funktionen wieder periodisch. Ein fastperiodisches aber nicht periodisches Verhalten ergibt sich also nur, wenn in der Summe (3.26) mindestens zwei rational unabhängige Frequenzterme vorkommen.

Sind die Frequenzen $\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\} = \Gamma$ der Zeitenwicklung eines quantenmechanischen Systems z.B. aus Spektroskopie oder einer Fourieranalyse bekannt, so können wir eine Γ -fastperiodische Funktion f studieren. Aus den Betrachtungen des vorangegangenen Abschnitts wissen wir, dass wir den Definitionsbereich dieser Funktion f dicht in ein Kompaktum \mathcal{X}_Γ einbetten können und eine Fortsetzung \hat{f} von $\alpha \circ f$ auf \mathcal{X}_Γ finden können. Um dies konkret zu bewerkstelligen, bilden wir $x \in \mathbb{R}$ auf

$$x_n = \frac{\lambda_n}{2\pi} x \quad (3.27)$$

ab. Fassen wir die x_n als unabhängige Variable auf, so ergibt sich aus (3.26) somit

$$\tilde{f}(x_1, \dots, x_N) := \sum_{n=0}^N a_n e^{i2\pi x_n}. \quad (3.28)$$

Diese Funktion \tilde{f} ist, wegen der Periodizität der komplexen Exponentialfunktion, auf $\mathbb{R}^N / \mathbb{Z}^N =: \mathbb{T}^N$ mit Werten in \mathbb{C} definiert. Nun stellt sich die Frage, ob das Bild des Definitionsbereiches von f tatsächlich dicht in dem von \tilde{f} liegt. Ist die Menge $\beta(x) := (x_1, \dots, x_N) = \frac{x}{2\pi} (\lambda_1, \dots, \lambda_N) \bmod 1, x \in \mathbb{R}$, auf der f mit \tilde{f} übereinstimmt, also dicht in \mathbb{T}^N . Im allgemeinen ist dies sicher nicht der Fall. Da wir uns aber auf rational unabhängige Γ beschränkt haben, ist der Grad von Γ gleich N . Es sind also keine Frequenzen $\lambda \in \Gamma$ vorhanden, welche

durch \mathbb{Z} -Linearkombinationen der anderen dargestellt werden können. Solche Abhängigkeiten würden es sicher unmöglich machen den Torus dicht mit dem Bild von \mathbb{R} unter β auszufüllen.

Wir betrachten nun die C^* -Algebra \mathcal{A}_Γ , welche von Γ erzeugt wird. Die betrachteten Γ -fastperiodischen Funktionen können als Frequenzen alle ganzzahligen Linearkombinationen aus Γ enthalten. Bezüglich unserer Untersuchungen von Bindungszuständen entspricht dies der Tatsache, dass die "Übergänge" zwischen benachbarten Energieniveaus einen Beitrag zur Dimension des Torus liefern, die zusammengesetzten aus mehreren Sprüngen jedoch nicht.

Als Charaktere ziehen wir nun

$$\omega_{\vec{x}}(f) = \tilde{f}(\vec{x}) \quad \text{mit } \vec{x} \in \mathbb{R}^{N'} / \mathbb{Z}^{N'} \quad (3.29)$$

in Betracht. Die so definierten Abbildungen sind linear und erfüllen die Produkteigenschaft $\omega(fg) = \omega(f)\omega(g)$, so dass wir hier von Charakteren sprechen können. Um zu überprüfen, ob wir alle Charaktere gefunden haben, müssen wir zeigen, dass diese Menge kompakt bezüglich der schwach*-Topologie ist und $\beta[\mathbb{R}]$, in dieser dicht liegt. Die Menge $\mathbb{R}^N / \mathbb{Z}^N$ ist isomorph zu $(S^1)^N$ und somit ein kartesisches Produkt kompakter Räume, also ebenfalls kompakt (Tychonoffs Theorem).

Satz 3.3.1 (Tychonoff). *Sei $\{A_\alpha\}_{\alpha \in I \subset \mathbb{N}}$ eine Familie kompakter Räume. Dann ist*

$$\prod_{\alpha \in I} A_\alpha \quad (3.30)$$

kompakt in der Produkttopologie.

Beweis. Reed und Simon beweisen diesen Satz [6]. □

Die Abbildung $\beta : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^N / \mathbb{Z}^N = \mathbb{T}^N$ erzeugt den Orbit

$$O_{\mathbb{R}}^{\mathbb{T}^N} = \left\{ \vec{x} \in \mathbb{T}^N \mid \vec{x} = \beta(x), x \in \mathbb{R} \right\}. \quad (3.31)$$

$$= \left\{ \vec{x} \in \mathbb{T}^N \mid \vec{x} = (\lambda_1, \dots, \lambda_N) \frac{x}{2\pi} \bmod 1, x \in \mathbb{R} \right\} \quad (3.32)$$

Es bleibt zu zeigen, dass dieser dicht in \mathbb{T}^N liegt. Um dies zu bewerkstelligen, greifen wir auf Sätze der Zahlentheorie zurück.

Satz 3.3.2 (Kroneckers Theorem). *Sind $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ n \mathbb{Q} -linear unabhängige reelle Zahlen, ϕ_1, \dots, ϕ_n n beliebige reelle Zahlen und $\varepsilon > 0$, dann gibt es n ganze Zahlen h_1, \dots, h_n und ein $t \in \mathbb{R}$, so dass*

$$|\lambda_i t - \phi_i - h_i| < \varepsilon \quad \forall i \in I = \{1, \dots, n\} \quad (3.33)$$

gilt.

Beweis. Zu diesem Satz gibt es eine Reihe von Beweisen, ich möchte hier auf Bohr und Jessen[19] oder Hardy und Wright [17] verweisen. □

3.3 Konstruktion einer fastperiodischen Kompaktifizierung von \mathbb{R}^{27}

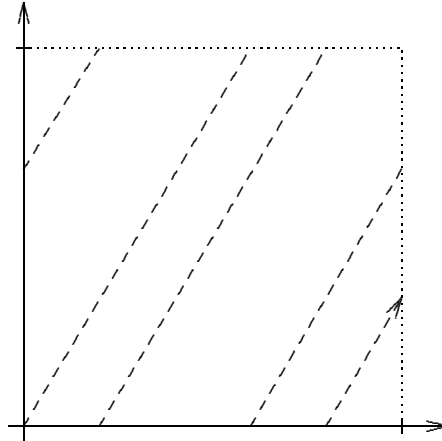


Abbildung 3.1: Orbit $O_{\mathbb{R}}^{\mathbb{T}^2}$ von \mathbb{R} auf den 2-Torus

Lassen wir ε beliebig klein werden so folgt, dass es ein $t \in \mathbb{R}$ mit

$$e^{i2\pi(\lambda_i t - \phi_i)} \approx 1 \quad \forall i \in I \quad (3.34)$$

gibt. Daraus folgt

$$e^{i2\pi\lambda_i t} \approx e^{i2\pi\phi_i}. \quad (3.35)$$

Es gibt also für jede beliebige Phase ein $t \in \mathbb{R}$, so dass λ_i ausreicht, diese beliebig genau darzustellen. Tatsächlich gilt sogar der stärkere Satz [21][18]

Satz 3.3.3 (Bohr, Sierpiński, Weyl). Sind $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ \mathbb{Q} -linear unabhängige reelle Zahlen, dann konvergiert

$$\lim_{\mu^{\mathbb{R}}(I) \rightarrow \infty} \rho(I, X) = \mu^{\mathbb{T}^n}(X), \quad (3.36)$$

gleichmäßig in I , mit $X \subset \mathbb{T}^n$ messbar, Lebesgue Maß $\mu^{\mathbb{R}}$ auf \mathbb{R} , normierten Haar-Mass $\mu^{\mathbb{T}^n}$ auf \mathbb{T}^n und

$$\rho(I, X) = \frac{\mu^{\mathbb{R}}(\{t \in I \subset \mathbb{R} \mid \vec{\lambda}t \in X\})}{\mu^{\mathbb{R}}(I)} \quad \text{mit } (\lambda_1, \dots, \lambda_n) = \vec{\lambda}. \quad (3.37)$$

Oder nach einer anschaulichen Formulierung von Weyl :

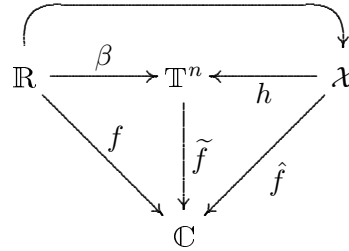
Bewegt sich in \mathbb{T}^N ein Punkt mit konstanter Geschwindigkeit auf gerader Linie, so beträgt seine relative Verweilzeit in einem beliebigen Raumstück so viel, als das Volumen des Raumstückes angibt. Vorausgesetzt ist dabei, dass zwischen den Geschwindigkeitskomponenten keine homogene ganzzahlige lineare Relation besteht.

Beweis. Ein Beweis dieses Satzes wurde von Weyl [18] gegeben. □

Integrale fastperiodischer Funktionen f entsprechen in diesen Sinne also denen von \hat{f} über \mathbb{T}^N .

3.3.1 Die Topologie auf \mathbb{R} und seiner fastperiodischen Kompaktifizierung \mathbb{T}^n

Bevor wir nun konkret damit beginnen, Zeit-Observable auf Bindungszuständen zu untersuchen, werfen wir noch einen Blick auf die schwach*-Topologie. Diese wird von \mathcal{A}^* nach \mathcal{X} vererbt und dann mit Hilfe von α^{-1} auf \mathbb{R} übertragen.



Das h definieren wir hier wie im Beispiel 3.2.1 als bijektive Abbildung, durch die wir eine Topologie auf \mathbb{T}^n definieren. α und β spielen die gleiche Rolle wie im Satz 3.2.7 und dem vorangegangenen Abschnitt 3.3.

Wie sehen nun die Umgebungsbasen, z.B. um 0, auf \mathbb{T}^n und in \mathbb{R} aus? Die Umgebungen der schwach*-Topologie auf \mathcal{X} sind in Gl. (3.14) definiert. Es ergibt sich

$$h[\mathcal{U}(\omega_0, \{f_i\}, \varepsilon)] = h \left[\left\{ \omega \in \mathcal{X} \mid |\omega(f_i) - \omega_0(f_i)| < \varepsilon, \forall i \in I \right\} \right] \quad (3.38)$$

$$= h \left[\left\{ \omega_{\vec{x}} \in \mathcal{X} \mid |\omega_{\vec{x}}(f_i) - \omega_0(f_i)| < \varepsilon, \forall i \in I \right\} \right] \quad (3.39)$$

$$= h \left[\left\{ \omega_{\vec{x}} \in \mathcal{X} \mid |\hat{f}_i(\omega_{\vec{x}}) - \hat{f}_i(\omega_0)| < \varepsilon, \forall i \in I \right\} \right] \quad (3.40)$$

$$= \left\{ \vec{x} \in \mathbb{T}^n \mid |\tilde{f}_i(\vec{x}) - \tilde{f}_i(0)| < \varepsilon, \forall i \in I \right\} \quad (3.41)$$

Aufgrund der Stetigkeit von \tilde{f} sind diese Umgebungen auf dem Torus identisch

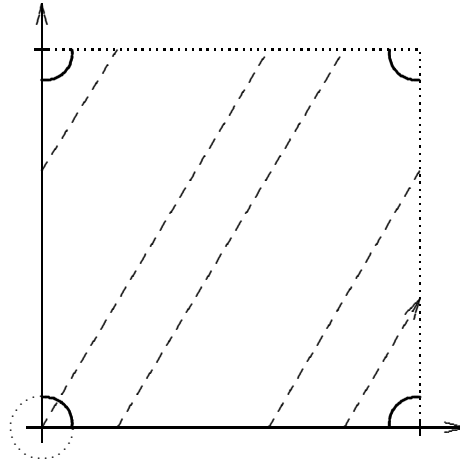


Abbildung 3.2: Umgebung um die 0 auf dem 2-Torus \mathbb{T}^2

mit denen bezüglich der euklidischen Topologie auf $\mathbb{R}^n/\mathbb{Z}^n$.

Folgen wir der anschaulichen Formulierung vom Satz 3.3.3, so ergibt sich folgendes Bild für die entsprechende Topologie auf \mathbb{R} . Die Umgebungen in

3.3 Konstruktion einer fastperiodischen Kompaktifizierung von \mathbb{R} 29

\mathbb{R} , der Zeitgeraden, sind genau die Zeiten, zu denen sich das mit konstanter Geschwindigkeit bewegende Teilchen, aus dem Satz von Weyl, im Gebiet $h[\mathcal{U}(\omega_0, f_i, \varepsilon)] \subset \mathbb{T}^n$ aufhält. Die Topologie auf \mathbb{R} definieren wir durch die Umgebungsbasen

$$\mathcal{U}_{\mathbb{R}}(x_0, f_i, \varepsilon) := \left\{ x \in \mathbb{R} \mid |\tilde{f}_i(\beta(x)) - \tilde{f}_i(\beta(x_0))| < \varepsilon, \forall i \in I \right\}. \quad (3.42)$$

Betrachten wir die Umgebungsbasen in \mathbb{R} genauer, so erhalten wir eine Vereinigung unendlich vieler offener Intervalle. Dies sind genau die Zeiten, in denen sich das Teilchen in der “Nähe” von x_0 aufhält. Aufgrund der Fastperiodizität kommt dieses beliebig oft vor.

Da wir jedoch im allgemeinen keine periodischen Funktionen betrachten, ist es nicht möglich, die genaue Lage dieser Intervalle auszudrücken⁵. Wichtig ist, dass die offenen Mengen eine Vereinigung unendlich vieler euklidisch offener Intervalle sind, so dass es nicht mehr abwegig erscheint, sich die reellen Zahlen bezüglich dieser Topologie als kompakt vorzustellen. Dieser Vorteil bringt es jedoch mit sich, dass wir sehr genau überlegen müssen, wie wir uns eine Integration über diesen topologischen Raum \mathbb{R} und seine Teilmengen vorzustellen und auszuführen haben.

⁵Ein ähnliches Verfahren wird in der Informatik sogar zur Erzeugung von Zufallszahlen verwendet[20].

Kapitel 4

Beispiele für gebundene Systeme mit Zeitobservable

Mit den nun zur Verfügung stehenden Rüstzeug werden wir uns daran machen, einige Systeme genauer zu studieren.

4.1 Der harmonische Oszillator

Als einfaches Beispiel für ein System mit Bindungszuständen betrachten wir nun den eindimensionalen harmonischen Oszillator. Als Eigenzustände des Hamiltonoperators

$$H = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\omega}{2} x^2 \quad (4.1)$$

ergeben sich die Funktionen

$$\varphi_n(x) = N_n (-1)^n e^{\frac{1}{2}y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}, \quad y = \sqrt{\omega}x \quad (4.2)$$

mit einem Normierungsfaktor N_n , der $\int |\varphi(x)|^2 dx = 1$ sicherstellt, besitzt die Eigenwerte

$$E_n = \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (4.3)$$

Dieses System enthält nur ganzzahlig abhängige Werte für die Energie. Es kommen demnach keine irrationalen Beziehungen zwischen den Frequenzen vor. Die Theorie des vorangegangenen Abschnittes kann dennoch angewendet werden, da die Zeitentwicklung nur von einem Element ω generiert wird. Wir haben hier eine Algebra fastperiodischer Funktionen $\mathcal{A}_{\{\omega\}}$ vorliegen. Da in jedem beliebigen Bindungszustand φ also nur eine unabhängige Frequenz vorliegt, erhalten wir als Kompaktifizierung von \mathbb{R} hier die S^1 .¹

¹Wegen der "echten" Periodizität dieser Zeitentwicklung, wird hier nicht ganz \mathbb{R} , sondern nur das Intervall $(0, 2\pi)$ in die S^1 eingebettet.

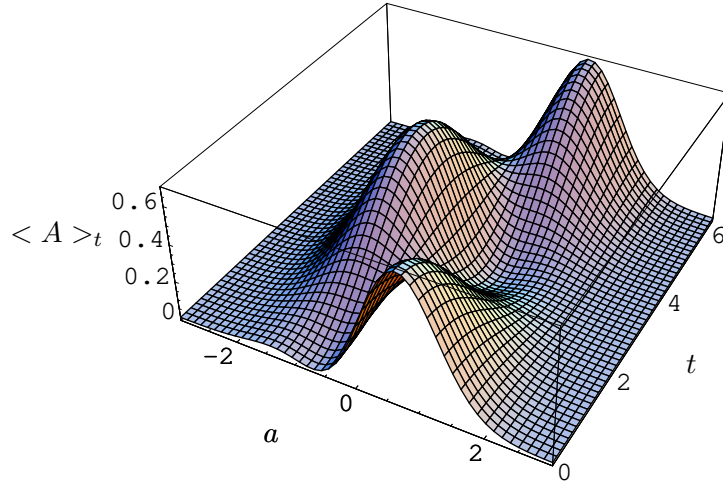


Abbildung 4.1: $(\varphi, A\varphi)$ gegen die Zeit t und den Ort a aufgetragen.

Die Zustände in diesen System sind von der Form $\varphi = \sum_k a_k \varphi_k$. Definieren wir die Gesamtdauer eines Ereignisses als das Integral

$$B_A = \int_{S^1} dt \alpha_t(A) \quad (4.4)$$

über die S^1 und nicht über \mathbb{R} . Integrieren wir also über Teilintervalle des Kreises, so erhalten wir für Gleichung (2.68)

$$(\varphi, P(I)\varphi) = (\varphi, B^{-1/2} B(I) B^{-1/2} \varphi) \quad (4.5)$$

mit $I \subset S^1$.

Zur Auswertung von Gl.(4.5) berechnen wir also

$$\begin{aligned} (\varphi, B\varphi) = \int_{S^1} \langle A \rangle_t dt &= \int_{S^1} \left(\sum_{n=0}^N |a_n|^2 (\varphi_n, A\varphi_n) + \right. \\ &\left. + 2 \sum_{n=1}^N \sum_{n'=0}^{N-n} \bar{a}_{n'} a_{n'+n} (\varphi_{n'}, A\varphi_{n+n'}) \cos(n\omega t) \right) dt \quad (4.6) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\omega} \int_0^{2\pi} \left(\sum_{n=0}^N |a_n|^2 (\varphi_n, A\varphi_n) + \right. \\ &\left. + 2 \sum_{n=1}^N \sum_{n'=0}^{N-n} \bar{a}_{n'} a_{n'+n} (\varphi_{n'}, A\varphi_{n+n'}) \cos(n\hat{t}) \right) d\hat{t} \quad (4.7) \\ &= \frac{2\pi}{\omega} \sum_{n=0}^N |a_n|^2 (\varphi_n, A\varphi_n). \quad (4.8) \end{aligned}$$

Die normierten Eigenzustände des Hamiltonoperators sind also auch Eigenzustände von B . Aus diesem Ausdruck lassen sich nun die Eigenwerte von B ablesen, sie ergeben sich zu

$$B\varphi_n = \frac{2\pi}{\omega}(\varphi_n, A\varphi_n)\varphi_n. \quad (4.9)$$

Nun können wir die Normierung des Maßes vornehmen. Für $I \subset (0, 2\pi)$ ergibt sich

$$\begin{aligned} (\varphi, P(I)\varphi) &= \frac{1}{\omega} \int_I \left(\sum_{n=0}^N |a_n|^2 (\varphi_n, B^{-1/2} A B^{-1/2} \varphi_n) + \right. \\ &\quad \left. + 2 \sum_{n=1}^N \sum_{n'=0}^{N-n} \overline{a_{n'}} a_{n'+n} (\varphi_{n'}, B^{-1/2} A B^{-1/2} \varphi_{n'+n}) \cos(n\hat{t}) \right) d\hat{t} \quad (4.10) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2\pi} \int_I d\hat{t} \left(\sum_{n=0}^N |a_n|^2 \left(\frac{\varphi_n}{\sqrt{(\varphi_n, A\varphi_n)}}, A \frac{\varphi_n}{\sqrt{(\varphi_n, A\varphi_n)}} \right) + \right. \\ &\quad \left. + 2 \sum_{n=1}^N \sum_{n'=0}^{N-n} \overline{a_{n'}} a_{n'+n'} \left(\frac{\varphi_{n'}}{\sqrt{(\varphi_{n'}, A\varphi_{n'})}}, A \frac{\varphi_{n'+n'}}{\sqrt{(\varphi_{n'+n'}, A\varphi_{n'+n'})}} \right) \cos(n\hat{t}) \right) \quad (4.11) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2\pi} \int_I d\hat{t} \left(\sum_{n=0}^N |a_n|^2 + \right. \\ &\quad \left. + 2 \sum_{n=1}^N \sum_{n'=0}^{N-n} \overline{a_{n'}} a_{n'+n} \frac{(\varphi_{n'}, A\varphi_{n'+n})}{\sqrt{(\varphi_{n'}, A\varphi_{n'})} \sqrt{(\varphi_{n'+n'}, A\varphi_{n'+n'})}} \cos(n\hat{t}) \right). \quad (4.12) \end{aligned}$$

Dieses Maß auf dem Intervall $(0, 2\pi)$ beschreibt die Wahrscheinlichkeit des Eintretens von Ereignis A im Zeitintervall I . Durch die Einschränkung auf $(0, 2\pi)$ können wir diese Information nur modulo einer Periode gewinnen, was allerdings nicht überraschend ist, da der harmonische Oszillator eine vollständig periodische Zeitentwicklung hat.

Betrachten wir als Operator A jetzt beispielsweise den Projektor auf das Raumintervall $(a, a + \varepsilon)$.

$$\begin{aligned} \int_I d\hat{t} \rho &:= (\varphi, P(I)\varphi) = \frac{1}{2\pi} \int_I d\hat{t} \left(\sum_{n=0}^N |a_n|^2 + \right. \\ &\quad \left. + 2 \sum_{n=1}^N \sum_{n'=0}^{N-n} \overline{a_{n'}} a_{n'+n} \frac{\int_a^{a+\varepsilon} dx \overline{\varphi_{n'}(x)} \varphi_{n'+n}(x) \cos(n\omega\hat{t})}{\sqrt{\int_a^{a+\varepsilon} dy |\varphi_{n'}(y)|^2} \sqrt{\int_a^{a+\varepsilon} dz |\varphi_{n'+n}(y)|^2}} \right) \quad (4.13) \end{aligned}$$

$(\varphi, P(I)\varphi)$ ergibt sich mit folgender Näherung für kleine ε

$$(\varphi, A\varphi) = \int_a^{a+\varepsilon} dx \overline{\varphi(x)} \varphi(x) \approx \varepsilon |\varphi(a)|^2 \quad (4.14)$$

zu

$$\begin{aligned}
(\varphi, P(I)\varphi) &= \frac{1}{2\pi} \int_I d\hat{t} \left(\sum_{n=0}^N |a_n|^2 + \right. \\
&\quad \left. + 2 \sum_{n=1}^N \sum_{n'=0}^{N-n} \overline{a_{n'}} a_{n'+n} \frac{\overline{\varphi_{n'}(a)} \varphi_{n'+n}(a)}{\sqrt{|\varphi_{n'}(a)|^2 |\varphi_{n'+n}(a)|^2}} \cos(n\omega\hat{t}) \right) \quad (4.15)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\pi} \int_I d\hat{t} \left(\sum_{n=0}^N |a_n|^2 + \right. \\
&\quad \left. + 2 \sum_{n=1}^N \sum_{n'=0}^{N-n} \overline{a_{n'}} a_{n'+n} \text{sign}(\varphi_{n'}(a) \varphi_{n'+n}(a)) \cos(n\omega\hat{t}) \right). \quad (4.16)
\end{aligned}$$

Im Zustand $\varphi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_0 + \varphi_1)$ mit $\omega = 1$ erhalten wir

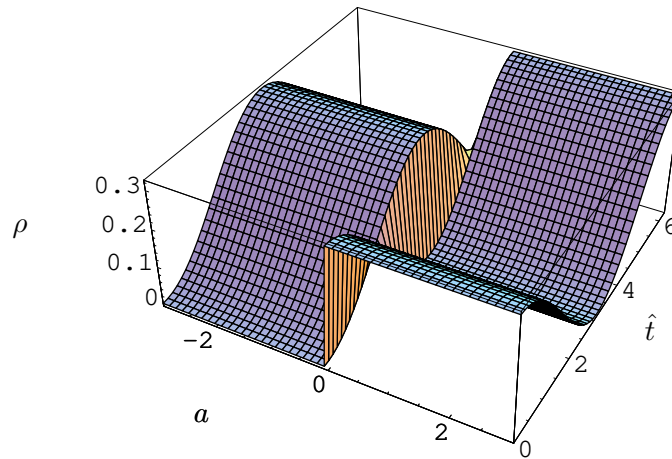
$$\begin{aligned}
(\varphi, P(I)\varphi) &= \frac{1}{4\pi} \int_I d\hat{t} \left(\left(\frac{\varphi_0}{\sqrt{\varepsilon|\varphi_0(a)|^2}}, A \frac{\varphi_0}{\sqrt{\varepsilon|\varphi_0(a)|^2}} \right) + \right. \\
&\quad + \left(\frac{\varphi_1}{\sqrt{\varepsilon|\varphi_1(a)|^2}}, A \frac{\varphi_1}{\sqrt{\varepsilon|\varphi_1(a)|^2}} \right) + \\
&\quad \left. + 2 \left(\frac{\varphi_0}{\sqrt{\varepsilon|\varphi_0(a)|^2}}, A \frac{\varphi_1}{\sqrt{\varepsilon|\varphi_1(a)|^2}} \right) \cos \hat{t} \right) \quad (4.17)
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_I d\hat{t} \left(1 + \frac{\overline{\varphi_0(a)} \varphi_1(a)}{|\varphi_0(a)| |\varphi_1(a)|} \cos \hat{t} \right) \quad (4.18)$$

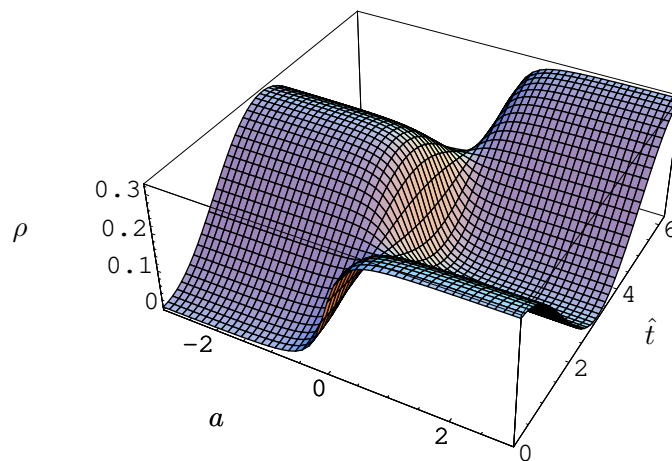
$$= \frac{1}{2\pi} \int_I d\hat{t} (1 + \text{sign}(\varphi_0(a) \varphi_1(a)) \cos \hat{t}). \quad (4.19)$$

Wir haben nun also ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf der kompaktifizierten Zeit dieses Quantensystems gefunden. Dieses Maß weist zum einen die Besonderheit auf, dass es stückweise nicht von a , dem Ort unseres “Detektors”, abhängt. Eine andere Auffälligkeit ist die Unstetigkeit der Verteilung bei den Nullstellen von $\varphi_n(a)$, diese sind aber nur ein Artefakt unserer Näherung (4.14) ε , die Breite unseres “Detektors”, beliebig klein zu machen. Eine Auswertung mit endlichen Werten für ε führt zu einer “Auswischung” der Verteilung um die Nullstellen der einzelnen Energieeigenfunktionen $\varphi_n(x)$.

Wie ist nun die stückweise Unabhängigkeit der Wahrscheinlichkeitsverteilung von a zu verstehen? Durch unsere Normierung des Maßes haben wir die Information darüber aufgegeben, wie wahrscheinlich unser Ereignis wirklich ist. Uns interessiert hier nicht wie wahrscheinlich das Ereignis generell ist, sondern nur, *wann* der wahrscheinlichste Zeitpunkt dafür ist. Dieses Maß ist in unserer Näherung zwischen den Nullstellen der $\varphi_n(a)$ konstant. Betrachten wir Zustände, welche aus mehr als zwei stationären Wellenfunktionen kombiniert sind, so wird sich eine immer feinere Treppenfunktion ergeben. Ist in einem System die Ausdehnung des “Detektors” in der gleichen Größenordnung wie die Abstände der Nullstellen, so ist dieses stückweise konstante Verhalten der Wahrscheinlichkeitsverteilung sicher nicht beobachtbar.



(a)



(b)

Abbildung 4.2: Das Wahrscheinlichkeitsmaß auf $(0, 2\pi)$ bei (a) $\varepsilon \rightarrow 0$ und (b) $\varepsilon = 1$.

4.2 Der Potentialkasten

Das eindimensionale System, welches durch den Hamiltonoperator

$$H = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (4.20)$$

mit

$$V(x) := \begin{cases} \infty & , x \leq 0 \\ -E_0 & , 0 < x < a \\ 0 & , x \geq a \end{cases} \quad (4.21)$$

definiert wird, werden wir nun genauer auf Bindungszustände untersuchen.

Mit den Randbedingungen $\varphi(0) = 0$, $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varphi(a - \varepsilon) = \lim_{\varphi \rightarrow 0} \varphi(a + \varepsilon)$ und $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varphi'(a - \varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varphi'(a + \varepsilon)$ ergeben sich die Lösungen der Schrödingergleichung mit $k = \sqrt{2m(E + E_0)}$ und $\tilde{k} = \sqrt{2m|E|}$ zu

$$\varphi(x) = \begin{cases} N \cos(kx + \varphi_0) & 0, x \leq a \\ N e^{\tilde{k}a} \cos(ka + \varphi_0) e^{-\tilde{k}x} & x \geq a. \end{cases} \quad (4.22)$$

Die Werte für k und \tilde{k} ergeben sich aus der transzendenten Gleichung

$$\tan(\sqrt{2m(E + E_0)}a + \varphi_0) = \sqrt{\frac{|E|}{E + E_0}}. \quad (4.23)$$

Für die Parameter $E_0 = 1$, $a = 6$, $\varphi_0 = \pi/2$ und $m = 1$ gibt es in diesem System

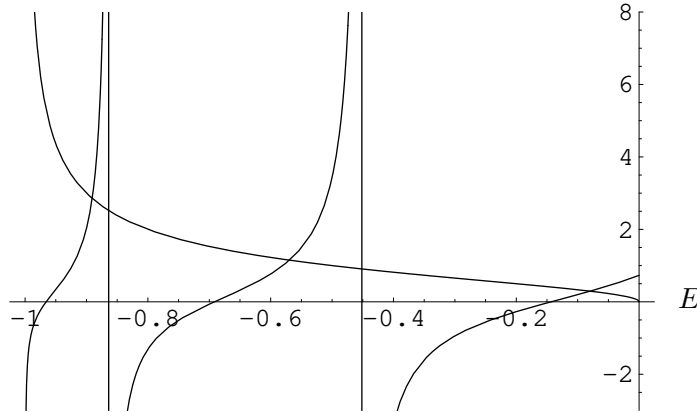


Abbildung 4.3: Bestimmung der Lösungen von Gl. (4.23), durch Auftragen der beiden Funktionen gegen die Energie E .

drei Energieeigenzustände $H\varphi_n = E_n\varphi$, mit den irrationalen Energiewerten $E_1 = -0.07969\dots$, $E_2 = -0.56948\dots$ und $E_3 = -0.89074\dots$

Betrachten wir nun den Bindungszustand

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{3}} (\varphi_1(x) + \varphi_2(x) + \varphi_3(x)), \quad (4.24)$$

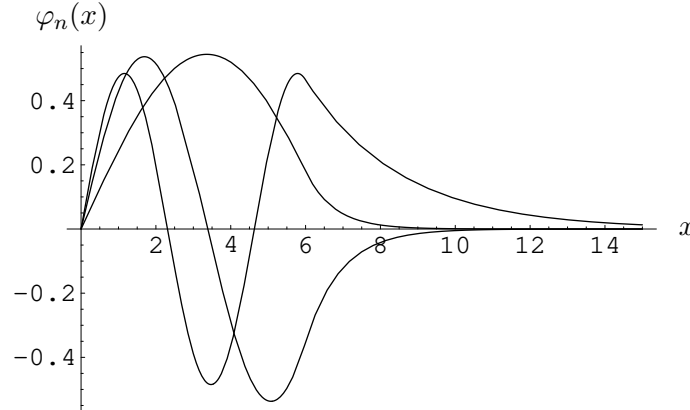


Abbildung 4.4: Die Lösungen der Schrödingergleichung $H\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x)$ für die drei stationären Zustände in diesem System.

so dass sich ein zeitabhängiger Zustand

$$\phi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\varphi_1(x)e^{iE_1t} + \varphi_2(x)e^{iE_2t} + \varphi_3(x)e^{iE_3t} \right) \quad (4.25)$$

ergibt. Da wir nun die Zeitentwicklung kennen, können wir wie in Abschnitt 2.2.3 eine Zeitobservable konstruieren. Untersuchen wir hierzu beispielsweise die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in einem kleinen Raumintervall um den Punkt x_0 als Funktion der Zeit. $A_{x_0}^\varepsilon$ sei hier ein Projektor auf das Intervall $(x_0 - \varepsilon/2, x_0 + \varepsilon/2)$.

$$\langle A_{x_0}^\varepsilon \rangle_t = \left(\phi(x, t), A_{x_0}^\varepsilon \phi(x, t) \right) \quad (4.26)$$

$$= \int_{x_0}^{x_0+\varepsilon} |\phi(x, t)|^2 dx \quad (4.27)$$

$$\approx \varepsilon |\phi(x_0, t)|^2 \quad (4.28)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\varepsilon}{3} \left(\sum_{n=1}^3 |\varphi_n(x_0)|^2 + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{n=1}^2 \varphi_n(x_0)\varphi_{n+1}(x_0) \cos \left((E_{n+1} - E_n)t \right) + \right. \\ &\quad \left. + \varphi_1(x_0)\varphi_3(x_0) \cos \left((E_3 - E_1)t \right) \right) \end{aligned} \quad (4.29)$$

Um nun eine Zeit-Observable, welche die Wahrscheinlichkeit des Auftretens des Teilchens bei x_0 misst, zu konstruieren, müssen wir ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf \mathbb{R} erzeugen. Wir haben Gl. (4.29) somit über die gesamte Zeit zu integrieren, um so der Normierung, auf Ebene der Operatoren, einen Sinn zu geben. Die so gewonnene Wahrscheinlichkeitsdichte ρ^ϕ gestattet es uns, ein Wahrscheinlichkeitsmaß $P_\phi(I) = \int_I \rho^\phi dt$ zu berechnen.

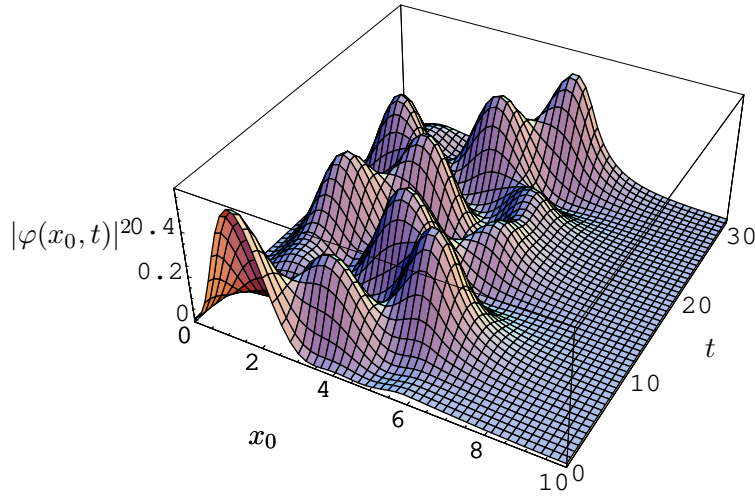


Abbildung 4.5: $\langle P_{x_0} \rangle_t$ als Funktion von x_0 und t .

Nun sind wir an einer Stelle angekommen, an der es nötig wird, auf die Erkenntnisse der vorangegangenen Abschnitte zurückzugreifen. Gehen wir nun davon aus, dass es keine rationalen Relationen zwischen den Energieeigenwerten E_n gibt. Diese Werte sind Lösungen einer transzendenten Gleichung, so dass nicht von rationalen Abhängigkeiten zwischen den Energieeigenwerten und ihrer Differenzen $\Delta E_i = (E_{i+1} - E_i)$ auszugehen ist. Wir haben in diesem System eine Überlagerung von Schwingungen mit zwei rational unabhängigen und einer abhängigen Frequenz vorliegen. Der Grad der fastperiodischen Algebra $\mathcal{A}_{\{\Delta E_1, \Delta E_2, \Delta E_1 + \Delta E_2\}}$ ist also zwei. Die benötigte Kompaktifizierung von \mathbb{R} ist also der 2-Torus \mathbb{T}^2 . Über diesen werden wir nun die Integrationen durchführen.

Für kleine ε berechnen wir nun

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta E_1 \Delta E_2} \int_{\mathbb{T}^2} \varepsilon |\phi(x_0, t)|^2 d\vec{t} &= \frac{\varepsilon}{3\Delta E_1 \Delta E_2} \int_0^{2\pi} dt_1 \int_0^{2\pi} dt_2 \left(\sum_{n=1}^3 |\varphi_n(x_0)|^2 + \right. \\ &\quad \left. + 2 \sum_{n=1}^2 \varphi_n(x_0) \varphi_{n+1}(x_0) \cos(t_n) + \right. \\ &\quad \left. + \varphi_1(x_0) \varphi_3(x_0) 2 \cos(t_2 + t_1) \right) \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$= \frac{4\pi^2 \varepsilon}{3\Delta E_1 \Delta E_2} \sum_{n=1}^3 |\varphi_n(x_0)|^2 \quad (4.31)$$

$$= (\phi, B\phi) \quad (4.32)$$

mit $t_i = (E_{i+1} - E_i)t$ und $\Delta E_i = (E_{i+1} - E_i)$.

Wir haben jetzt die Gesamtdauer des Effektes $(\phi, B\phi)$ berechnet. Aus dieser

können wir die Eigenwerte des Operators B bestimmen. Sie ergeben sich zu

$$B\varphi_n = T_n\varphi_n = \frac{4\pi^2\varepsilon}{\Delta E_1\Delta E_2}|\varphi_n(x_0)|^2\varphi_n. \quad (4.33)$$

Nun können wir unser Wahrscheinlichkeitsmaß $B^{-1/2}B(I)B^{-1/2}$ berechnen, es folgt

$$(\phi, B^{-1/2}B(I)B^{-1/2}\phi) = (B^{-1/2}\phi, B(I)B^{-1/2}\phi) \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\varepsilon}{3\Delta E_1\Delta E_2} \left(\sum_{n=1}^3 \int_{\vec{I} \subset \mathbb{T}^2} d\vec{t} \frac{|\varphi_n(x_0)|^2}{T_n} + \right. \\ &+ 2 \sum_{n=1}^2 \int_{\vec{I}} d\vec{t} \frac{\overline{\varphi_n(x_0)}\varphi_{n+1}(x_0) \cos(t_n)}{\sqrt{T_n}\sqrt{T_{n+1}}} + \\ &\left. + 2 \int_{\vec{I}} d\vec{t} \frac{\overline{\varphi_1(x_0)}\varphi_3(x_0) \cos(t_1 + t_2)}{\sqrt{T_1}\sqrt{T_3}} \right) \quad (4.35) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{12\pi^2} \left(\sum_{n=1}^3 \int_{\vec{I}} d\vec{t} 1 + \right. \\ &+ 2 \sum_{n=1}^2 \int_{\vec{I}} d\vec{t} \frac{\overline{\varphi_n(x_0)}\varphi_{n+1}(x_0) \cos(t_n)}{|\varphi_n(x_0)||\varphi_{n+1}(x_0)|} + \\ &\left. + 2 \int_{\vec{I}} d\vec{t} \frac{\overline{\varphi_1(x_0)}\varphi_3(x_0) \cos(t_1 + t_2)}{|\varphi_1(x_0)||\varphi_3(x_0)|} \right) \quad (4.36) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{\vec{I}} d\vec{t} \left(1 + \right. \\ &+ \frac{2}{3} \left(\sum_{n=1}^3 \text{sign}(\varphi_n(x_0)\varphi_{n+1}(x_0)) \cos(t_n) + \right. \\ &\left. \left. + \text{sign}(\varphi_1(x_0)\varphi_3(x_0)) \cos(t_1 + t_2) \right) \right) \quad (4.37) \end{aligned}$$

$$=: \int_{\vec{I}} \rho_{x_0}^\phi d\vec{t}. \quad (4.38)$$

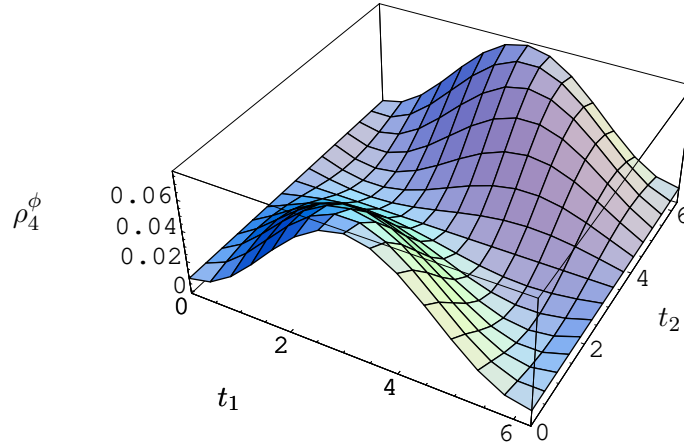


Abbildung 4.6: Die Wahrscheinlichkeitsdichte ρ_4^ϕ auf dem Torus \mathbb{T}^2 .

Resubstituieren wir $t_i \rightarrow \Delta E_i t$, so erhalten wir einen Ausdruck, welcher auf \mathbb{R} definiert ist. Dieses sollte der gemessenen Wahrscheinlichkeitsverteilung in der Zeit entsprechen. Auch hier ist beobachtbar, dass diese Verteilung stückweise vom Ort unabhängig ist. Es handelt sich bei diesen Phänomenen um eine direkte Folge unserer Normierungsvorschrift, es sollte also allgemein bei Bindungszuständen auftreten.

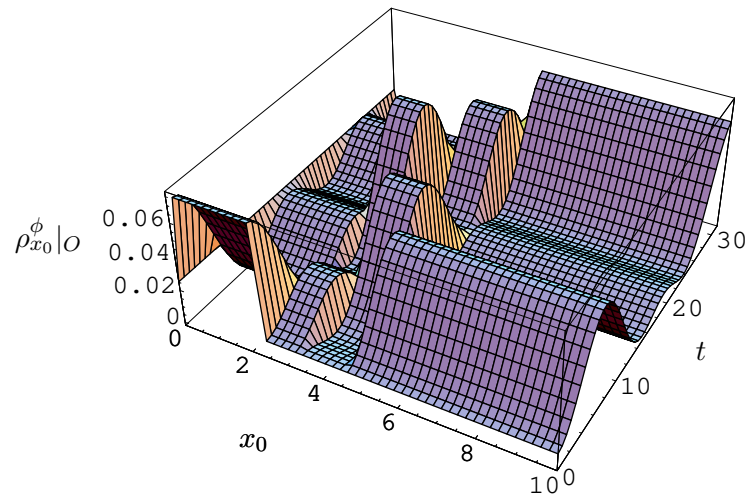
Zunächst haben wir also ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf \mathbb{T}^2 konstruiert, welches nun Objekt unseres näheren Studiums sein wird.

Interessieren wir uns z.B. für den Ort, an dem sich das Teilchen im Zeitmittel am liebsten aufhält, so sind wir nur an

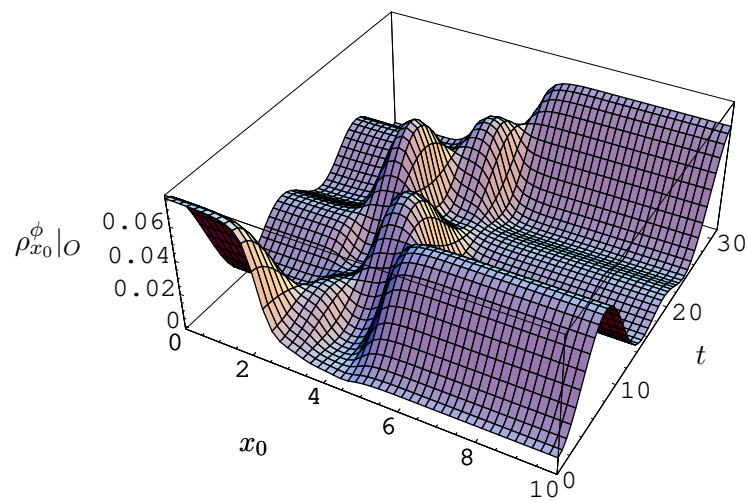
$$\int_{\mathbb{R}} \varepsilon |\phi(x_0, t)|^2 dt \stackrel{!}{=} \int_{\mathbb{T}^2} \frac{\varepsilon |\phi(x_0, t)|^2}{\Delta E_1 \Delta E_2} d\vec{t} = \frac{4\pi^2 \varepsilon}{3\Delta E_1 \Delta E_2} \sum_{n=1}^3 |\varphi_n(x_0)|^2 \quad (4.39)$$

interessiert. Die Lösung dieses Problems reduziert sich also auf die Frage, wo der Ausdruck $\sum_{n=1}^3 |\varphi_n(x_0)|^2$ sein Maximum hat.

Hier erhalten wir also das Resultat, dass die Beiträge der fastperiodischen Oszillationen über die Zeit “herausgemittelt” werden.



(a)



(b)

Abbildung 4.7: Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho_{x_0}^\phi$ ausgewertet auf dem Orbit $O = \{\vec{t} = \{t_1, t_2\} \in \mathbb{T}^2, t_i = \Delta E_i t, t \in \mathbb{R}\}$ bei (a) $\varepsilon \rightarrow 0$ und (b) $\varepsilon = 1$.

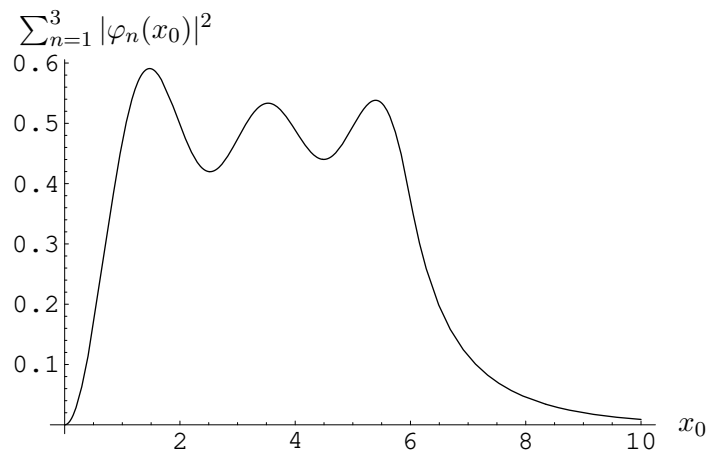


Abbildung 4.8: Der über die gesamte Zeit integrierte Ausdruck $\sum_{n=1}^3 |\varphi_n(x_0)|^2$. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen am Ort x_0 zu finden.

Kapitel 5

Zeitobservable auf Bindungszuständen

5.1 Definition

Nachdem wir uns nun mit dem nötigen Rüstzeug vertraut gemacht haben, können wir nun eine Zeit-Observable auf Bindungszuständen einführen. Wir haben also den in Abschnitt 2.2.1 vorgestellten Formalismus zu verallgemeinern. Im Falle von Bindungszuständen haben wir gesehen, dass es keinen Sinn macht, die Normierung des positiv operatorwertigen Maßes $B(I) = \int_I dt \alpha_t(A)$, $I \subset \mathbb{R}$ anzugeben. Wir haben nun den Ansatz verfolgt, einen Zeitpunkt nicht mehr durch ein Element der reellen Zahlen \mathbb{R} zu charakterisieren, welche in der gewöhnlichen Topologie nicht kompakt sind, sondern durch einen Punkt auf einer kompakten Gruppe. Lässt sich \mathbb{R} dicht in diese kompakte Gruppe einbetten, so können wir der Normierung des positiv operatorwertigen Maßes $B(I)$ einen Sinn geben.

Da die Zeitentwicklung auf Bindungszuständen fastperiodisch ist, liegt es nahe, die Bohrkompaktifizierung von \mathbb{R} zur Definition eines Normierungsintegrals heranzuziehen. In physikalisch interessanten Systemen wird allgemein jedoch nicht die volle Bohrkompaktifizierung benötigt. Betrachten wir Bindungszustände, welche sich bereits als endliche Linearkombination stationärer Zustände darstellen lassen, was als gute Approximation allgemein möglich sein sollte, so ist die relevante kompakte Gruppe ein Teil der Bohrkompaktifizierung. Sind alle Differenzen benachbarter Energieniveaus¹ $E_{n+1} - E_n$ unabhängig über \mathbb{Q} , so erhalten wir als Kompaktifizierung einen Torus von der Dimension N , welche der Anzahl der Energieniveaus minus Eins entspricht. Eine Integration über einen solchen Torus ist einfach auszuführen, so dass wir uns im folgenden auf Quantensysteme mit rational unabhängigen Energiedifferenzen beschränken wollen.

Sind die Energieeigenwerte entartet, wird sich an diesem Verhalten nichts ändern. Die Zeitentwicklung des gebundenen Systems ist weiterhin von der Gestalt $\sum \alpha_n e^{i\lambda_n t}$ und auch die Anzahl der trigonometrischen Monome bleibt un-

¹Unter Energieniveau verstehen wir hier die Menge der, möglicherweise entarteten, Energieeigenwerte der stationären Zustände, aus denen unser Zustand kombiniert wurde.

abhängig von der Entartung. Lediglich die Koeffizienten α_n in einem solchen trigonometrischen Polynom sind wirklich von der Entartung abhängig.

Mit Kenntnis einer kompaktifizierten Zeit sind wir in der Lage, eine Zeit-Observable auf Bindungszuständen zu definieren. Beginnen wir wieder bei einem positiven beschränkten Operator A , welcher das Eintreten eines Ereignisses zum Zeitpunkt $t = 0$ misst. Von A ausgehend betrachten wir das Maß

$$B(\tilde{I}) = \int_{\tilde{I}} \alpha_{\beta^{-1}(\vec{t})}(A) d\vec{t} \quad (5.1)$$

auf $\mathbb{T}^N \supset \tilde{I}$. Mit einer Abbildung $\beta : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{T}^N$, welche zwischen der Zeit als reelle Zahl und der Zeit auf der Kompaktifizierung vermittelt.

$$\beta(t) = \left(\frac{E_2 - E_1}{2\pi} t, \frac{E_3 - E_2}{2\pi} t, \dots, \frac{E_{N+1} - E_N}{2\pi} t \right) \bmod 1 \quad (5.2)$$

Diesen Operator normieren wir nun mit Hilfe von

$$B = \int_{\mathbb{T}^N} \alpha_{\beta^{-1}(\vec{t})}(A) d\vec{t}. \quad (5.3)$$

Da die Integration in der Definition von B über ein Kompaktum ausgeführt wird, ist die Konvergenz sichergestellt. Wir setzen für $\tilde{I} \subset \mathbb{T}^N$

$$P(\tilde{I}) = B^{-1/2} B(\tilde{I}) B^{-1/2}. \quad (5.4)$$

Dieses positiv operatorwertige Maß ist also auf dem N-Torus definiert. Eine alternative Art, unser Vorgehen zu verstehen, liegt darin, sich eine Abänderung der Messbarkeitsstruktur vorzustellen. Wir betrachten als Topologie, aus der wir unsere Borelmengen gewinnen, nicht die offenen Intervalle auf \mathbb{R} , sondern die offenen Mengen, welche wir erhalten, wenn wir die topologische Struktur von \mathbb{T}^N nach \mathbb{R} übertragen. Aus einer offenen Menge auf \mathbb{T}^N bezüglich der euklidischen Topologie wird auf \mathbb{R} eine unendliche Vereinigung offener Intervalle, welche wir nun als die offenen Mengen ansehen. Bezüglich dieser Topologie ist \mathbb{R} kompakt, die Definition in 2.2.1 führt also zu keinen Problemen. Wir haben also die Definition der Zeitobservable dahingehen verallgemeinert, dass wir eine dem Problem angepasste Topologie und Messbarkeitsstruktur verwenden.

Eine derartige Beschreibung der Zeit als Torus erscheint gegenüber einer als Gerade etwas unnatürlich. Führen wir uns jedoch vor Augen, dass Zeiten im allgemeinen dadurch gemessen werden, sie mit periodischen Vorgängen, den "Uhren", zu vergleichen. Wir zählen einfach die Perioden dieser Referenzsysteme. Um nicht zu große Zahlen zu erhalten, können wir mehr als eine Uhr verwenden, um einen Zeitpunkt festzulegen. Verwenden wir als Uhren z.B. die Rotation der Erde um die eigene Achse und zusätzlich noch die des Mondes um die Erde, so kann man Daten recht kompakt durch Angabe von Tagen und Monaten angeben. Eine Parametrisierung der Zeit durch mehrdimensionale Objekte ist also nicht so ungewöhnlich wie es zunächst erscheint.

5.2 Anwendung

Wenden wir diesen Formalismus auf eine allgemeine Überlagerung von stationären Zuständen, mit irrationalen Differenzen der Energieeigenwerte,

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = \sum_{k=0}^N a_k \varphi_k(\mathbf{x}) e^{-iE_k t} \quad (5.5)$$

mit $H\varphi_n = E_n\varphi_n$ und $\sum_{k=0}^N |a_k|^2 = 1$ an. Berechnen wir das Wahrscheinlichkeitsmaß $(\varphi, P_A(\tilde{I})\varphi)$ zum Effekt A . In allgemeiner Form erhalten wir, ganz analog zu den Ergebnissen aus Kapitel 4,

$$(\varphi, P_A(\tilde{I})\varphi) = \frac{1}{(2\pi)^N} \int_{\tilde{I} \subset \mathbb{T}^N} d\vec{t} \left(\sum_{n=0}^N |a_n|^2 + \right. \quad (5.6)$$

$$\left. + 2 \sum_{n=1}^N \sum_{n'=0}^{N-n} \frac{(\varphi_{n'}, A\varphi_{n'+n})}{\sqrt{(\varphi_{n'}, A\varphi_{n'}) (\varphi_{n'+n}, A\varphi_{n'+n})}} \operatorname{Re} \left(\overline{a_{n'}} a_{n'+n} e^{-i(E_{n'+n} - E_{n'})t} \right) \right) \\ = \frac{1}{(2\pi)^N} \int_{\tilde{I} \subset \mathbb{T}^N} d\vec{t} \left(\sum_{n=0}^N |a_n|^2 + \right. \quad (5.7)$$

$$\left. + 2 \sum_{n=1}^N \sum_{n'=0}^{N-n} \frac{(\varphi_{n'}, A\varphi_{n'+n})}{\sqrt{(\varphi_{n'}, A\varphi_{n'}) (\varphi_{n'+n}, A\varphi_{n'+n})}} \operatorname{Re} \left(\overline{a_{n'}} a_{n'+n} e^{-i \sum_{k=0}^{n-1} (E_{n'+k+1} - E_{n'+k})t} \right) \right) \\ = \frac{1}{(2\pi)^N} \int_{\tilde{I} \subset \mathbb{T}^N} d\vec{t} \left(\sum_{n=0}^N |a_n|^2 + \right. \quad (5.8)$$

$$\left. + 2 \sum_{n=1}^N \sum_{n'=0}^{N-n} \frac{(\varphi_{n'}, A\varphi_{n'+n})}{\sqrt{(\varphi_{n'}, A\varphi_{n'}) (\varphi_{n'+n}, A\varphi_{n'+n})}} \operatorname{Re} \left(\overline{a_{n'}} a_{n'+n} e^{-i \sum_{k=0}^{n-1} t_{n'+k}} \right) \right)$$

mit $t_i = (E_{i+1} - E_i)t$ und $\vec{t} = (t_1, \dots, t_N)$. Für reelle Wellenfunktionen vereinfacht sich der Ausdruck zu

$$= \frac{1}{(2\pi)^N} \int_{\tilde{I} \subset \mathbb{T}^N} d\vec{t} \left(\sum_{n=0}^N |a_n|^2 + \right. \quad (5.9)$$

$$\left. + 2 \sum_{n=1}^N \sum_{n'=0}^{N-n} \frac{a_{n'} a_{n'+n} (\varphi_{n'}, A\varphi_{n'+n})}{\sqrt{(\varphi_{n'}, A\varphi_{n'}) (\varphi_{n'+n}, A\varphi_{n'+n})}} \cos \left(\sum_{k=0}^{n-1} t_{n'+k} \right) \right).$$

Dieses Wahrscheinlichkeitsmaß ist auf der kompaktifizierten Zeit definiert. Es ist nun nötig, zu betrachten, welche Konsequenzen sich für die "messbare" lineare Zeit ergeben.

Aus dem positiv operatorwertigen Wahrscheinlichkeitsmaß, auf einer fast-periodischen Kompaktifizierung, kann man nun eine Wahrscheinlichkeitsverteilung in der Zeit bestimmen. Man bestimmt das Maß $P(\tilde{I})$ auf \mathbb{T}^n und wertet

dieses dann entlang des Orbits $\{\beta(t), t \in \mathbb{R}\}$ aus. Wir erhalten als “Wahrscheinlichkeitsdichte” $\rho_{\mathbb{R}}^{\varphi}$ in der Zeit für den Zustand φ also

$$\rho_{\mathbb{R}}^{\varphi}(t) := \rho_{\mathbb{T}^n}^{\varphi}(\beta(t)) \quad (5.10)$$

mit

$$\int_{\tilde{I} \subset \mathbb{T}^n} dt \vec{\rho}_{\mathbb{T}^n}^{\varphi}(\vec{t}) = (\varphi, P(\tilde{I})\varphi). \quad (5.11)$$

Dies ist im eigentlichen Sinne keine Wahrscheinlichkeitsdichte, da das Integral $\int_{\mathbb{R}} dt \rho_{\mathbb{R}}^{\varphi}(t)$, bezüglich der üblichen Messbarkeitsstruktur auf \mathbb{R} , nicht existiert. Die so konstruierte “Dichte” sollte jedoch die relative Häufigkeit angeben, in der ein Ereignis zum Zeitpunkt t eintritt. Es liegt in der Natur von Bindungszuständen, dass diese Verteilungsfunktion im allgemeinen nicht integrierbar ist.

5.2.1 Mögliche experimentelle Konsequenzen

Einer messbaren Menge auf der kompaktifizierten Zeit entspricht auf der reellen Zeitachse eine unendliche Vereinigung von Intervallen. Es ist leider nicht möglich die Häufigkeit, mit der ein Ereignis in all diesen Zeitintervallen eintritt zu messen, da dies unendlich lange Versuchszeiten erfordern würde. Das Maß $(\varphi, P(\tilde{I})\varphi)$ ist also nicht direkt experimentell zugänglich. Die Funktion $\rho_{\mathbb{R}}^{\varphi}(t)$ in der Zeit sollte jedoch Häufigkeitsverteilungen in der Zeit reproduzieren.

Wie könnte nun eine experimentelle Überprüfung unserer Resultate aussehen? Als Experiment könnte man sich zum Beispiel eine lineare Ionenfalle denken (z.B. [23],[24]). Ein fokussierter Laserstrahl, welcher das Ion zur Fluoreszenz anregen könnte, würde als “Detektor” für die Anwesenheit des Ions in einem bestimmten Gebiet dienen. Man könnte ein einzelnes Ion in eine solche Falle einschließen und in die Nähe des Grundzustandes kühlen. Solch ein Experiment würde den Beispielen aus Kapitel 4 sehr nahe kommen. In diesen Beispielen zeigte sich, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung in der Zeit, dafür dass ein “Detektor klickt”, stückweise unabhängig vom Ort ist. Dieses Verhalten ist eine direkte Folge der postulierten Normierungsvorschrift. Eine experimentelle Untersuchung solcher Quantensystemen würde Aufschlüsse über die Zulässigkeit dieser Konstruktion liefern.

Auch wenn dieser skizzierte Versuch vielleicht praktisch nicht durchführbar sein sollte², so ist es sicher möglich, mit Hilfe anderer Quantensystemen einen realistischen Versuch zu konzipieren. Denken wir uns als zu untersuchende Effekte keinen Projektor auf ein Raumgebiet, sondern einen auf einen Bereich im Impulsraum. Ein solcher Effekt ist möglicherweise durch spektroskopische Messungen von Dopplerverschiebungen beobachtbar. Auch andere quantenoptisch messbare Größen, wie z.B. die Population eines bestimmten Energieniveaus, sollten im Rahmen unseres Formalismus berechenbar sein.

²Die Wellenlänge des eingestrahnten Lasers könnte, für eine ortsauflösende Messung, zu groß sein.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

Wir haben in dieser Arbeit gezeigt, dass es möglich ist eine quantenmechanische Zeit-Observable auf Bindungszuständen zu erklären. Zunächst waren wir mit dem Problem konfrontiert, dass es nicht möglich ist einen selbstadjungierten Operator zu finden, der sinnvoll mit einer Zeit-Observable zu identifizieren ist. Dieses Problem führte zu der Notwendigkeit einen allgemeineren Observablenbegriff, den des positiv operatorwertigen Maßes, zu verwenden.

R. Brunetti und K. Fredenhagen [3] folgend versuchten wir ein solches Maß zu konstruieren. Wir stellten die Frage, wie wahrscheinlich ein bestimmtes Ereignis zu verschiedenen Zeiten ist. Dabei stellte sich jedoch das Problem, dass eine Normierung dieses Maßes in der Zeit auf Bindungszuständen nicht möglich ist. Ein näheres Studium der Zeitentwicklung von Bindungszuständen erlaubte es uns dann, im Rahmen der Theorie fastperiodischer Funktionen, eine Kompaktifizierung der Zeitgeraden zu konstruieren. Mit Kenntnis dieser kompakten Menge war es möglich ein positiv operatorwertiges Wahrscheinlichkeitsmaß zu definieren.

Bei der Konstruktion der fastperiodischen Kompaktifizierung waren wir auf die rationale Unabhängigkeit der Differenzen von Energieniveaus angewiesen. Diese Einschränkung war nötig, um die Zeit, durch Kroneckers Theorem, dicht in einen Torus einzubetten. In Systemen mit solchen Abhängigkeiten hat die benötigte Kompaktifizierung eine kompliziertere Struktur. Eine genauere Untersuchung von Algebren fastperiodischer Funktionen, welche durch eine endliche Menge reeller Zahlen mit rationalen Abhängigkeiten erzeugt werden, ist wünschenswert. Ist es möglich, auch für solche Zeitentwicklungen eine fastperiodische Kompaktifizierung anzugeben, so sollte sich hier ebenfalls eine konkrete Beschreibung von Zeit-Observablen finden lassen. Es wird im Rahmen der Zahlentheorie also zu untersuchen sein, welche Verallgemeinerungen von Kroneckers Theorem möglich sind.

Die enormen Fortschritte auf dem Gebiet der experimentellen Quantenoptik, lassen eine experimentelle Überprüfung unseres Konzeptes von Zeit-Observablen möglich erscheinen. Ein Projekt für die Zukunft sollte also darin bestehen, Zeit-Observable für experimentell zugängliche Systeme zu untersu-

chen.

Literaturverzeichnis

- [1] W. Pauli, *General Principles of Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [2] P. Bush, M. Grabowski and P.J. Lahti, *Operational Quantum Physics*, Springer-Verlag, Berlin, 1995.
- [3] R. Brunetti, K. Fredenhagen, *When does a detector click ?*, quant-ph/0103144 (2001).
- [4] R. Brunetti, K. Fredenhagen, *Remarks on time-energy uncertainty relations*, quant-ph/0207048 (2002).
- [5] K. Fredenhagen, *Quantenmechanik I*, <http://www.desy.de/uni-th/lqp/notes.html> (1999/2000).
- [6] M. Reed, B. Simon, *Functional Analysis*, Academic Press, New York, London, 1972.
- [7] M. Reed, B. Simon, *Fourier Analysis, Self-Adjointness*, Academic Press, New York, London, 1975.
- [8] L. H. Loomis, *An Introduction to Abstract Harmonic Analysis*, The University Series in Higher Mathematics. D. van Nostrand, Princeton, New Jersey Toronto London New York, 1953.
- [9] J. Dixmier, *C*-Algebras*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam New York Oxford, 1977.
- [10] W. Maak, *Fastperiodische Funktionen*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, Zweite, korrigierte Auflage, 1967.
- [11] J. von Neumann, Almost periodic functions in a group, *Trans. Amer. Math. Soc.* 36 (1934) 445-492.
- [12] A. Fischer, Structure of Fourier Exponents of almost periodic Functions and Periodicity of almost periodic Functions, *Mathematica Bohemica* 121 (1996) No.3 ,249-262.
- [13] E. Hewitt, K. A. Ross, *Abstract Harmonic Analysis I*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, Second Edition, 1979.

-
- [14] E. Hewitt, K. A. Ross, *Abstract Harmonic Analysis II*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1970.
- [15] P. R. Halmos, *Measure Theory*, The University Series in Higher Mathematics. D. van Nostrand, Princeton, New Jersey Toronto London New York, 1950.
- [16] O. Bratteli, D. W. Robinson, *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics 1*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, Second Edition, 1987.
- [17] G. H. Hardy, E. M. Wright, *An Introduction to the Theory of Numbers*, Oxford at the Clarendon Press, Fourth Edition, 1960.
- [18] H. Weyl, Über die Gleichverteilung von Zahlen mod. Eins, *Mathematische Annalen* 77 (1916) 313-352.
- [19] H. Bohr, B. Jessen, One More Proof of Kronecker's Theorem, *Journal London Math. Soc.* 7 (1932) 274-275.
- [20] D. E. Knuth, *The art of Computer programming II*, Addison Wesley, Third Edition, 1998.
- [21] J. van der Hoeven, *On the computation of limsup*, École Polytechnique, France. (1996).
- [22] D. T. Pegg, Complement of the Hamiltonian, *Physical Review A* 58 (1998) 4307-4313.
- [23] H. C. Nägerl, Ch. Roos, H. Rohde, D. Liebfried, J. Eschner, F. Schmidt-Kaler, and R. Blatt, Single ions in Paul traps, *Decoherence : Theoretical, Experimental, and Conceptual Problems*, eds. P. Blanchard, D. Giulini, C. Kiefer, and I. O. Stamateccu, Springer, Berlin 1999.
- [24] B. Appasamy, J. Eschner, Y. Stalgies, I. Siemers and P. E. Toschek, Quantum Optics of a Single Trapped Ion, *Physica Scripta*, Vol. T59, (1995) 278-285.

Danksagung

Ich möchte mich an dieser Stelle bei Herrn Fredenhagen für die interessante Aufgabenstellung sowie die geduldige und verständnisvolle Betreuung meiner Arbeit bedanken.

Für die interessante und anregende Zusammenarbeit bedanke ich mich bei allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe und des Institutes.

Weiterer Dank gebührt all meinen Freunden und natürlich meinem Bruder, die mich während des letzten Jahres immer wieder unterstützt und Motiviert haben.

Ganz besonderer Dank gilt meiner Mutter, ohne ihre uneingeschränkte und aufopferungsvolle Unterstützung hätten mein Bruder und ich nicht sorgenfrei aufwachsen und studieren können.

Ich Danke euch allen !

Erklärung gemäß Diplomprüfungsordnung

Ich versichere, diese Arbeit selbständig und nur unter Benutzung der angegebenen Hilfsmittel und Quellen verfasst zu haben. Ich gestatte die Veröffentlichung dieser Arbeit.

Bolko Beutner