

Semiklassische Methoden in der Quantenmechanik*

Stefan Keppeler Universität Tübingen, Mathematisches Institut
 Auf der Morgenstelle 10
 72076 Tübingen, Germany
 Büro: C6P43
 Email-Adresse: stefan.keppeler@uni-tuebingen.de

Inhaltsverzeichnis

1	Die alte Quantentheorie nach Bohr und Sommerfeld	3
1.1	Bohrsche Postulate und Bohrsches Atommodell	3
1.2	Verallgemeinerung auf mehrere Freiheitsgrade Bohr-Sommerfeld-Quantisierung	6
1.3	Das Wasserstoffatom nach Sommerfeld	7
1.4	Das Bohrsche Korrespondenzprinzip	10
2	Fouriertransformation und Verwandtes	11
2.1	Die Fouriertransformation	12
2.2	Schwartz-Funktionen	12
2.3	Temperierte Distributionen	13
2.4	Fouriertransformation (fortgesetzt)	14
2.5	Schwartzscher Darstellungssatz	14
3	Formalismus der Quantenmechanik	15
3.1	Zum Vergleich: Wiederholung der Hamiltonschen Mechanik	15
3.2	Zustandsraum und Messung	16
3.3	Dynamik	17
3.4	Das Ehrenfest-Theorem	18
4	Wigner-Weyl-Kalkül	19
4.1	Weylquantisierung	19
4.2	Die Wignerfunktion	22
4.3	Symbolklassen	24
4.4	Das Moyalprodukt	26
5	Semiklassische Zeitentwicklung von Symbolen	28
5.1	Der Satz von Egorov	28

*Dieses Skript wird parallel zur Vorlesung geschrieben, ist unvollständig und permanent unter Bearbeitung. Für Hinweise auf Fehler jeglicher Art sowie für Anregungen bin ich dankbar. *Stefan Keppeler*

5.2	Heuristische Bemerkungen zur Ehrenfestzeit	31
5.2.1	Was bedeutet $\hbar \rightarrow 0$?	33
5.2.2	Illustration: Zeitentwicklung im Kardiodbillard	33
6	Oszillatorische Integrale und die Methode der stationären Phase	34
6.1	Etwas Heuristik	34
6.2	Methode der stationären Phase	36
7	WKB-Methode und EBK-Quantisierung	43
7.1	Motivation	44
7.2	Quasimoden	45
7.3	WKB-Ansatz	46
7.4	Lösung der Hamilton-Jacobi-Gleichung: Langrange-Mannigfaltigkeiten	49
7.5	Crash-Kurs in Hamilton-Jacobi-Theorie	52
7.6	Lösung der Transportgleichung für a_0	55
7.7	Kaustiken und die WKB-Funktion im Impulsraum	58
7.8	EBK-Quantisierung	63
7.8.1	Wann dürfen wir WKB-Funktionen erwarten?	64
7.8.2	Quantisierungsregel in einer Dimension	66
7.8.3	Skizze für d Dimensionen	67
	Literatur	69

1 Die alte Quantentheorie nach Bohr und Sommerfeld

In diesem Abschnitt wird eine nicht-technische Einführung, sowie ein historischer Abriß über die alte Quantentheorie gegeben. Es werden einige explizite illustrierende Rechnungen durchgeführt – auf präzise Definitionen aller eingeführten Größen wird jedoch verzichtet. Nebenbei wiederholen wir anhand eines Beispiels die Formulierungen der klassischen Mechanik nach Lagrange, Hamilton und Hamilton-Jacobi. Die Darstellung orientiert sich zum Teil an einem älteren Lehrbuch der theoretischen Physik [1] sowie an den klassischen Arbeiten von Bohr und Sommerfeld, wie z.B. [2, 3].

1.1 Bohrsche Postulate und Bohrsches Atommodell

Im Jahr 1913 veröffentlichte Bohr seine berühmten Arbeiten über den Aufbau der Atome und die Berechnung atomarer Spektren mithilfe der Quantentheorie.

Zu diesem Zeitpunkt war die Quantentheorie eine offensichtlich unvollständige Theorie, bestehend aus einzelnen Annahmen und einem nicht wohldefinierten Gültigkeitsbereich. Die Erkenntnis, daß verschiedene Größen, die in der klassischen Physik kontinuierliche Werte annehmen können, in der mikroskopischen Welt nur als Vielfache einer Grundeinheit – eines **Quants** – auftreten, datierte bereits aus dem Jahr 1900 (Plancksche Theorie der Schwarzkörperstrahlung). Eine allgemeine Theorie zur Beschreibung der mikroskopischen Welt existierte jedoch nicht, und es sollten noch mehr als 10 Jahre vergehen, ehe sie in Form der Quantenmechanik von Heisenberg, Schrödinger u.a. entwickelt wurde.

Basis für **Bohrs** Arbeiten war ein **Atommodell**, in dem die Elektronen den Atomkern umkreisen, wie die Planeten die Sonne. Empirisch gestützt wurde diese Vorstellung durch die **Streuversuche Rutherfords**, welche gezeigt hatten, daß im Inneren eines Atoms ein kleineres, massives, positiv geladenes Zentrum existiert – der Atomkern. Gemäß den Gesetzen der Elektrodynamik würde ein solches oszillierendes System allerdings elektromagnetische Wellen und damit Energie abstrahlen, wodurch die Elektronen innerhalb kürzester Zeit ($\sim 10^{-8}s$) in der Kern stürzen würden. Stabile Atome wären demnach unmöglich!

Bohr setzte dem die folgenden zwei Postulate entgegen [2, Seite 7] (dort anders formuliert):

1. Auf bestimmten Bahnen können die Elektronen strahlungsfrei um den Kern kreisen. Diese Bahnen werden ausgewählt durch die **Quantisierungsbedingung**²

$$\oint p dq \stackrel{!}{=} 2\pi\hbar n \quad (1.1)$$

mit einer ganzen Zahl n .

²Bohr formulierte dies ursprünglich für das Wasserstoffatom als Quantisierung des Drehimpulses [2, Seite 15] und auch das erst nach Vergleich mit experimentellen Daten und Verwendung des Korrespondenzprinzips (vgl. Abschnitt 1.4).

2. Emission und Absorption findet nur dann statt, wenn das Elektron von einer solchen Bahn auf eine andere übergeht. Dabei ist die **Energiedifferenz gleich dem Lichtquant** $h\nu$, bestimmt also dadurch die Frequenz ν des emittierten oder absorbierten Lichts.

Bemerkungen:

- Es bezeichnet $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, wobei h das Plancksche Wirkungsquantum ist,
 $h \approx 6,626 \cdot 10^{-34} \text{Js}$,
 $\hbar \approx 1,05 \cdot 10^{-34} \text{Js} = 1,055 \cdot 10^{-27} \text{ergs}$.
- So wie hier formuliert erlauben, diese Regeln die Quantisierung (effektiv) eindimensionaler Systeme. Die Erweiterung auf mehrere Freiheitsgrade werden wir in Abschnitt 1.2 diskutieren.

Wir betrachten nun explizit die Kreisbewegung eines Elektrons im Zentralpotential (des unendlich schwer angenommen Kerns). Die Lagrangefunktion für ein Elektron im Coulombpotential $-\frac{e^2}{|\mathbf{x}|}$ lautet

$$L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{e^2}{|\mathbf{x}|}. \quad (1.2)$$

In Kugelkoordinaten (r, θ, ϕ) gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= r \mathbf{e}_r = r \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \\ \Rightarrow \dot{\mathbf{x}} &= \dot{r} \mathbf{e}_r + r \dot{\mathbf{e}}_r \\ &= \dot{r} \mathbf{e}_r + r \dot{\theta} \mathbf{e}_\theta + r \dot{\phi} \sin \theta \mathbf{e}_\phi, \end{aligned} \quad (1.3)$$

und damit

$$L(r, \theta, \phi, \dot{r}, \dot{\theta}, \dot{\phi}) = \frac{m}{2} \left(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 + r^2 \dot{\phi}^2 \sin^2 \theta \right) + \frac{e^2}{r}. \quad (1.4)$$

Die kanonisch konjugierten Impulse werden zu

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m \dot{r}, \quad p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = m r^2 \dot{\theta}, \quad p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = m r^2 \dot{\phi} \sin^2 \theta, \quad (1.5)$$

und wir erhalten die Hamiltonfunktion

$$\begin{aligned} H(p_r, p_\theta, p_\phi, r, \theta, \phi) &= p_r \dot{r} + p_\theta \dot{\theta} + p_\phi \dot{\phi} - L \Bigg|_{\substack{\dot{r} = p_r/m \\ \dot{\theta} = p_\theta/mr^2 \\ \dot{\phi} = p_\phi/mr^2 \sin^2 \theta}} \\ &= \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + \frac{p_\phi^2}{2mr^2 \sin^2 \theta} - \frac{e^2}{r}. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Für eine Kreisbahn ($p_r = 0$) in der xy -Ebene ($\theta = \frac{\pi}{2}$, $p_\theta = 0$) ergibt sich die Energie

$$E = H(0, 0, p_\phi, r, \frac{\pi}{2}, \phi) = \frac{p_\phi^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}. \quad (1.7)$$

(Bemerkung: In dieser Ebene ist p_ϕ gleich dem Drehimpuls.) Die Bewegungsgleichung

$$\dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial r}(0, 0, p_\phi, r, \frac{\pi}{2}, \phi) = \frac{p_\phi^2}{mr^3} - \frac{e^2}{r} \stackrel{!}{=} 0 \quad (1.8)$$

(wegen $p_r = 0$ verschindet auch \dot{p}_r identisch) liefert das Gleichgewicht von Zentrifugal- und Coulomb-Kraft, und wir erhalten

$$p_\phi = \sqrt{me^2r} \quad \Rightarrow \quad E = -\frac{e^2}{2r}. \quad (1.9)$$

Damit lautet die Quantisierungsbedingung

$$\oint p_\phi \, d\phi = \int_0^{2\pi} \sqrt{me^2r} \, d\phi = 2\pi\sqrt{me^2r} \stackrel{!}{=} 2\pi\hbar n. \quad (1.10)$$

Zunächst gilt $n \in \mathbb{Z}$; da jedoch die linke Seite nicht negativ werden kann, müssen wir auch negative Quantenzahlen ausschließen. Da sich für $n = 0$ das Elektron im Kern aufhalten würde, schränkt man weiter auf $n \in \mathbb{N}$ ein. Auflösen nach dem Radius liefert

$$r_n = \frac{\hbar^2 n^2}{e^2 m}. \quad (1.11)$$

Daraus ergibt sich der **Bohrsche Radius** $r_1 \approx 0,5\text{\AA}$, welcher auch im Vergleich mit gaskinetischen Experimenten die richtige Größenordnung hat. Weiter erhalten wir durch Einsetzen in (1.9) die Energieniveaus des Bohrschen Wasserstoffatoms zu

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (1.12)$$

Auf der Basis des zweiten Bohrschen Postulats ergeben sich nun die möglichen Frequenzen für Absorption und Emission zu

$$\nu_{nk} = \frac{E_n - E_k}{h} = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n > k. \quad (1.13)$$

Eine Formel dieser Form war bereits 1885 empirisch von Balmer für $k = 2$, die sogenannte **Balmer-Serie**, gefunden worden [4]. Die Serien mit $k = 1, 3, 4$ tragen nach ihren Entdeckern die Namen Lyman, Paschen und Brackett. Auch der Wert des Vorfaktors in (1.13), der Rydberg-Konstante, war in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Werten.

1.2 Verallgemeinerung auf mehrere Freiheitsgrade Bohr-Sommerfeld-Quantisierung

Auch nach dem Erfolg des Bohrschen Atommodells war die Physikergemeinde zunächst unschlüssig darüber, wie die Quantenbedingungen auf Systeme mit mehreren Freiheitsgraden anzuwenden sei (Das Wasserstoffatom ist natürlich bereits ein System mit drei Freiheitsgraden, Bohrs hatte es durch seine explizite Rechnung für Kreisbahnen jedoch auf ein effektiv eindimensionales Problem reduziert.)

Planck betrachtete die Quantisierung des Phasenraumvolumens als geeigneten Ausgangspunkt für eine allgemeine Betrachtung [5]. Dazu unterteilte er (für d Freiheitsgrade) den Phasenraum in Zellen mit Volumen h^d , und **Phasenraumvolumina** sollten nur als Vielfache dieses elementaren Volumens vorkommen, d.h. für $V \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$

$$\int_V d^d p d^d x = n (2\pi\hbar)^d, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (1.14)$$

Weiter müssen nach Planck die Begrenzungen der quantisierten Volumina durch Hyperflächen gegeben sein, die invariant unter dem klassischen Fluß sind. Eine Schar solcher Flächen ist (für ein autonomes System) stets durch die **Energieschalen**

$$\Omega_E = \{(p, x) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \mid H(p, x) = E\} \quad (1.15)$$

gegeben. Für ein eindimensionales System genügt damit die Plancksche Bedingung, um die möglichen Energieniveaus festzulegen und führt, wie man sich anhand von Skizze 1 leicht klar macht, auf dieselbe Bedingung wie (1.1), da

$$\int_{I(\Omega_E)} dp dx = \oint p dx, \quad (1.16)$$

wobei $I(\Omega_E)$ das Innere von Ω_E bezeichnet. Für Systeme mit mehreren Freiheitsgraden ist diese eine Bedingung jedoch nicht hinreichend, um die quantentheoretisch erlaubten Zustände festzulegen. Nach Plancks Methode müssen nun weitere $2d-1$ -dimensionale, invariante Hyperflächen gefunden werden, die dann ebenfalls in Quantisierungsbedingungen eingehen, um so die erlaubten Zustände des Systems weiter zu einguzugrenzen.

Sommerfelds Standpunkt war [3] (vgl. auch entsprechende Beiträge von Schwarzschild [6] und Epstein [7]), bei separablen Systemen dasjenige Koordinatensystem zu wählen, in

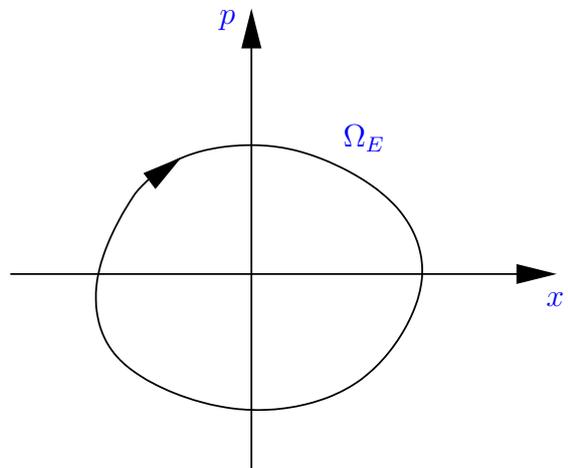


Abbildung 1: Bahnkurve $p(x)$ bzw. Energieschale Ω_E für $d = 1$.

dem die Bewegungsgleichungen separieren und dann für jeden Freiheitsgrad eine Bedingung der Form (1.1) zu fordern,

$$\oint p_j dx_j = 2\pi\hbar n_j, \quad n_j \in \mathbb{Z}, \quad j = 1, \dots, d. \quad (1.17)$$

Auf diese Weise quantisierte Sommerfeld im Wasserstoffatom nicht nur Kreisbahnen sondern beliebige Kepler-Ellipsen und führte neben Bohrs Hauptquantenzahl n auch sogenannte Nebenquantenzahlen ein (siehe Abschnitt 1.3).

Einstein schloß sich dem Sommerfeldschen Standpunkt an [8] und gab eine koordinatenunabhängige Formulierung. Er stellte fest, daß nicht Separabilität sondern lediglich Integrierbarkeit (nach Liouville [9]) notwendig sei und betonte den geometrischen Charakter des Problems.

In einem integrablen System mit d Freiheitsgraden existieren d unabhängige Erhaltungsgrößen. Die invariante, d -dimensionale Niveaufäche für feste Werte aller Erhaltungsgrößen hat die Topologie eines Torus \mathbb{T}^d . Auf einem solchen Torus existiert eine Basis d nicht-kontrahierbarer Zyklen \mathcal{C}_j , siehe Abb. 2. Einstein forderte nun, daß entlang eines jeden Zyklus das Wegintegral von $\mathbf{p}d\mathbf{x}$ quantisiert sei,

$$\oint_{\mathcal{C}_j} \mathbf{p} d\mathbf{x} = 2\pi\hbar n_j, \quad n \in \mathbb{Z}^d, \quad (1.18)$$

und formulierte damit koordinatenunabhängige Quantisierungsbedingungen für beliebige integrable Systeme. Für separable Systeme entsprechen diese den Sommerfeldschen Bedingungen. Einstein erkannte in [8] außerdem bereits, daß sich diese Methode grundsätzlich nicht auf nicht-integrable Systeme, also insbesondere chaotische Systeme, verallgemeinern läßt.

Den geeigneten Rahmen für die Quantisierung von Systemen mit mehreren Freiheitsgraden bietet dann die Integration der Hamilton-Jacobi-Gleichung durch Einführung von Wirkungs- und Winkelvariablen. Nach dieser Methode wollen wir nun noch einmal das Wasserstoffatom quantisieren.

1.3 Das Wasserstoffatom nach Sommerfeld

Die folgende Herleitung des Wasserstoffspektrums wurde 1916 von Sommerfeld angegeben [3], siehe auch [10].

Wir erinnern uns, daß bei einer Bewegung in einem Zentralpotential stets der **Drehimpuls**

$$\mathbf{L} = m\mathbf{x} \times \dot{\mathbf{x}} \quad (1.19)$$

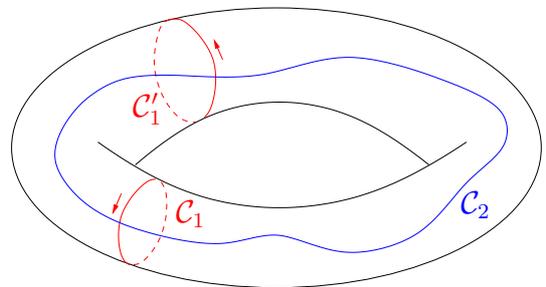


Abbildung 2: Nichtkontrahierbare Basis-Zykel \mathcal{C}_j auf einem zweidimensionalen Torus \mathbb{T}^2 .

erhalten ist, d.h. $\{H, \mathbf{L}\} = 0$, wobei $\{\cdot, \cdot\}$ die **Poissonklammer**, definiert durch,

$$\{A, B\} = \sum_{j=1}^d \left(\frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial B}{\partial x_j} - \frac{\partial A}{\partial x_j} \frac{\partial B}{\partial p_j} \right), \quad (1.20)$$

bezeichnet. Die Poissonklammern zwischen Komponenten des Drehimpulses verschwinden nicht, z.B. $\{L_x, L_y\} = -L_z$. Wegen $\{\mathbf{L}^2, L_z\} = 0$ ist es sinnvoll

$$E = H, \quad L := |\mathbf{L}| \quad \text{und} \quad M := L_z \quad (1.21)$$

als unabhängige Erhaltungsgrößen zu betrachten. In Kugelkoordinaten gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= m r \mathbf{e}_r \times \left(\dot{r} \mathbf{e}_r + r \dot{\theta} \mathbf{e}_\theta + r \dot{\phi} \sin \theta \mathbf{e}_\phi \right) \\ &= m r^2 \dot{\theta} \mathbf{e}_\phi - m r^2 \dot{\phi} \sin \theta \mathbf{e}_\theta \\ &= p_\theta \mathbf{e}_\phi - \frac{p_\phi}{\sin \theta} \mathbf{e}_\theta, \end{aligned} \quad (1.22)$$

und damit

$$L = \sqrt{p_\theta^2 + \frac{p_\phi^2}{\sin^2 \theta}} \quad \text{und} \quad M = p_\phi. \quad (1.23)$$

Wir lösen nun das Zentralproblem mithilfe von Wirkungs- und Winkelvariablen. Aus der Hamiltonfunktion (1.6) ergibt sich die zeitunabhängige **Hamilton-Jacobi-Gleichung**

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{2m r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{2m r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial S}{\partial \phi} \right)^2 + V(r) = E \quad (1.24)$$

(für beliebige Zentralpotentiale $V(r)$ – wir sind später speziell am Coulombpotential $V(r) = -\frac{e^2}{r}$ interessiert). Durch einen Separationsansatz führen wir zwei Integrationskonstanten (Erhaltungsgrößen) ein, die wir durch Vergleich mit (1.23) mit der z -Komponente und dem Betrag der Drehimpuls identifizieren,

$$\underbrace{r^2 \left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{\sin^2 \theta} \underbrace{\left(\frac{\partial S}{\partial \phi} \right)^2}_{=M^2}}_{=L^2} = 2m r^2 (E - V(r)). \quad (1.25)$$

Dann führen wir **Wirkungsvariablen** ein,

$$\begin{aligned} I_\phi &= \frac{1}{2\pi} \oint \frac{\partial S}{\partial \phi} d\phi = \frac{1}{2\pi} \oint M d\phi, \\ I_\theta &= \frac{1}{2\pi} \oint \frac{\partial S}{\partial \theta} d\theta = \frac{1}{2\pi} \oint \pm \sqrt{L^2 - \frac{M^2}{\sin^2 \theta}} d\theta, \\ I_r &= \frac{1}{2\pi} \oint \frac{\partial S}{\partial r} dr = \frac{1}{2\pi} \oint \pm \sqrt{2m(E - V(r)) - \frac{L^2}{r^2}} dr, \end{aligned} \quad (1.26)$$

wobei $\pm\sqrt{\dots}$ jeweils bedeutet, daß auf unterschiedlichen Abschnitten des Integrationsweges, unterschiedliche Zweige der Wurzel verwendet werden müssen. Die erste Wirkungsvariable I_ϕ bestimmt sich trivial zu

$$I_\phi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} M d\phi = M. \quad (1.27)$$

Der Integrationsweg im zweiten Integral erstreckt sich von θ_{\min} zu $\theta_{\max} = \pi - \theta_{\min}$ und zurück, vgl. Abb. 3, wobei auf dem ersten Teilstück die positive Wurzel und auf dem Rückweg die negative Wurzel zu nehmen ist. Zur Berechnung betrachten wir die Integration des invarianten Ausdrucks $\mathbf{p} d\mathbf{x}$ entlang einer Kepler-Ellipse. Führen wir einen zweiten Satz Kugelkoordinaten (r, θ', ϕ') ein, wobei die z' -Achse $\parallel \mathbf{L}$ sei, so gilt

$$\cancel{p_r dr} + p_\theta d\theta + p_\phi d\phi = \cancel{p_r dr} + p_{\theta'} d\theta' + p_{\phi'} d\phi' \quad (1.28)$$

Weiter ist $p_{\phi'} = L$, und entlang des Integrationswegs gilt $\theta' = \text{const.} (= \frac{\pi}{2})$, d.h.

$$p_\theta d\theta + p_\phi d\phi = L d\phi'. \quad (1.29)$$

Damit erhalten wir sofort die zweite Wirkungsvariable,

$$I_\theta = \frac{1}{2\pi} \oint p_\theta d\theta = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} L d\phi' - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} M d\phi = L - M. \quad (1.30)$$

Berechnet man nun die dritte Wirkungsvariable I_r und löst das Ergebnis nach der Energie E auf, so erhält man einen Ausdruck, in den man direkt die Quantenzahlen aus den Quantisierungsbedingungen einsetzen kann. Speziell für das Coulomb-Potential $V(r) = -\frac{e^2}{r}$ erhält man (siehe Übungsaufgabe 1)

$$I_r = -L + \sqrt{\frac{me^4}{-2E}}, \quad (1.31)$$

sowie

$$E = -\frac{me^4}{2(I_r + L)^2}. \quad (1.32)$$

Nach Sommerfeld (1.17) sind die Wirkungen nun wie folgt zu quantisieren,

$$\begin{aligned} L &= \hbar l, & l &\in \mathbb{N} \\ I_r &= \hbar n_r, & n_r &\in \mathbb{N}_0, \end{aligned} \quad (1.33)$$

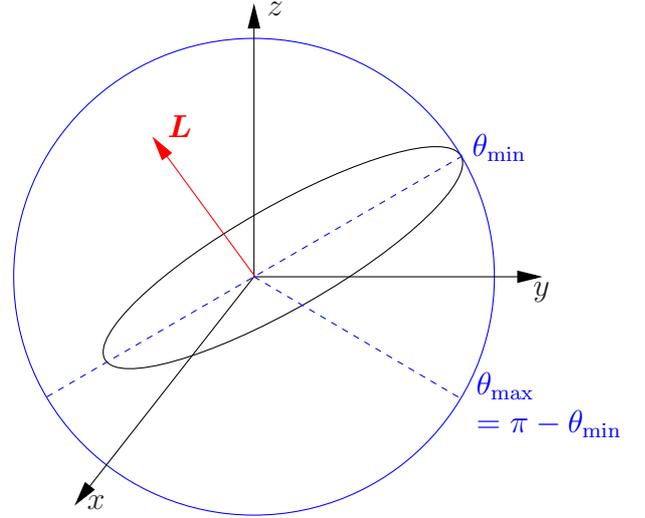


Abbildung 3: Kepler-Ellipse, Grenzen der θ -Integration und Drehimpuls \mathbf{L} .

und mit

$$E_{n_r, l} = -\frac{me^4}{2\hbar^2(n_r + l)^2} \quad (1.34)$$

erhalten wir dieselben Energieniveaus wie nach Bohr (1.12). Die Beschränkung auf positive Quantenzahlen n_r und l ergibt sich daraus, daß die klassischen Größen I_r und L nicht negativ werden können. Weiter schloß Sommerfeld den Fall $l = 0$ aus, da dabei das Elektron den Kern durchqueren müßte.

Der Vorteil dieser Formulierung ist, daß neben den Energieniveaus auch ihre Multiplizitäten bestimmt werden können. Dabei ist auch die Quantisierungsbedingung für $I_\phi = M$ zu berücksichtigen, die eine dritte Quantenzahl liefert,

$$M = m\hbar, \quad m = -l, -l + 1, \dots, l, \quad (1.35)$$

welche jedoch nicht in die Energie eingeht. Die möglichen Werte für m ergeben sich dabei aus der (trivialen) klassischen Bedingung $|M| \leq L$. Betrachtet man weiter kleine Störungen des Systems, z.B. durch ein äußeres elektrisches oder magnetisches Feld (Stark- bzw. Zeeman-Effekt), so hängen die Energieniveaus im allgemeinen auch nichttrivial von l und m ab. Sommerfeld und andere lieferten auf diese Weise bereits früh quantitative Beschreibungen vieler spektroskopischer Experimente, siehe z.B. [3, 10].

1.4 Das Bohrsche Korrespondenzprinzip

Mithilfe der Quantisierungsbedingungen des 2. Bohrschen Postulats lassen sich atomare Energieniveaus und mögliche Frequenzen für absorbierte oder emittierte elektromagnetische Strahlung bestimmen. Zunächst sind jedoch keine weitergehenden Aussagen über beispielsweise **Intensität** oder **Polarisation** der emittierten Strahlung möglich – Größen, die bei der klassischen Beschreibung eines abstrahlenden Systems berechnet werden können. Außerdem treten in Experimenten nicht immer alle Frequenzen auf, die bei Übergängen von beliebigen Anfangs- in beliebige Endniveaus möglich wären. Man muß daher annehmen, daß nicht alle Übergänge möglich sind. Ist ein bestimmter Übergang verboten, so spricht man von einer **Auswahlregel**. Um diese fehlenden Informationen zu gewinnen, bediente sich Bohr des Vergleichs mit der klassischen Beschreibung, die in einem bestimmten Grenzfall richtig werden muß.

Zur Illustration betrachten wir zunächst nach (1.13) einen Übergang vom n -ten Niveau in das nächstniedrigere, d.h. $k = n - 1$. Für große n gilt

$$\left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2}\right) = \frac{n^2 - k^2}{n^2 k^2} = \frac{(n+k)(n-k)}{n^2 k^2} \approx \frac{2n}{n^4} = \frac{2}{n^3} \quad (1.36)$$

d.h.

$$\nu_{n, n-1} \approx \frac{me^4}{2\pi\hbar^3 n^3}. \quad (1.37)$$

Dies ist jedoch, wie man sich leicht überzeugt, gerade die klassische Umlauffrequenz bei der Energie $E = E_n$. Bei großer Hauptquantenzahl n strahlt das Atom also quantentheoretisch wie klassisch auf die gleiche Weise ab, nämlich, beim Übergang in das nächstniedrigere Niveau mit der klassischen Grundfrequenz. (Für $n - k = 2, 3, \dots$ treten entsprechend höhere Harmonische auf.)

Ausgehend von dieser Beobachtung postulierte Bohr (siehe z.B. [2, 11, 1]), daß im Grenzfall $|n - k| \ll n, k$ die klassische Physik wieder gültig wird. Dies ist die Kernaussage des Bohrschen Korrespondenzprinzips, welches nun erlaubt die fehlenden quantentheoretischen Informationen aus der klassischen Theorie zu gewinnen. Im Fall von Auswahlregeln, beispielsweise, argumentiert man folgendermaßen: Für eine periodisch (oder quasiperiodisch) bewegte klassische Ladung kann die Zeitabhängigkeit des Aufenthaltsorts $\mathbf{x}(t)$ in eine Fourierreihe entwickelt werden. Das System strahlt dann elektromagnetische Wellen mit den, in der Fourierreihe vorkommenden, Frequenzen ab. Tritt nun eine Frequenz, die zunächst nach dem zweiten Bohrschen Postulat möglich wäre, in dieser Fourierreihe nicht auf (kommt also im entsprechenden klassischen Problem nicht vor), so ist sie nach dem Korrespondenzprinzip verboten.

Das Bohrsche Korrespondenzprinzip war also für die alte Quantentheorie weit **mehr als eine Konsistenzüberlegung**, die besagte, in welchem Grenzfall die Quantentheorie in die klassische Mechnaik übergeht – eine Aussage wie sie für jede neue physikalische Theorie gelten muß, die eine bis dahin gültige alte Theorie ablösen möchte. Das Korrespondenzprinzip war vielmehr ein integraler Bestandteil der alten Quantentheorie, welches viele spektroskopische Voraussagen erst möglich machte.

Für die Zwecke dieser Vorlesung bemerken wir noch, daß der Limes $|n - k| \ll n, k$ des Bohrschen Korrespondenzprinzips uns im Wasserstoffatom an die Ionisationsgrenze $E = 0$ führt. In diesem Energiebereich ist die spektrale Dichte groß, vgl. Abb 4. Später werden wir den semiklassischen Limes als den formalen Limes $\hbar \rightarrow 0$ definieren, und es wird sich zeigen, daß uns auch dies im Spektrum zu Bereichen hoher Dichte führt. In diesem Sinne ist der semiklassische Limes ein moderner Nachfolger des Bohrschen Korrespondenzprinzips.

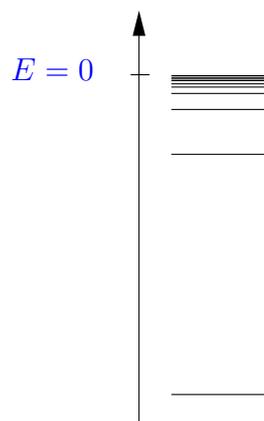


Abbildung 4: Die Energieniveaus des Wasserstoffatoms häufen sich an der Ionisationsschwelle $E = 0$.

2 Fouriertransformation und Verwandtes

In diesem Abschnitt wiederholen wir einige Fakten und Formeln über die Fouriertransformation, Schwartzfunktionen, temperierte Distributionen und Integalkerne von Opera-

toren. Wir illustrieren die allgemeine Theorie anhand einiger Beispiele. Für Details und insbesondere für Beweise verweisen wir z.B. auf [12, Abschnitt V.3] und [13, Abschnitte IX.1-2]. Einen nicht-technischen Überblick erhält man in [14, Anhang A].

2.1 Die Fouriertransformation

Für eine Funktion $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$ definieren wir die Fouriertransformation durch

$$\tilde{f}(p) := \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} f(x) e^{-\frac{i}{\hbar}px} d^d x \quad (2.1)$$

mit festem $\hbar > 0$. Ist auch $\tilde{f} \in L^1(\mathbb{R}^d)$ so erhalten wir durch die Fourier-Umkehrformel

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}^d} \tilde{f}(p) e^{\frac{i}{\hbar}px} d^d p. \quad (2.2)$$

Wir schreiben auch

$$\mathcal{F}[f](p) := \tilde{f}(p) \quad \text{und} \quad \mathcal{F}^{-1}[\tilde{f}](x) := f(x). \quad (2.3)$$

Allerdings ist zu beachten, daß aus $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$ nicht zwangsläufig $\tilde{f} \in L^1(\mathbb{R}^d)$ folgt. Es ist daher sinnvoll die Fouriertransformation zunächst auf anderen Räumen zu definieren.

Beispiel:

$$f(x) = \begin{cases} e^{-x} & , \quad x \geq 0 \\ 0 & , \quad \text{sonst} \end{cases} \in L^1(\mathbb{R}) \quad (2.4)$$

$$\Rightarrow \tilde{f}(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_0^\infty e^{-x} e^{-\frac{i}{\hbar}px} d^d x = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{1}{1 + \frac{i}{\hbar}p} \notin L^1(\mathbb{R}) \quad (2.5)$$

2.2 Schwartz-Funktionen

Wir bezeichnen mit $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ den Raum der Schwartz-Funktionen, der unendlich oft differenzierbaren Funktionen, die zusammen mit all ihren Ableitungen schneller verschwinden als jede Potenz,

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}^d) = \left\{ f \in C^\infty(\mathbb{R}) \left| \sup_{x \in \mathbb{R}^d} |x^\alpha \partial^\beta f(x)| < \infty \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^d \right. \right\}. \quad (2.6)$$

Dabei sind α und β Multiindices, d.h. d -Tupel nichtnegativer ganzer Zahlen, und es gilt

$$x^\alpha := x_1^{\alpha_1} \cdots x_d^{\alpha_d} \quad \text{und} \quad \partial^\alpha := \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \cdots \partial x_d^{\alpha_d}}, \quad (2.7)$$

mit $|\alpha| := \sum_{j=1}^d \alpha_j$.

Es gilt: $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ ist dicht in $L^p(\mathbb{R}^d)$ für jedes $p \geq 1$.

2.3 Temperierte Distributionen

Der duale Raum zu $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ ist der Raum der temperierten Distributionen $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$.

Beispiele:

1. Sei $g \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, dann definiert

$$\langle \bar{g}, \cdot \rangle : f \mapsto \int_{-\infty}^{\infty} g(x) f(x) dx \quad (2.8)$$

eine stetige lineare Abbildung von $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ nach \mathbb{C} , d.h. $\langle \bar{g}, \cdot \rangle \in \mathcal{S}'(\mathbb{R})$. Gleichzeitig erhält man auf diesem Weg eine Einbettung von $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ in $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$ (sogar dicht). Weiter gilt $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \subset L^p(\mathbb{R}^d) \subset \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ für alle $p \geq 1$.

2. Sei $y \in \mathbb{R}^d$. Definiere $\delta_y \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ durch $\delta_y[f] = f(y)$. Obwohl es keine Funktion g mit $\delta_y[f] = \int_{\mathbb{R}^d} g(x) f(x) d^d x$ gibt, schreibt man dennoch symbolisch

$$\delta_y[f] = \int_{\mathbb{R}^d} \delta(x - y) f(x) d^d x = f(y) \quad (2.9)$$

mit der sogenannten δ -Funktion $\delta(x - y)$.

Für $T \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$, $\alpha \in \mathbb{N}_0^d$ definiert man die Ableitung $\partial^\alpha T$ (genannt schwache Ableitung, bzw. Ableitung im Sinne von Distributionen) durch

$$(\partial^\alpha T)[f] := (-1)^{|\alpha|} T[\partial^\alpha f]. \quad (2.10)$$

Im Fall einer Distribution vom Typ aus Beispiel 1 ist dies äquivalent zur Differentiation von Funktionen, wie man sich durch partielle Integration überzeugt,

$$\int_{\mathbb{R}^d} (\partial^\alpha g)(x) f(x) d^d x = (-1)^{|\alpha|} \int_{\mathbb{R}^d} g(x) (\partial^\alpha f)(x) d^d x. \quad (2.11)$$

Beispiele: Sei $y \in \mathbb{R}$ und

$$\theta(x - y) = \begin{cases} 1 & , \quad x \geq y \\ 0 & , \quad \text{sonst} \end{cases}. \quad (2.12)$$

Als Funktion ist θ offensichtlich nicht differenzierbar (nicht einmal stetig), aber es gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} \theta'(x - y) f(x) dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \theta(x - y) f'(x) dx = - \int_y^{\infty} f'(x) dx = f(y), \quad (2.13)$$

d.h. $\theta'(x - y) = \delta(x - y)$ in \mathcal{S}' .

2.4 Fouriertransformation (fortgesetzt)

Man kann nun zeigen, daß für $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ auch $\tilde{f} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ und daß tatsächlich gilt

$$\mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[f]] = f = \mathcal{F}[\mathcal{F}^{-1}[f]] \quad (2.14)$$

Sodann definiert man die Fouriertransformierte (und analog die Rücktransformation) einer temperierten Distribution $T \in \mathcal{S}'$ durch

$$\tilde{T}[f] = T[\tilde{f}]. \quad (2.15)$$

Man rechnet leicht nach, daß dies für $T = \langle \bar{g}, \cdot \rangle$, $g \in \mathcal{S}$, äquivalent zur Fouriertransformation der Funktion g ist.

Beispiel:

$$\tilde{\delta}_0[f] = \delta_0[\tilde{f}] = \tilde{f}(0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} f(x) \, d^d x \quad (2.16)$$

bzw., ausgedrückt über die δ -Funktion,

$$\mathcal{F}[\delta_0](p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d}. \quad (2.17)$$

Die Rücktransformation liefert die **Fourierdarstellung der δ -Funktion**

$$\delta(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{\frac{i}{\hbar}xp} \, d^d p. \quad (2.18)$$

Weiter lassen sich leicht verschiedene Rechenregeln zeigen (für Fouriertransformationen von Produkten, Ableitungen, Faltungen...), von denen für uns im weiteren Verlauf v.a. die folgende wichtig ist,

$$\mathcal{F}[\partial^\alpha f](p) = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{|\alpha|} p^\alpha \tilde{f}(p), \quad (2.19)$$

(Beweis durch partielle Integration).

2.5 Schwartzscher Darstellungssatz

Später werden wir Distributionen auch zur Darstellung von Integralkernen linearer Operatoren verwenden. Basis ist der **Schwartzsche Satz vom Kern** (Schwartzscher Darstellungssatz).

Satz 2.1. (Schwartz) Sei \hat{A} ein stetiger, linearer Operator,

$$\hat{A}: \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}'(\mathbb{R}^l), \quad (2.20)$$

dann existiert eine eindeutige temperierte Distribution $K_A \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^{d+1})$, so daß

$$(\hat{A}f)(x) = \int_{\mathbb{R}^d} K_{\hat{A}}(x, y) f(y) \, d^d y. \quad (2.21)$$

Man nennt $K_{\hat{A}}$ den (Integral-)Kern von \hat{A} .

Bemerkung: Wir verwenden hier dieselbe saloppe Schreibweise wie bei der δ -Funktion, d.h. $K_A(x, y)$ ist natürlich i.A. keine Funktion.

BEWEIS: Den Beweis findet man z.B. in [15, Abschnitt 5.2].

3 Formalismus der Quantenmechanik

3.1 Zum Vergleich: Wiederholung der Hamiltonschen Mechanik

Die Hamiltonsche Mechanik lebt auf dem Phasenraum, einer symplektischen Mannigfaltigkeit – im Folgenden meist \mathbb{R}^{2d} – wo wir (zumindest lokal) Koordinaten (p, x) , kanonisch konjugierte Impulse und Orte einführen können. Observablen werden durch Funktionen $A : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$ dargestellt.

Eine besondere Rolle spielt die Hamiltonfunktion $H(p, x)$ (im Folgenden der Einfachheit halber meist nicht explizit zeitabhängig), die durch die **Hamiltonschen Bewegungsgleichungen**

$$\dot{x} = \nabla_p H(p, x), \quad \dot{p} = -\nabla_x H(p, x), \quad (3.1)$$

die Zeitentwicklung festlegt. Dabei bezeichnet ein Punkt die Ableitung nach der Zeit t . Mit der **Poissonklammer** (1.20)

$$\{A, B\} = (\nabla_p A)(\nabla_x B) - (\nabla_x A)(\nabla_p B) \quad (3.2)$$

können die Bewegungsgleichungen in symmetrischer Form geschrieben werden,

$$\dot{x} = \{H, x\}, \quad \dot{p} = \{H, p\}. \quad (3.3)$$

Allgemein gilt für jede (nicht explizit zeitabhängige) Observable

$$\dot{A} = \{H, A\}. \quad (3.4)$$

NOTATION: Wenn $(p(t), x(t))$ die Lösung von (3.3) mit Anfangsbedingung $(p(0), x(0)) = (p_0, x_0)$ bezeichnet, dann schreiben wir auch

$$\phi^t(p_0, x_0) := (p(t), x(t)), \quad (3.5)$$

wobei $\phi^t : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ der Hamiltonsche Fluß ist; mit den offensichtlichen Eigenschaften

$$\phi^0 = \text{id} \quad \text{and} \quad \phi^t \circ \phi^{t'} = \phi^{t+t'}. \quad (3.6)$$

3.2 Zustandsraum und Messung

Der Zustandsraum der Quantenmechanik ist ein **Hilbertraum**, d.h. ein Vektorraum \mathcal{H} über \mathbb{C} mit einem Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \ni (\psi, \phi) \mapsto \langle \psi, \phi \rangle \in \mathbb{C}$ und einer Norm $\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi, \psi \rangle}$, bezüglich welcher \mathcal{H} vollständig ist.

Beispiel: Für ein Punktteilchen in d Dimensionen: $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$,

$$\langle \psi, \phi \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\psi(x)} \phi(x) \, d^d x. \quad (3.7)$$

Ist ψ so normiert, daß $\|\psi\| = 1$, dann interpretiert man $|\psi(x)|^2$ als Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte, d.h. das Teilchen befindet sich mit Wahrscheinlichkeit

$$p_G = \int_G |\psi(x)|^2 \, d^d x \quad (3.8)$$

in $G \subset \mathbb{R}^d$.

Den Phasenraumkoordinaten (p, x) sind Operatoren \hat{p} und \hat{x} zugeordnet, in der **Schrödingerdarstellung**

$$\hat{p}_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \quad \text{und} \quad \hat{x}_j = x_j \quad \text{Multiplikationsoperator),} \quad (3.9)$$

und wir erhalten formal

$$[\hat{p}_j, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \delta_{jk}, \quad (3.10)$$

mit dem Kommutator

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (3.11)$$

(Dabei muß man sich natürlich überlegen, wo \hat{A} , \hat{B} , $\hat{A}\hat{B}$ und $\hat{B}\hat{A}$ definiert sind.) Dies erinnert an die fundamentalen Poissonklammern

$$\{x_j, x_k\} = 0, \quad \{p_j, p_k\} = 0 \quad \text{und} \quad \{p_j, x_k\} = \delta_{jk}, \quad (3.12)$$

der klassischen Mechanik.

Allgemein sind Observablen lineare **selbstadjungierte Operatoren** zugeordnet,

$$\begin{aligned} \hat{A} : \quad \mathcal{H} &\rightarrow \mathcal{H} \\ \psi &\mapsto \hat{A}\psi. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Bemerkung: Sei $D_{\hat{A}} = \{\psi \in \mathcal{H} \mid \hat{A}\psi \in \mathcal{H}\}$ der Definitionsbereich (Domäne) von \hat{A} . Dann ist sein Adjungiertes \hat{A}^\dagger definiert durch

$$\langle \psi, \hat{A}\phi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \psi, \phi \rangle \quad (3.14)$$

mit Definitionsbereich $D_{\hat{A}^\dagger}$.

- \hat{A} heißt symmetrisch, falls $\hat{A}^\dagger \psi = \hat{A} \psi \ \forall \psi \in D_{\hat{A}}$.
- \hat{A} heißt selbstadjungiert, falls $(\hat{A}, D_{\hat{A}}) = (\hat{A}^\dagger, D_{\hat{A}^\dagger})$.
- Ein symmetrischer Operator \hat{A} mit $D_{\hat{A}} \subset D_{\hat{A}^\dagger}$ heißt selbstadjungiert erweiterbar, falls ein selbstadjungierter Operator \hat{A}' existiert mit $\hat{A} \psi = \hat{A}' \psi \ \forall \psi \in D_{\hat{A}}$.
- Ein symmetrischer Operator \hat{A} heißt wesentlich selbstadjungiert, falls \hat{A} eindeutig selbstadjungiert erweiterbar ist.

Befindet sich das System in einem Zustand charakterisiert durch ψ (im Folgenden stets normiert, d.h. $\|\psi\| = 1$) und man mißt die Observable, der der Operator \hat{A} zugeordnet ist, so erhält man als Meßergebnis einen Eigenwert a_n von \hat{A} . Nach der Messung befindet sich das System in einem Zustand ψ_n aus dem zugehörigen Eigenraum, also $\hat{A} \psi_n = a_n \psi_n$. Die Wahrscheinlichkeit p_n , dafür daß die Messung so ausgeht ist gegeben durch $p_n = |\langle \psi_n, \psi \rangle|^2$. Der **Erwartungswert** für den Ausgang der Messung ist

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi, \hat{A} \psi \rangle. \quad (3.15)$$

3.3 Dynamik

Im **Schrödingerbild** entwickeln sich die Zustandsvektoren unitär in der Zeit, d.h.

$$\begin{aligned} \hat{U} : \mathcal{H} \times \mathbb{R} &\rightarrow \mathcal{H} \\ (\psi_0, t) &\mapsto \psi_t \end{aligned} \quad (3.16)$$

mit $\|\psi_t\| = \|\psi_0\| \ \forall t \in \mathbb{R}$. Die Operatoren \hat{A} aus Abschnitt 3.2 sind dagegen konstant in der Zeit.

NOTATION: Wir schreiben $\psi_t = \psi(x, t)$ d.h. heißt insbesondere $\psi_0 = \psi(x, 0)$, und außerdem

$$\psi(x, t) = \hat{U}(t) \psi(x, 0). \quad (3.17)$$

Definiert wird die Zeitentwicklung durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = \hat{H} \psi(x, t), \quad (3.18)$$

wobei der Hamiltonoperator \hat{H} die Quantisierung (s.u.) der klassischen Hamiltonfunktion $H(p, x)$ ist. Formal lesen wir ab

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}. \quad (3.19)$$

Im **Heisenbergbild** ist umgekehrt die Wellenfunktion zeitunabhängig und die Operatoren entwickeln sich gemäß

$$\hat{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}, \quad (3.20)$$

in der Zeit ($\hat{A}(0) = \hat{A}$). Durch Differentiation findet man

$$\dot{\hat{A}}(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}(t)]. \quad (3.21)$$

Man überzeugt sich leicht, daß man in beiden Bildern dieselben Erwartungswerte erhält,

$$\langle \psi_t, \hat{A}\psi_t \rangle = \langle \psi, \hat{A}(t)\psi \rangle. \quad (3.22)$$

Außerdem ähnelt (3.21) stark der Gleichung (3.4) und wir werden später sehen, daß dies kein Zufall ist...

3.4 Das Ehrenfest-Theorem

...ist kein Theorem, sondern folgende Beobachtung, vgl. z.B. [14, Abschnitt 6.12]. Die Bewegungsgleichungen für die Heisenberg-Operatoren der Koordinaten und Impulse sind

$$\dot{\hat{x}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{x}] \quad \text{und} \quad \dot{\hat{p}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{p}]. \quad (3.23)$$

Für die Bewegung eines Partikels in d Dimensionen im Potential $V(x)$ gilt

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}), \quad (3.24)$$

d.h.

$$\dot{\hat{x}} = \frac{i}{2m\hbar}[\hat{p}^2, \hat{x}] = \frac{\hat{p}}{m} \quad \text{und} \quad \dot{\hat{p}} = \frac{i}{\hbar}[V(\hat{x}), \hat{p}] = -\nabla_x V(\hat{x}). \quad (3.25)$$

Wir differenzieren die erste Gleichung nochmals nach der Zeit, setzen die zweite ein und bilden überall Erwartungswerte,

$$\langle \ddot{\hat{x}} \rangle = \frac{\dot{\hat{p}}}{m} = -\frac{1}{m} \langle \nabla_x V(\hat{x}) \rangle. \quad (3.26)$$

Könnten wir nun auf der rechten Seite

$$\langle \nabla_x V(\hat{x}) \rangle \approx \nabla_x V(\langle \hat{x} \rangle) \quad (3.27)$$

schreiben, so hätten wir für den Erwartungswert $\langle \hat{x} \rangle$ die klassische Bewegungsgleichung gefunden (und analog für $\langle \hat{p} \rangle$). Intuitiv erwartet man

- starte mit einem Zustand, der bei $x = x_0$ lokalisiert ist,
- entwickle für kleine Zeiten t das Potential um x_0 , d.h. $V(x) \approx V(x_0)$,

dann gilt obige Näherung, und die Erwartungswerte folgen den klassischen Bewegungsgleichungen. Präzise Varianten des Ehrenfest'schen Theorems sind der Ausgangspunkt für fast alle asymptotischen Aussagen, die wir im Lauf der Vorlesung zeigen werden.

4 Wigner-Weyl-Kalkül

Im Folgenden motivieren wir zunächst ausführlich die Formeln der Weyl-Quantisierung, welche dann (eigentlich als Definition) am Ende des nächsten Abschnitts stehen.

Es existieren verschiedene gute Texte über semiklassische und mikrolokale Analysis, die aus verschiedenen Perspektiven unterschiedliche Schwerpunkte setzen. Die ‘‘Bibel’’ des Gebiets ist das umfassende vierbändige Werk von Hörmander [16]. Weitere klassische Texte sind z.B. die Bücher von Robert [17], Folland [18] oder Grigis und Sjöstrand [19]. Moderne Darstellungen finden sich z.B. bei Dimassi und Sjöstrand [20] sowie bei Martinez [21]. An manchen Stellen war außerdem das Skript von Evans und Zworski [22] Vorlage für die Vorlesung.

4.1 Weylquantisierung

In der klassischen Mechanik wurden Observablen durch Funktionen auf dem Phasenraum dargestellt, für ein Punktteilchen in d Dimensionen $A : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \ni (p, x) \mapsto A(p, x) \in \mathbb{R}$. Die Zuordnung von Operatoren zu einer Observablen nennt man **Quantisierung**.

Wir haben bereits die gefordert, daß $\hat{x} = x$ und $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla_x$. Eine Funktion $A(x)$, die nicht von p abhängt, quantisieren wir entsprechend,

$$\hat{A} = A(\hat{x}), \quad (4.1)$$

ausgedrückt mithilfe der δ -Funktion bzw. über die Fouriertransformation,

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \int_{\mathbb{R}^d} A(x) \delta(x - \hat{x}) d^d x \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} A(x) e^{\frac{i}{\hbar} \xi(x - \hat{x})} d^d \xi d^d x \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \tilde{A}(\xi) e^{\frac{i}{\hbar} \xi \hat{x}} d^d \xi. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Dabei definieren wir $e^{\frac{i}{\hbar} \xi \hat{x}}$ über die Potenzreihe. Die Integrationsvariable ξ hat die Dimension eines Impulses, d.h. das Integral in der zweiten Zeile geht über den Phasenraum. Für Funktionen, die nur von p aber nicht von x abhängen gehen wir analog vor.

Möchten wir eine allgemeinere Funktion $A(p, x)$ quantisieren so stellt sich i.A. ein **Operator-Ordnungsproblem**; z.B. müssen wir uns entscheiden, ob wir der klassischen Funktion xp den Operator

$$\hat{x}\hat{p} = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{oder} \quad \hat{p}\hat{x} = \frac{\hbar}{i} + x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (4.3)$$

oder eine Linearkombination (genauer: Konvexkombination) der beiden zuordnen wollen. Eine mögliche (gute) Wahl ist das, durch die **Weylordnung** gegebene, symmetrische Produkt

$$\widehat{xp} = \frac{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}}{2} \quad (4.4)$$

Wir versuchen es daher mit einer symmetrischen Verallgemeinerung der zweiten Zeile von (4.3),

$$\hat{A} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{2d}} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} A(p, x) e^{\frac{i}{\hbar}[\xi(x-\hat{x})+y(p-\hat{p})]} d^d\xi d^dy d^dp d^dx. \quad (4.5)$$

Als Test berechnen wir in einer Dimension

$$\widehat{p\hat{x}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} px \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}[\xi(x-\hat{x})+y(p-\hat{p})]}}_{e^{\frac{i}{\hbar}[\xi x+yp]} e^{-\frac{i}{\hbar}[\xi\hat{x}+y\hat{p}]}} d\xi dy dp dx. \quad (4.6)$$

Mit einem Spezialfall der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel können wir die Exponentialfunktion aufspalten,

$$e^{-\frac{i}{\hbar}[\xi\hat{x}+y\hat{p}]} = e^{-\frac{i}{\hbar}\xi\hat{x}} e^{-\frac{i}{\hbar}y\hat{p}} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{\xi y}{2}}. \quad (4.7)$$

Außerdem verschieben wir die Integrationsvariable x gemäß $x' = x + \frac{y}{2}$ und erhalten

$$\begin{aligned} \widehat{p\hat{x}} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} p(x' - \frac{y}{2}) e^{\frac{i}{\hbar}\xi(x'-\hat{x})} e^{\frac{i}{\hbar}y(p-\hat{p})} d\xi dy dp dx' \\ &= \hat{x}\hat{p} - \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} p \underbrace{\frac{y}{2} e^{\frac{i}{\hbar}y(p-\hat{p})}}_{\frac{\hbar}{2i} \frac{\partial}{\partial p} e^{\frac{i}{\hbar}y(p-\hat{p})}} dy dp \\ &= \hat{x}\hat{p} - \int_{-\infty}^{\infty} p \frac{\hbar}{2i} \delta'(p - \hat{p}) dp \\ &= \hat{x}\hat{p} + \frac{\hbar}{2i}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

$f(x) \delta'(x) = -f'(x) \delta(x)$

Der Vergleich mit

$$\frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) = \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{x}\hat{p} - [\hat{x}, \hat{p}]) = \hat{x}\hat{p} + \frac{\hbar}{2i}. \quad (4.9)$$

zeigt, daß (4.5) offensichtlich eine gute Definition ist – die wir **Weyl-Quantisierung** nennen. Wir nennen $A(p, x)$ das (Weyl-)Symbol von \hat{A} .

Um explizitere Formeln für die Weyl-Quantisierung zu bekommen, berechnen wir nun $(\hat{A}\psi)(z)$ in der Schrödinger-Darstellung. Es gilt

$$\begin{aligned} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}\xi\hat{x}} \psi \right) (z) &= e^{-\frac{i}{\hbar}\xi z} \psi(z) \quad \text{und} \\ \left(e^{-\frac{i}{\hbar}y\hat{p}} \psi \right) (z) &= \psi(z - y). \end{aligned} \quad (4.10)$$

Die zweite Beziehung ist, ausgeschrieben mir $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$, gerade die Taylorreihe von ψ um z . Zusammen mit (4.7) erhalten wir

$$(\hat{A}\psi)(z) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{2d}} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} A(p, x) e^{\frac{i}{\hbar}(\xi x + y p + \frac{\xi y}{2})} e^{-\frac{i}{\hbar}\xi z} \psi(z - y) d^d\xi d^dy d^dp d^dx. \quad (4.11)$$

Das ξ -integral liefert $\delta(x + \frac{y}{2} - z)$, was uns erlaubt, das x -Integral auszuführen,

$$(\hat{A}\psi)(z) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} A(p, z - \frac{y}{2}) e^{\frac{i}{\hbar}p y} \psi(z - y) d^dp d^dy. \quad (4.12)$$

Durch eine Variablentransformation von y nach $x = z - y$ erhalten wir die übliche Definition der Weylquantisierung.

Definition 4.1. (Weylquantisierung) Sei $A(p, x)$ ein Symbol, $A : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{C}$ dann nennen wir den Operator

$$(\hat{A}\psi)(z) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} A\left(p, \frac{z+x}{2}\right) e^{\frac{i}{\hbar}p(z-x)} \psi(x) d^dp d^dx, \quad (4.13)$$

der auf $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ wirkt, die Weylquantisierung von A . Wir schreiben

$$\text{op}[A] = \hat{A} \quad \text{und} \quad \text{symb}[\hat{A}](p, x) = A(p, x). \quad (4.14)$$

Satz 4.2. (Symbole von Schwartz-Klasse) Sei $A \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$, dann definiert die Weylquantisierung 4.1 einen stetigen Operator

$$\text{op}[A] : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d). \quad (4.15)$$

BEWEIS: Aus (4.13) lesen für $\text{op}[A] = \hat{A}$ den Integralkern

$$(\hat{A}\psi)(x) = \int_{\mathbb{R}^d} K_{\hat{A}}(x, y) \psi(y) d^dy \quad (4.16)$$

zu

$$K_{\hat{A}}(x, y) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} A\left(p, \frac{x+y}{2}\right) e^{\frac{i}{\hbar}p(x-y)} d^dp \quad (4.17)$$

ab. Offensichtlich gilt

$$K_{\hat{A}}(x, y) = \mathcal{F}[A(\cdot, \frac{x+y}{2})](y - x), \quad (4.18)$$

d.h. $K \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$ und mit dem Schwartzschen Satz vom Kern 2.1 folgt die Behauptung. \square

Satz 4.3. (Distributionssymbole) Sei $A \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^{2d})$, dann definiert die Weylquantisierung 4.1 einen stetigen Operator $\text{op}[A] : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$.

BEWEIS: Analog zum Beweis von Satz 4.2, wobei nun sowohl A als auch K aus $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^{2d})$ sind. \square

Satz 4.4. (Adjungierter Operator) Sei $A \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2d})$ (oder auch $A \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^{2d})$), dann gilt

$$\hat{A}^\dagger = \text{op}[\overline{A}]. \quad (4.19)$$

Insbesondere ist die Weylquantisierung eines reellwertigen Symbols symmetrisch.

BEWEIS: Laut (4.17) gilt

$$\begin{aligned} K_{\hat{A}}(x, y) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \overline{A\left(p, \frac{x+y}{2}\right)} e^{\frac{i}{\hbar}p(x-y)} d^d p \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} A\left(p, \frac{x+y}{2}\right) e^{\frac{i}{\hbar}p(y-x)} d^d p \\ &= \overline{K_{\hat{A}}(y, x)} \\ &= K_{\hat{A}^\dagger}(x, y), \end{aligned} \quad (4.20)$$

wobei das letzte Gleichheitszeichen unmittelbar aus $\langle \hat{A}^\dagger \psi, \phi \rangle = \langle \psi, \hat{A} \phi \rangle$ und der Definition des Integralkerns folgt. \square

Um beliebig zwischen Symbolen und Kernen wechseln zu können, berechnen wir noch die Umkehrung von (4.17). Dazu transformieren wir in (4.17) auf die neuen Integrationsvariablen $X = \frac{x+y}{2}$ und $z = x - y$,

$$K_{\hat{A}}\left(X + \frac{z}{2}, X - \frac{z}{2}\right) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} A(p, X) e^{\frac{i}{\hbar}pz} d^d p, \quad (4.21)$$

und invertieren die Fouriertransformation,

$$\text{symb}[\hat{A}](P, X) = A(P, X) = \int_{\mathbb{R}^d} K_{\hat{A}}\left(X + \frac{z}{2}, X - \frac{z}{2}\right) e^{-\frac{i}{\hbar}Pz} d^d z. \quad (4.22)$$

4.2 Die Wignerfunktion

Weylsymbole stellen quantenmechanische Operatoren auf dem klassischen Phasenraum dar. Analog können wir eine Phasenraumdarstellung eines normierten Zustands ψ finden. Dazu betrachten wir den Operator \hat{P}_ψ , der auf ψ projiziert,

$$(\hat{P}_\psi \phi)(x) := \psi(x) \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\psi(y)} \phi(y) d^d y \quad (4.23)$$

Sein Integralkern ist offensichtlich durch $\psi(x)\overline{\psi(y)}$ gegeben. Das zugehörige Symbol nennt man die **Wignerfunktion** von ψ ,

$$\begin{aligned} W[\psi](p, x) &:= \text{symb}[\hat{P}_\psi](p, x) \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \psi\left(x + \frac{z}{2}\right) \overline{\psi\left(x - \frac{z}{2}\right)} e^{-\frac{i}{\hbar}pz} d^d z. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Die Wignerfunktion wird manchmal als Quasiwahrscheinlichkeitsdichte bezeichnet, da ihre Randverteilungen,

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} W[\psi](p, x) d^d p = |\psi(x)|^2 \quad (4.25)$$

und

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} W[\psi](p, x) d^d x = (2\pi\hbar)^d |\tilde{\psi}(p)|^2, \quad (4.26)$$

Wahrscheinlichkeitsdichten für Ort und Impuls sind.

Bemerkung: Analog definiert man die Wignerfunktion eines beliebigen Dichteoperators $\hat{D} = \sum_n p_n \psi_n \langle \psi_n, \cdot \rangle$, sowie die Wignertransformierte zweier Zustände ψ und ϕ , d.h. das Weylsymbol des Kerns $\psi(x)\overline{\phi(y)}$.

Satz 4.5. Sei $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ und $\hat{A} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ die Weylquantisierung des Symbols $A(p, x)$, dann gilt für den Erwartungswert

$$\langle \psi, \hat{A}\psi \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} W[\psi](p, x) A(p, x) d^d p d^d x. \quad (4.27)$$

BEWEIS: Durch Nachrechnen:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} W[\psi](p, x) A(p, x) d^d p d^d x \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \psi\left(x + \frac{z}{2}\right) \overline{\psi\left(x - \frac{z}{2}\right)} e^{-\frac{i}{\hbar}zp} d^d z \int_{\mathbb{R}^d} K_{\hat{A}}\left(x + \frac{z'}{2}, x - \frac{z'}{2}\right) e^{-\frac{i}{\hbar}z'p} d^d z' d^d p d^d x \\ &\quad p\text{-Integral liefert } \delta(z + z'), \text{ führe } z'\text{-Integral aus} \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \psi\left(x + \frac{z}{2}\right) \overline{\psi\left(x - \frac{z}{2}\right)} K_{\hat{A}}\left(x - \frac{z}{2}, x + \frac{z}{2}\right) d^d x d^d z \\ &\quad \text{Variablentrafo: } y = x - \frac{z}{2}, y' = x + \frac{z}{2} \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\psi(y)} K_{\hat{A}}(y, y') \psi(y') d^d y d^d y' \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\psi(y)} (\hat{A}\psi)(y) d^d y = \langle \psi, \hat{A}\psi \rangle \end{aligned}$$

□

4.3 Symbolklassen

Wir möchten nun Symbole betrachten, die für $|p|, |x| \rightarrow \infty$ (wie ein Polynom) anwachsen dürfen und außerdem explizit von \hbar abhängen. Explizit \hbar -abhängige Symbole tauchen in natürlicher Weise auf, sobald wir Produkte von Operatoren betrachten, vgl. das Beispiel für $\text{op}[px]$, Gleichung (4.8).

Definition 4.6. (Ordnungsfunktion) Eine Funktion $m : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^+$ heißt Ordnungsfunktion, wenn es Konstanten C und N gibt, so daß

$$m(p, x) \leq C \langle (p, x) - (\xi, y) \rangle^N m(\xi, y) \quad (4.28)$$

für alle $(p, x), (\xi, y) \in \mathbb{R}^{2d}$. Dabei ist $\langle (p, x) \rangle := \sqrt{1 + p^2 + x^2}$.

Bemerkungen:

- Typische Beispiele sind $m(p, x) \equiv 1$ und $m(p, x) = \langle (p, x) \rangle$.
- Das Produkt $(m_1 m_2)(p, x) = m_1(p, x) m_2(p, x)$ zweier Ordnungsfunktionen ist wieder eine Ordnungsfunktion, denn

$$\begin{aligned} (m_1 m_2)(p, x) &= m_1(p, x) m_2(p, x) \\ &\leq C_1 \langle (p, x) - (\xi, y) \rangle^{N_1} m_1(\xi, y) C_2 \langle (p, x) - (\xi, y) \rangle^{N_2} m_2(\xi, y) \\ &= C \langle (p, x) - (\xi, y) \rangle^N (m_1 m_2)(\xi, y), \end{aligned} \quad (4.29)$$

mit $C = C_1 C_2$ und $N = N_1 + N_2$.

Definition 4.7. (Symbolklassen) Sei $m : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^+$ eine Ordnungsfunktion und $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^d$ Multiindizes. Dann definieren wir die folgende Symbolklassen:

(i)

$$S(m) := \{A \in C^\infty(\mathbb{R}^{2d}) \mid \text{für jedes Paar } \alpha, \beta \exists \text{ eine Konstante } C_{\alpha\beta}, \text{ so daß } |\partial_p^\alpha \partial_x^\beta A| \leq C_{\alpha\beta} m\},$$

(ii) weiter mit $\hbar \in (0, 1]$,

$$S^k(m) := \{A \in C^\infty(\mathbb{R}^{2d}) \mid \text{für jedes Paar } \alpha, \beta \exists \text{ eine Konstante } C_{\alpha\beta}, \text{ so daß } |\partial_p^\alpha \partial_x^\beta A| \leq C_{\alpha\beta} \hbar^{-k} m\},$$

(iii) und mit $\delta \in [0, 1]$,

$$S_\delta^k(m) := \{A \in C^\infty(\mathbb{R}^{2d}) \mid \text{für jedes Paar } \alpha, \beta \exists \text{ eine Konstante } C_{\alpha\beta}, \text{ so daß } |\partial_p^\alpha \partial_x^\beta A| \leq C_{\alpha\beta} \hbar^{-\delta|\alpha| - \delta|\beta| - k} m\}$$

Offensichtlich gilt $S^0(m) = S(m)$ und analog schreibt man auch $S_\delta(m) := S_\delta^0(m)$.

Bemerkungen:

- Grob gesagt, wächst ein Symbol $A \in S(m)$ für $|p|, |x| \rightarrow \infty$, mit all seinen Ableitungen, nicht schneller als $(p^2 + x^2)^{N/2}$.
- Für Symbole $A \in S^k(m)$ wird eine explizite \hbar -Abhängigkeit zugelassen – je größer k , desto singulärer verhält sich A im Limes $\hbar \rightarrow 0$. Man stelle sich z.B. ein \hbar -unabhängiges Symbol mit Vorfaktor \hbar^{-k} vor.
- Bei Symbolen $A \in S_\delta^k(m)$ dürfen Ableitungen für $\hbar \rightarrow 0$ singulärer sein als A selbst.
- Ist $A \in S_\delta^k(m)$ dann ist $\partial_p^\alpha \partial_x^\beta A \in S_\delta^{k+\delta(|\alpha|+|\beta|)}(m)$
- Ist $A \in S_{\delta_1}^{k_1}(m_1)$ und $B \in S_{\delta_2}^{k_2}(m_2)$ dann ist das Produkt $AB \in S_{\max\{\delta_1, \delta_2\}}^{k_1+k_2}(m_1 m_2)$.

Man kann nun zeigen: Falls $A \in S_\delta(m)$, dann gilt $\text{op}[A] : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, d.h. solche Operatoren lassen sich multiplizieren. Für den Beweis siehe z.B. [22, Theorem 4.15]. Wir machen uns die Aussage im Folgenden lediglich dadurch plausibel, daß wir eine Formel für $\text{symp}[\text{op}[A]\text{op}[B]]$ berechnen, und uns dann überlegen, für welche Symbole, das Ergebnis sinnvoll ist. Vorher benötigen wir noch den Begriff der asymptotischen Entwicklung.

Definition 4.8. (Asymptotische Reihe) Sei $A \in S_\delta^{k_0}(m)$ und $A_j \in S_\delta^{k_j}(m)$, wobei $k_{j+1} < k_j$, $k_j \rightarrow -\infty$. Wir sagen $\sum_j A_j$ ist eine asymptotische Entwicklung für A und schreiben

$$A \sim \sum_{j=0}^{\infty} A_j, \tag{4.30}$$

falls

$$A - \sum_{j=0}^{N-1} A_j \in S_\delta^{k_N}(m) \tag{4.31}$$

für jedes $N \in \mathbb{N}$.

Bemerkungen:

- Wir haben für $\hbar > 0$ keine Konvergenz der Reihe $\sum_j A_j$ gefordert.
- Man kann zeigen, daß zu einer Folge $A_j \in S_\delta^{k_j}(m)$, $k_{j+1} < k_j$, $k_j \rightarrow -\infty$, stets ein Symbol $A \in S_\delta^{k_0}(m)$ mit

$$A - \sum_{j=0}^{N-1} A_j \in S_\delta^{k_N}(m) \tag{4.32}$$

existiert, welches modulo $S^{-\infty}(m)$ eindeutig ist; d.h. falls auch $B \sim \sum_j A_j$ dann gilt $A - B \in S^{-\infty}(m)$, wobei

$$S^{-\infty}(\mathbb{R}^d) := \{A \in C^\infty(\mathbb{R}^d) \mid \text{für jedes Paar } \alpha, \beta \text{ und jedes } N \exists \text{ eine Konstante } C_{\alpha\beta}^N, \text{ so daß } |\partial_p^\alpha \partial_x^\beta A| \leq C_{\alpha\beta}^N \hbar^N m\}. \tag{4.33}$$

Wichtige Beispiele für asymptotische Reihen sind durch die sogenannten klassische Symbole $S_{\text{cl}}^k(m)$ gegeben, die eine asymptotische Entwicklung in ganzen \hbar -Potenzen besitzen,

$$A \in S_{\text{cl}}^k(m) \quad \stackrel{\text{Def.}}{\iff} \quad A \sim \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^{-k+j} A_j, \quad A_j \in S(m). \quad (4.34)$$

Man nennt A_0 das Hauptsymbol und A_1 das Subhauptsymbol von A . Wir schreiben wie immer $S_{\text{cl}}(m) := S_{\text{cl}}^0(m)$.

4.4 Das Moyalprodukt

Sowohl klassische Observablen (Funktionen auf dem Phasenraum) als auch quantenmechanische Observablen (geeignete Klassen von Operatoren) können multipliziert (bzw. verknüpft) werden. In der klassischen Mechanik ist diese Multiplikation kommutativ, für lineare Operatoren auf einem Hilbertraum jedoch i.A. nicht. Wir dürfen daher nicht erwarten, daß das Symbol eines Operators $\hat{A}\hat{B}$, den wir durch Multiplikation zweier Operatoren \hat{A} und \hat{B} erhalten haben, durch das Produkt der Symbole dieser Operatoren gegeben ist.

Um festzustellen, welcher Zusammenhang stattdessen gilt, gehen wir wie folgt vor: Wir beginnen mit zwei Operatoren \hat{A} und \hat{B} mit Weylsymbolen A und B , nehmen an, daß die Produkte $\hat{A}\hat{B}$ und $\hat{B}\hat{A}$ sinnvoll definiert werden können und berechnen dann das Symbol $\text{symp}[\text{op}[A]\text{op}[B]]$ ausgedrückt durch die Symbole A und B . Anhand des Ergebnisses überlegen wir und dann, für welche Symbolklassen dieses Vorgehen sinnvoll war. Für bestimmte Klassen von Symbolen A, B werden wir auf diesem Weg eine asymptotische Entwicklung für $\text{symp}[\text{op}[A]\text{op}[B]]$ finden.

Zuerst definieren wir die Fouriertransformierte \tilde{A} von $A = \text{symp}[\hat{A}]$ durch

$$A(p, x) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \tilde{A}(\alpha, \beta) e^{\frac{i}{\hbar}(p\alpha + x\beta)} d^d\alpha d^d\beta. \quad (4.35)$$

Einsetzen in (4.17) liefert

$$K_{\hat{A}}(x, y) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \tilde{A}(\alpha, \beta) e^{\frac{i}{\hbar}[p(x-y+\alpha) + \frac{x+y}{2}\beta]} d^d p d^d\alpha d^d\beta, \quad (4.36)$$

wobei das p -Integral $\delta(x-y+\alpha)$ ergibt, was wir verwenden, um das α -Integral auszuführen,

$$K_{\hat{A}}(x, y) = \int_{\mathbb{R}^d} \tilde{A}(y-x, \beta) e^{\frac{i}{\hbar} \frac{x+y}{2} \beta} d^d\beta. \quad (4.37)$$

Wegen

$$K_{\hat{A}\hat{B}}(x, y) = \int_{\mathbb{R}^d} K_{\hat{A}}(x, z) K_{\hat{B}}(z, y) d^d z \quad (4.38)$$

erhalten wir weiter

$$\begin{aligned}
\text{symb}[\hat{A}\hat{B}](p, x) &= \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} K_{\hat{A}}(x + \frac{z}{2}, y) K_{\hat{B}}(y, x - \frac{z}{2}) e^{-\frac{i}{\hbar}pz} d^d y d^d z \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \tilde{A}(y - x - \frac{z}{2}, \alpha) e^{\frac{i}{\hbar}\alpha \frac{x+y+z/2}{2}} \\
&\quad \tilde{B}(-y + x - \frac{z}{2}, \beta) e^{\frac{i}{\hbar}\beta \frac{x+y-z/2}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}pz} d^d y d^d z d^d \alpha d^d \beta \\
&\text{Variablentransformation von } y, z \text{ nach } X = y - x - \frac{z}{2} \text{ und } Y = -y + x - \frac{z}{2}, \\
&\text{d.h. } z = -(X + Y), y = \frac{X - Y}{2} + x \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \tilde{A}(X, \alpha) \tilde{B}(Y, \beta) e^{\frac{i}{\hbar}\alpha \frac{2x-Y}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\beta \frac{2x+Y}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}p(X+Y)} d^d X d^d Y d^d \alpha d^d \beta.
\end{aligned} \tag{4.39}$$

Das Argument der Exponentialfunktion lautet

$$\frac{i}{\hbar} \left[\underbrace{x(\alpha + \beta) + p(X + Y)}_{(i)} - \underbrace{\frac{1}{2}\alpha Y + \frac{1}{2}\beta X}_{(ii)} \right] \tag{4.40}$$

- Die Terme (i) allein würden uns Fouriertransformationen liefern (denn wir integrieren über α, β, X und Y), d.h. wir müßten $\tilde{A}(X, \alpha)$ und $\tilde{B}(Y, \beta)$ durch $A(p, x)$ und $B(p, x)$ (nun mit den gleichen Argumenten) ersetzen.
- Allerdings haben wir auch die Terme (ii). Für diese entwickeln wir die Exponentialfunktion, und gemäß (2.19), erhalten wir dann für jede Multiplikation mit α, β (oder X, Y) eine Ableitung in der entsprechenden Fouriervariablen, x (oder p).

Insgesamt ergibt sich

$$\begin{aligned}
\text{symb}[\hat{A}\hat{B}](p, x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{\frac{i}{\hbar}[x(\alpha+\beta)+p(X+Y)]} \\
&\quad \tilde{A}(X, \alpha) \left[\frac{i}{2\hbar}(X\beta - \alpha Y) \right]^n \tilde{B}(Y, \beta) d^d X d^d Y d^d \alpha d^d \beta \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A(p, x) \left[\frac{i}{2\hbar} \left(\frac{\hbar}{i} \overleftarrow{\nabla}_p \frac{\hbar}{i} \overrightarrow{\nabla}_x - \frac{\hbar}{i} \overleftarrow{\nabla}_x \frac{\hbar}{i} \overrightarrow{\nabla}_p \right) \right]^n B(p, x)
\end{aligned} \tag{4.41}$$

wobei die Pfeile nach links (oder rechts) anzeigen, daß die Ableitung nur auf Funktionen wirken, die links (oder rechts) des jeweiligen ∇ -Operators stehen.³ (Beispielsweise ergibt

³Littlejohn [23] nennt das Objekt $\overleftarrow{\nabla}_p \overrightarrow{\nabla}_x - \overleftarrow{\nabla}_x \overrightarrow{\nabla}_p$ Janusoperator, nach dem römischen Gott mit den zwei Gesichtern.

die Multiplikation mit X nur eine p -Ableitung von A jedoch nicht von B , da \tilde{B} nicht von X abhing.)

Man stellt fest, daß der n -te Term der Reihe einen Vorfaktor \hbar^n erhält. Es drängt sich daher die Vermutung auf, daß das Ergebnis unserer Rechnung eine asymptotische Entwicklung von $\text{symb}[\hat{A}\hat{B}](p, x)$ darstellt. Allerdings tritt jeder Faktor \hbar zusammen mit zwei Ableitungen auf, d.h. wir müssen sicherstellen, daß die Ableitungen der Symbole A und B für $\hbar \rightarrow 0$ nicht zu singular sind. Wenn wir $A, B \in S_\delta^k(m)$ mit $\delta < \frac{1}{2}$ fordern, dann sind die Terme mit höherem n auch tatsächlich von höherer Ordnung in \hbar , d.h. wir haben eine asymptotische Reihe gefunden.

Satz 4.9. (Moyalprodukt) *Seinen Operatoren \hat{A} und \hat{B} mit Symbolen $A \in S_{\delta_1}^{k_1}(m_1)$ und $B \in S_{\delta_2}^{k_2}(m_2)$ mit $\delta_{1,2} < \frac{1}{2}$ gegeben, dann gilt für das Produkt $\hat{A}\hat{B}$ die asymptotische Entwicklung*

$$\begin{aligned} \text{symb}[\hat{A}\hat{B}](p, x) &\sim \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A(p, x) \left[\frac{\hbar}{2i} \left(\overleftarrow{\nabla}_p \overrightarrow{\nabla}_x - \overleftarrow{\nabla}_x \overrightarrow{\nabla}_p \right) \right]^n B(p, x) \\ &= A(p, x) B(p, x) + \frac{\hbar}{2i} \underbrace{(\nabla_p A \nabla_x B - \nabla_x A \nabla_p B)}_{\{A, B\}}(p, x) + \dots, \end{aligned} \quad (4.42)$$

mit Summanden aus $S_{\max\{\delta_1, \delta_2\}}^{k_1+k_2+n(\delta_1+\delta_2)}(m_1 m_2)$. Insbesondere gilt für $A, B \in S_{\text{cl}}(m)$

$$\text{symb}[[\hat{A}, \hat{B}]] = \frac{\hbar}{i} \{A_0, B_0\} + \mathcal{O}(\hbar^2), \quad (4.43)$$

d.h. das Hauptsymbol des Kommutators ist gleich der Poissonklammer der Hauptsymbole.

5 Semiklassische Zeitentwicklung von Symbolen

5.1 Der Satz von Egorov

Wie möchten nun mithilfe von Weylsymbolen und Moyalprodukt die quantenmechanische Zeitentwicklung von (Heisenberg-)Operatoren untersuchen und mit der klassischen Zeitentwicklung von Observablen in Verbindung bringen.

Dazu benötigen wir zunächst einen wesentlich selbstadjungierten Hamiltonoperator \hat{H} , der dann eine Ein-Parameter-Gruppe unitärer Operatoren

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}, \quad t \in \mathbb{R}, \quad (5.1)$$

erzeugt. Eine in diesem Sinne gute Klasse von Operatoren ist durch die Weylquantisierung von reelwertigen Symbolen $H(p, x) \in S_{\text{cl}}(m)$, d.h.

$$H \sim \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^j H_j, \quad H_j \in S(m), \quad (5.2)$$

mit $m \geq 1$ und H_0 elliptisch, d.h. $\exists C > 0$, so daß

$$|H_0 + i| \geq Cm, \quad (5.3)$$

gegeben.

Als Observablen betrachten wir beschränkte Operatoren \hat{A} , sichergestellt z.B. durch $A \in S_{\text{cl}}(1) \subset S(1)$

Für den zeitentwickelten (Heisenberg-)Operator $\hat{A}(t)$ gilt dann

$$\hat{A}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t), \quad (5.4)$$

d.h. $\hat{A}(t)$ erfüllt die Heisenbergsche Bewegungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}(t)] \quad (5.5)$$

mit Anfangsbedingung $\hat{A}(0) = \hat{A}$. Auf Symbolebene schreiben wir

$$\text{symb}[\hat{A}] = A(t) \quad \text{bzw.} \quad \text{symb}[\hat{A}](p, x) = A(p, x, t). \quad (5.6)$$

Analog zu $A \sim \sum_j A_j$ würden wir auch gerne einen Ansatz

$$A(t) \sim \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^j A_j(t) \quad (5.7)$$

für das Symbol von $\hat{A}(t)$ machen. Solange wir aber nicht wissen, ob die Symbolklasse unter der Zeitentwicklung erhalten bleibt, d.h. ob aus $A \in S_{\text{cl}}(1)$ für geeignete \hat{H} auch $A(t) \in S_{\text{cl}}(1)$ folgt, ist dies eine rein formale Entwicklung ("formale Potenzreihe in \hbar ").

Übersetze nun die Heisenbergsche Bewegungsgleichung auf Symbolebene,

$$\begin{aligned} \frac{\partial A}{\partial t}(t) &= \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\hbar}{2i} \right)^n \left[H \underbrace{(\overleftarrow{\nabla}_p \overrightarrow{\nabla}_x - \overleftarrow{\nabla}_x \overrightarrow{\nabla}_p)^n}_{\overleftrightarrow{J}} A(t) - \underbrace{A(t) (\overleftarrow{\nabla}_p \overrightarrow{\nabla}_x - \overleftarrow{\nabla}_x \overrightarrow{\nabla}_p)^n}_{= (-1)^n H \overleftrightarrow{J} A(t)} H \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{(2n+1)!} \left(\frac{\hbar}{2i} \right)^{2n+1} H \overleftrightarrow{J}^{2n+1} A(t) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{\hbar}{2i} \right)^{2n} H \overleftrightarrow{J}^{2n+1} A(t). \end{aligned} \quad (5.8)$$

Mit $H \in S_{\text{cl}}(m)$ und dem Ansatz (5.7) folgt

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^j \frac{\partial A_j}{\partial t}(t) &= \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{\hbar}{2i} \right)^{2n} \hbar^{l+m} H_l \overleftrightarrow{J}^{2n+1} A_m(t)}_{\mathcal{O}(\hbar^{2n+l+m})} \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^j \sum_{n=0}^{[j/2]} \sum_{l=0}^{j-2n} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{1}{2i} \right)^{2n} H_l \overleftrightarrow{J}^{2n+1} A_{j-2n-l}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Durch Vergleich der Terme mit denselben \hbar -Potenzen erhalten wir Gleichungen für alle $A_j(t)$, die jeweils nur $A_k(t)$ mit $k \leq j$ enthalten, d.h.

$$\frac{\partial A_j}{\partial t}(t) - \{H_0, A_j(t)\} = \sum_{n=1}^{\lfloor j/2 \rfloor} \sum_{l=0}^{j-2n} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{1}{2i}\right)^{2n} H_l \overset{\leftrightarrow 2n+}{J} A_{j-2n-l}(t) + \sum_{l=1}^j \{H_l, A_{j-l}(t)\} \quad (5.10)$$

ist ein rekursives Cauchy-Problem mit Anfangsdaten $A_j(p, x, 0) = A_j(p, x)$. Insbesondere gilt für das Hauptsymbol

$$\frac{\partial A_0}{\partial t}(p, x, t) = \{H(p, x), A_0(p, x, t)\} \quad (5.11)$$

mit Lösung

$$A_0(p, x, t) = A_0(\phi_{H_0}^t(p, x), 0) = A_0(\phi_{H_0}^t(p, x)), \quad (5.12)$$

d.h. man erhält das zeitentwickelte Hauptsymbol, indem man das Argument von mit dem klassischen Hamiltonschen Fluß mit Hamiltonfunktion H_0 propagiert.

Hat man nun (5.10) Ordnung für Ordnung gelöst, dann scheint der Ansatz (5.7) gerechtfertigt gewesen zu sein. Allerdings ist zu beachten, daß wir nun Symbole an $\phi_{H_0}^t(p, x)$ auswerten müssen. Ohne weitere Annahmen können wir aber nicht garantieren, daß z.B. $A_j \circ \phi_{H_0}^t$ wieder in $S_{\text{cl}}(1)$, denn je nach Hamiltonfunktion H_0 könnten die Argumente zu von A_j zu schnell anwachsen. Eine Möglichkeit, dieses Problem zu lösen, ist die weitere Einschränkung der Symbole A auf Funktionen $A \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ mit kompaktem Träger. Dann erhält man z.B. für die zugehörigen Operatoren

$$\exists C > 0 \quad \text{so daß} \quad \left\| \text{op} \left[\sum_{j=0}^{\infty} A_j(t) \right] - \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d)} \leq C \hbar^N \quad (5.13)$$

für jedes $N \in \mathbb{N}$.⁴ Ein analoges Ergebnis erhält man auch, indem man fordert, daß der Hamiltonsche Fluß ϕ_H^t für endliche Zeiten beschränkt ist:

Satz 5.1. (Egorov) Sei $H \in S_{\text{cl}}(m)$ und $A \in S_{\text{cl}}^k(1)$. Weiter sei

$$m \geq 1 \quad \text{und} \quad \exists C > 0 \quad \text{so daß} \quad |H_0 + i| \geq Cm \quad (5.14)$$

sowie

$$\exists C_{\alpha\beta} > 0 \quad \text{so daß} \quad |\partial_p^\alpha \partial_x^\beta H_j(p, x)| < C_{\alpha\beta} \quad (5.15)$$

für alle $(p, x) \in \mathbb{R}^{2d}$ und alle $|\alpha| + |\beta| + j \geq 2$. Dann ist der Heisenbergoperator $\hat{A}(t)$ für jedes feste $t \in \mathbb{R}$ die Weylquantisierung von $A(t) \in S_{\text{cl}}^k(1)$ mit

$$A(t) \sim \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^{-k+j} A_j(t), \quad (5.16)$$

⁴Mit der Operatornorm $\|\hat{A}\|_{L^2 \rightarrow L^2} = \sup_{\|\psi\|_{L^2}=1} \|\hat{A}\psi\|_{L^2}$

wobei die $A_j(t)$ das rekursive Cauchy-Problem (5.10) lösen. Insbesondere gilt für das Hauptsymbol

$$A_0(p, x, t) = A_0(\phi_{H_0}^t(p, x)). \quad (5.17)$$

BEWEIS: Siehe z.B. [17, Theorem IV-10] für einen vollständigen Beweis.

5.2 Heuristische Bemerkungen zur Ehrenfestzeit

Der Satz von Egorov, Satz 5.1, garantiert uns die Kontrolle über die Zeitentwicklung für endliche (feste) Zeiten t im Limes $\hbar \rightarrow 0$. Über die t -Abhängigkeit der Fehlerterme wird keine Aussage gemacht. Möchten wir gleichzeitig zu $\hbar \rightarrow 0$ zu großen Zeiten gehen, d.h. $t \rightarrow \infty$, so kommt das Langzeitverhalten der klassischen Mechanik zum tragen. Beispielsweise können für **chaotische Systeme** kleine Änderungen in der Anfangsbedingungen zu exponentiell anwachsenden Abständen zwischen den entsprechenden Trajektorien führen, vgl. den sogenannten Schmetterlingseffekt, grob gesagt,

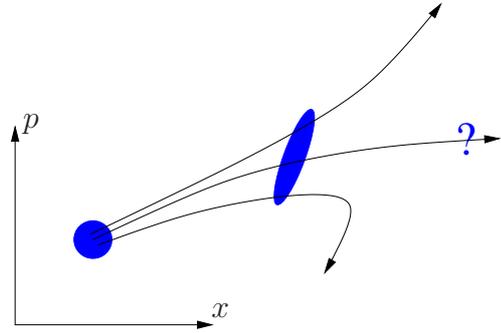


Abbildung 5: Zeitentwicklung der Wignerfunktion eines Wellenpakets entlang exponentiell divergierender Trajektorien.

$$\|\phi_{H_0}^t(p, x) - \phi_{H_0}^t(\xi, y)\| \approx \|(p, x) - (\xi, y)\| e^{\lambda t}, \quad (5.18)$$

mit dem Lyapunov-Exponenten $\lambda > 0$. Wir erwarten daher zunächst, daß kleine Fehler – sagen wir Ordnung \hbar^N – in der Zeit exponentiell größer werden, und damit auf Zeitskalen, die logarithmisch in \hbar sind zu Fehlern der Ordnung 1 anwachsen können. Man nennt

$$\tau_E := \frac{1}{\lambda} \log \frac{1}{\hbar} \quad (5.19)$$

die **Ehrenfestzeit** (auch log-breaking-time) [24, 25].

Um den Zusammenhang mit Abschnitt 3.4 herzustellen bilden wir zunächst in

$$A(p, x, t) \sim A_0(\phi_{H_0}^t(p, x)) + \dots \quad (5.20)$$

auf beiden Seiten die Weyl-Operatoren, d.h. $\text{op}[\dots]$, und dann Erwartungswerte in einem Zustand ψ . Mit Satz 4.5 erhalten wir

$$\langle \psi, \hat{A}(t)\psi \rangle \sim \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} W[\psi](p, x) A_0(\phi_{H_0}^t(p, x)) d^d p d^d x + \dots, \quad (5.21)$$

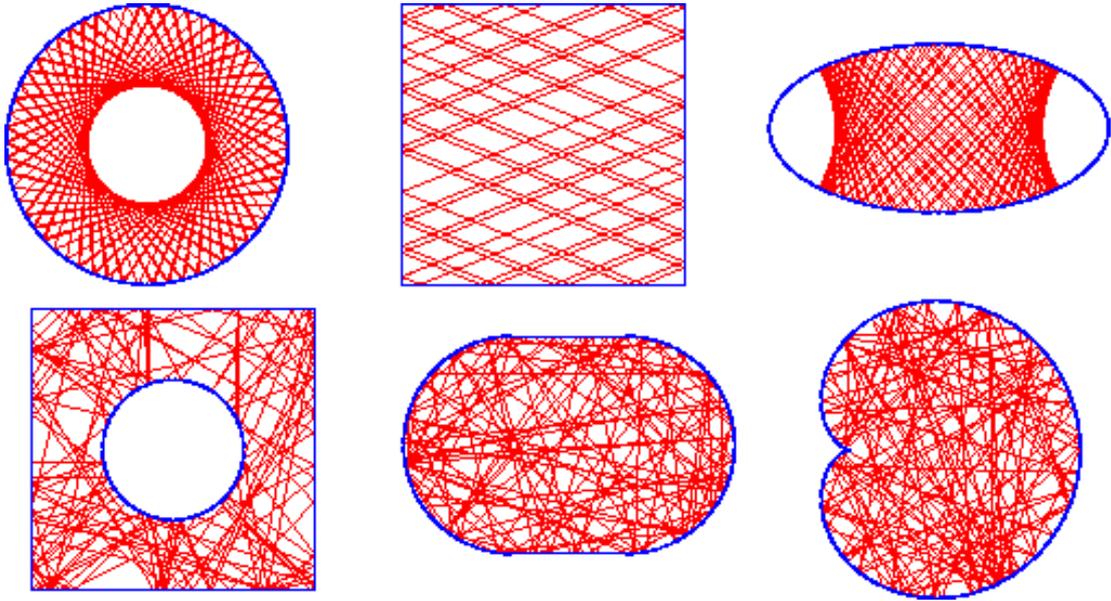


Abbildung 6: Beispiele für zweidimensionale Billards mit integrierbarer (obere Reihe: Kreis, Quadrat, Ellipse) bzw. chaotischer Dynamik (untere Reihe: Sinai, Stadion, Kardioide) – Quelle: <http://www.physik.tu-dresden.de/~baecker/>.

d.h. wir können auch die Zeitentwicklung von Erwartungswerten approximativ mithilfe der klassischen Mechanik beschreiben. Wenn wir eine Variablentransformation $(p', x') = \phi_{H_0}^t(p, x)$ machen, erhalten wir außerdem

$$\langle \psi, \hat{A}(t)\psi \rangle \sim \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} W[\psi](\phi_{H_0}^{-t}(p', x')) A_0(p', x') d^d p' d^d x' + \dots \quad (5.22)$$

(die Jacobi-Matrix für diese Transformation ist $\mathbf{1}$, da ein Hamiltonscher Fluß das Phasenraumvolumen erhält, vgl. Satz von Liouville), d.h. die Wignerfunktion entwickelt sich in führender semiklassischer Ordnung wie eine klassische Phasenraumdichte: Ein Wellenpaket mit einer Wignerfunktion, die um einem Punkt (p, x) im Phasenraum lokalisiert ist, folgt zunächst der Trajektorie durch (p, x) . Nach einer Zeit der Ordnung τ_E wird der quantenmechanische Erwartungswert aber im Allgemeinen von $\phi_{H_0}^t(p, x)$ abweichen, vgl. Abb. 5.

Sowohl für die Zeitentwicklung von Wellenpaketen als auch von Heisenbergoperatoren kann man zeigen, daß semiklassische Approximationen bis zu Zeiten der Ordnung τ_E gültig bleiben, siehe z.B. [26] für Wellenpakete und [27, 28] für Heisenbergoperatoren. Semiklassische Zeitentwicklung zu größeren Zeiten ist Gegenstand aktueller Forschung, siehe z.B. [29, 30, 31].

5.2.1 Was bedeutet $\hbar \rightarrow 0$?

Speziell wenn man von der Gültigkeit semiklassischer Approximationen bis zu \hbar -abhängigen Zeitskalen spricht, ist die Frage berechtigt, was der formale Limes $\hbar \rightarrow 0$ physikalisch bedeutet. In einer numerischen Simulation kann man zwar den Wert von \hbar verändern und das Skalierungsverhalten verschiedener Größen unter einer solchen Veränderung studieren. Das physikalische \hbar ist allerdings eine Naturkonstante mit einem festen Wert, vgl. Abschnitt 1.1.

Man muß daher für verschiedene Systeme jeweils den richtigen physikalischen Grenzübergang finden, der dem formalen Limes $\hbar \rightarrow 0$ entspricht. Oft läßt sich der semiklassische Limes spektral interpretieren, z.B. im Wasserstoffatom als Limes $E \rightarrow 0$ (Ionisationsschwelle) oder als Limes $E \rightarrow \infty$ in homogenen Potentialtöpfen. Oft findet man den geeigneten physikalischen Grenzübergang durch Skalierungsargumente, siehe z.B. [32]. Wir werden später noch sehen, daß $\hbar \rightarrow 0$ spektral stets den Übergang in Bereiche mit großer spektraler Dichte beschreibt, vgl. die Bemerkungen zum Bohrschen Korrespondenzprinzip in Abschnitt 1.4.

Für das folgende Beispiel diskutieren wir hier kurz den Fall von Billards: Betrachte einen Schrödingeroperator ohne Potential, $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$, auf $G \in \mathbb{R}^d$ mit geeigneten Randbedingungen auf ∂G . Für die zeitunabhängige Schrödingergleichung,

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad \xLeftrightarrow{E \neq 0} \quad -\frac{\hbar^2}{2mE}\Delta\psi = \psi \quad (5.23)$$

ist offensichtlich $\hbar \rightarrow 0$ äquivalent zu $\sqrt{E} \rightarrow \infty$. Die klassische Dynamik in einem Billard (freie Bewegung mit elastischer Reflexion am Rand) kann je nach Form der Umrandung zu integrierbarer, chaotischer, oder gemischter Dynamik führen, siehe Abb. 6.

5.2.2 Illustration: Zeitentwicklung im Kardiodbillard

In der Vorlesung wurden Filme gezeigt, in denen die Zeitentwicklung eines Wellenpakets im (halben) Kardiodbillard – Berandung ∂G in ebenen Polarkoordinaten gegeben durch $r(\phi) = (1 + \cos \phi)$ – dargestellt ist, vgl. Abb. 7. Man erkennt, daß das Wellenpaket zunächst (für kleine Zeiten) einer klassischen Bahn folgt – ab Zeiten der Ordnung der Ehrenfestzeit τ_E weichen klassische Trajektorie und quantenmechanischer Erwartungswert voneinander ab. Zu größeren Zeiten (aber immer noch logarithmisch in \hbar bzw. in E) erscheint die Wellenfunktion gleichverteilt mit zufälligen Fluktuationen. Das jeweilige Skalierungsverhalten dieser charakteristischen Zeitskalen kann beobachtet werden, indem man Wellenpakete mit unterschiedlicher mittlerer Energie betrachtet.

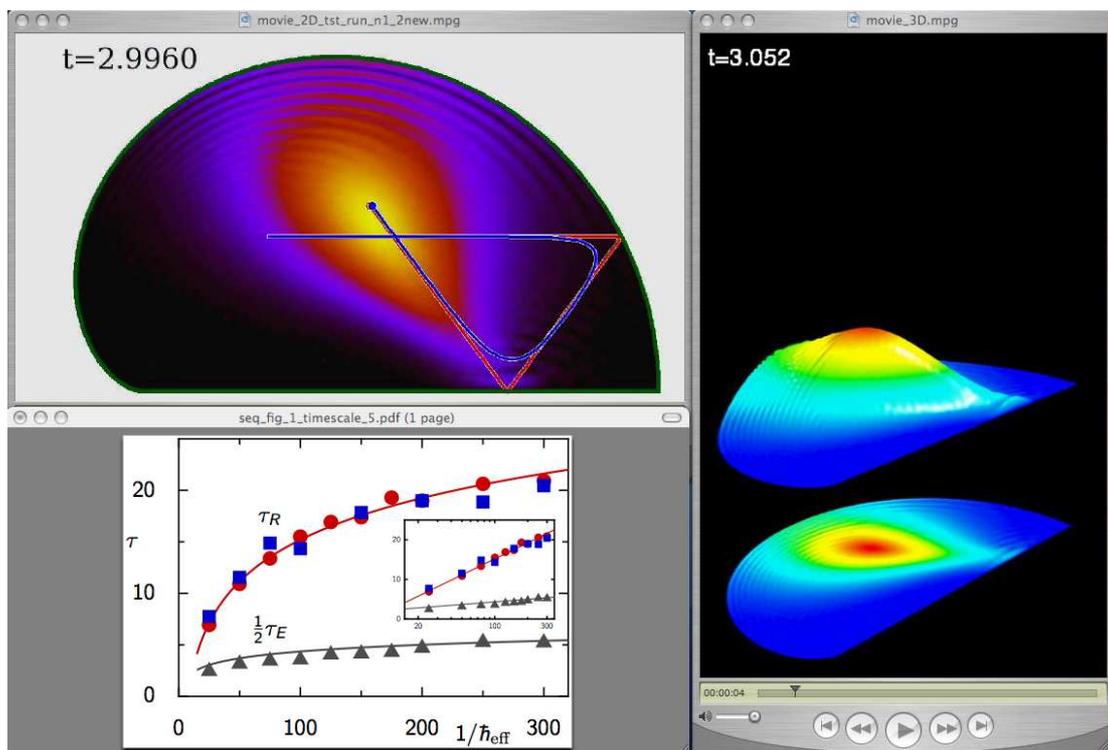


Abbildung 7: Screenshot der Filme und Plots zur Zeitentwicklung von Wellenpakten im Kardiodbillard – mit freundlicher Genehmigung von Arnd Bäcker, siehe auch <http://www.physik.tu-dresden.de/~baecker/>.

6 Oszillatorische Integrale und die Methode der stationären Phase

Ausführungen zur Methode der stationären Phase findet man in vielen einschlägigen Büchern. Eine leicht lesbare anschauliche Einführung mit Hinweisen auf viele Erweiterungen – höhere Ordnungen, Sattelpunktmethode (*method of steepest descent*) – findet sich in [33, P.C. Clemmow, *Asymptotic Approximations to Integrals*, Appendix III]. Unsere Darstellung orientiert sich an [19, Kapitel 2] und der, ebenfalls darauf aufbauenden, Ausarbeitung [34].

6.1 Etwas Heuristik

Wir möchten das asymptotische Verhalten von Integralen der Form

$$I(\hbar) := \int_{\mathbb{R}^d} a(x) e^{\frac{i}{\hbar}\varphi(x)} d^d x \quad (6.1)$$

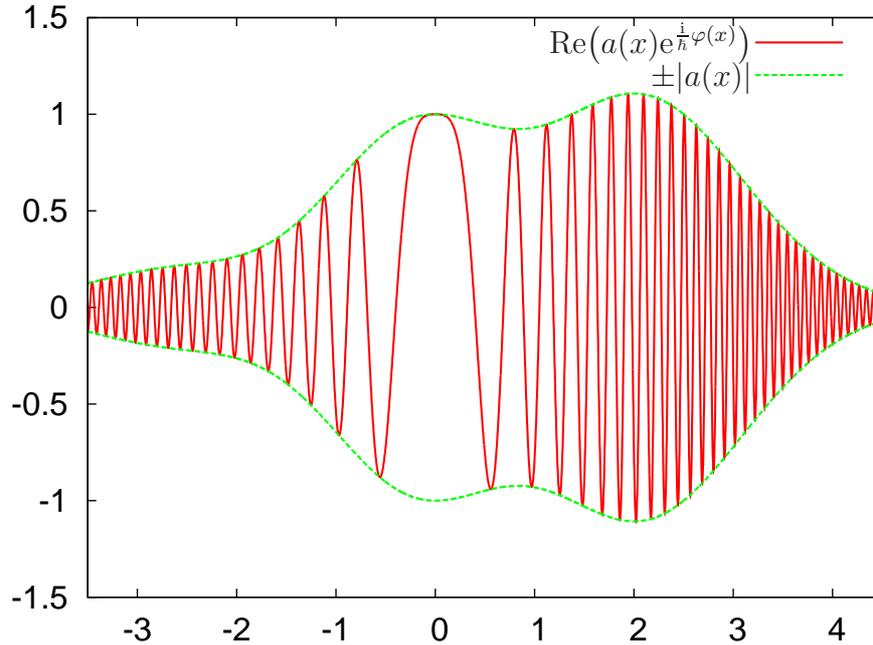


Abbildung 8: Typisches Verhalten des Integranden von $I(\hbar)$ mit einem stationären Punkt bei $x_0 = 0$.

untersuchen. Betrachten wir zunächst das Verhalten des Integranden in der Nähe eines Punktes $y \in \text{supp } a$,

$$\varphi(x) \approx \varphi(y) + (\nabla\varphi)(y) (x - y), \quad (6.2)$$

d.h. im Limes $\hbar \rightarrow 0$ oszilliert der Ausdruck immer schneller (vgl. Abb. 8), und wir erwarten, daß sich im Integral alles weghebt – solange $(\nabla\varphi)(y) \neq 0$.

Sei nun x_0 ein stationärer Punkt (zunächst der einzige!) der Phase φ , d.h. $(\nabla\varphi)(x_0) = 0$. Nach obiger Überlegung sollte der einzige relevante Beitrag zu $I(\hbar)$ aus einer Umgebung von x_0 kommen, vgl. Abb. 8. Wir entwickeln daher

$$\varphi(x) \approx \varphi(x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^T \frac{\partial^2\varphi}{\partial x_j \partial x_k}(x_0) (x - x_0), \quad (6.3)$$

und mit $a(x) \approx a(x_0)$ wird $I(\hbar)$ ein Gaußsches Integral. Das heißt, wenn wir so entwickeln dürften, dann sollte für $\hbar \rightarrow 0$

$$I(\hbar) \approx a(x_0) e^{\frac{i}{\hbar}\varphi(x_0)} \int_{\mathbb{R}^d} e^{\frac{i}{2\hbar}(x-x_0)^T \frac{\partial^2\varphi}{\partial x_j \partial x_k}(x_0) (x-x_0)} d^d x = \frac{(2\pi i \hbar)^{d/2} a(x_0) e^{\frac{i}{\hbar}\varphi(x_0)}}{\sqrt{\det \frac{\partial^2\varphi}{\partial x_j \partial x_k}(x_0)}} \quad (6.4)$$

gelten (solange $\det \frac{\partial^2\varphi}{\partial x_j \partial x_k}(x_0) \neq 0$).

Wir werden im Folgenden zeigen, daß dies tatsächlich der führende Term in einer asymptotischen Entwicklung von $I(\hbar)$ für $\hbar \rightarrow 0$ ist.

6.2 Methode der stationären Phase

Lemma 6.1. (nicht-stationäre Phase) Sei $\varphi \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$ reellwertig, $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ und $\nabla\varphi(x) \neq 0 \forall x \in \text{supp } a$, dann gilt

$$I(\hbar) = \int_{\mathbb{R}^d} a(x) e^{\frac{i}{\hbar}\varphi(x)} d^d x = \mathcal{O}(\hbar^N) \quad \forall N \in \mathbb{N}, \quad \hbar \rightarrow 0. \quad (6.5)$$

Wir schreiben dafür auch

$$I(\hbar) = \mathcal{O}(\hbar^\infty), \quad \hbar \rightarrow 0. \quad (6.6)$$

BEWEIS: Wir definieren den Differentialoperator

$$L := \frac{-i\hbar}{|(\nabla\varphi)(x)|^2} (\nabla\varphi)(x) \nabla \quad (6.7)$$

mit der Eigenschaft

$$L e^{\frac{i}{\hbar}\varphi} = e^{\frac{i}{\hbar}\varphi}. \quad (6.8)$$

Mit partieller Integration erhalten wir

$$\begin{aligned} I(\hbar) &= \int_{\mathbb{R}^d} a(x) L e^{\frac{i}{\hbar}\varphi(x)} d^d x \\ &= i\hbar \int_{\mathbb{R}^d} e^{\frac{i}{\hbar}\varphi(x)} \frac{(\nabla\varphi)(x) (\nabla a)(x)}{|(\nabla\varphi)(x)|^2} d^d x \\ &= \mathcal{O}(\hbar), \end{aligned} \quad (6.9)$$

und analog $\mathcal{O}(\hbar^N)$ mit der Ersetzung $L \mapsto L^N$ und N -facher partieller Integration. \square

Wir haben also gezeigt, daß alle Beiträge zu $I(\hbar)$ in endlicher \hbar -Ordnung tatsächlich von den stationären Punkten der Phase kommen müssen. Habe ϕ daher nun einen (einzigen) isolierten/nicht entarteten, stationären Punkt x_0 im Träger von a , d.h. $(\nabla\varphi)(x_0) = 0$ und

$$\det((D_x^2\varphi)(x_0)) := \det\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x_j \partial x_k}(x_0)\right) \neq 0. \quad (6.10)$$

Betrachte eine Umgebung U von x_0 . Wähle eine Funktion $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ mit $\text{supp } \chi \subset U$ und $\chi(x) = 1 \forall x$ in einer Umgebung $U' \subset U$ von x_0 . Dann haben wir eine Zerlegung der Eins,

$$1 = \chi(x) + [1 - \chi(x)], \quad (6.11)$$

und damit $I(\hbar) = I_1(\hbar) + I_2(\hbar)$ mit

$$\begin{aligned} I_1(\hbar) &:= \int_{\mathbb{R}^d} \chi(x) a(x) e^{\frac{i}{\hbar}\varphi(x)} d^d x \\ I_2(\hbar) &:= \int_{\mathbb{R}^d} [1 - \chi(x)] a(x) e^{\frac{i}{\hbar}\varphi(x)} d^d x. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Da $1 - \chi(x) \neq 0 \forall x \in U'$ folgt mit Lemma 6.1 $I_2(\hbar) = \mathcal{O}(\hbar^\infty)$ und damit

$$I(\hbar) = I_1(\hbar) + \mathcal{O}(\hbar^\infty). \quad (6.13)$$

Im Folgenden sei daher stets o.B.d.A. $\text{supp } a \subset U$.

NOTATION: Da der stationäre Punkt x_0 laut Voraussetzung nicht entartet ist, d.h. $\det((D_x^2\varphi)(x_0)) \neq 0$, hat $(D_x^2\varphi)(x_0)$ keinen Eigenwert 0. Sei also $0 \leq r \leq d$ die Anzahl der positiven Eigenwerte von $(D_x^2\varphi)(x_0)$ (und damit $d - r$ die Anzahl der negativen Eigenwerte), dann definieren wir

$$\text{sgn}(D_x^2\varphi)(x_0) := 2r - d, \quad (6.14)$$

die Anzahl der positiven minus die Anzahl der negativen Eigenwerte.

Der folgende Satz ist zentral für die Methode der stationären Phase, da er uns im wesentlichen zeigt, daß die Approximation der Phase durch die Entwicklung (6.3) tatsächlich erlaubt ist.

Satz 6.2. (Morse-Lemma) *Sei φ stationär in x_0 , nicht entartet, dann existieren Umgebungen U von x_0 und V von $0 \in \mathbb{R}^d$ und ein Diffeomorphismus $y : U \rightarrow V$, so daß*

$$\begin{aligned} \varphi(x(y)) &= \varphi(x_0) + \frac{1}{2} (y_1^2 + \dots + y_r^2 - y_{r+1}^2 - \dots - y_d^2) \\ &=: \varphi(x_0) + \frac{1}{2} y^T Q y, \end{aligned} \quad (6.15)$$

wobei $x(y)$ die Umkehrung von $y : U \rightarrow V$ bezeichnet.

BEWEIS: Zunächst bringen wir den quadratischen Term der Entwicklung der Phase durch einige einfache Variablentransformationen auf die Form aus (6.15)

- Translation $x \mapsto x' = x - x_0$, also $x'_0 = 0$
- orthogonale Transformation $x' \mapsto x'' = R^{-1}x'$ mit

$$x'^T (D_{x'}^2\varphi)(0)x' = x''^T R^T (D_{x''}^2\varphi)(0)R x'' = \sum_{j=1}^d \lambda_j x_j''^2 \quad (6.16)$$

wobei λ_j die Eigenwerte von $(D_{x''}^2\varphi)(0)$ sind, und wir – in vereinfachter Notation – die Funktion $\varphi(x(x''))$ mit $\varphi(x'')$ bezeichnen (analog nach den folgenden Variablentransformationen). Diese Transformation kann so gewählt werden, daß $\lambda_1, \dots, \lambda_r > 0$ und $\lambda_{r+1}, \dots, \lambda_d < 0$.

- Skalierung $z_j := \sqrt{|\lambda_j|} x_j'' \Rightarrow$

$$\varphi(z) - \varphi(z=0) = \frac{1}{2} (z_1^2 + \dots + z_r^2 - z_{r+1}^2 - \dots - z_d^2) + \mathcal{O}(|z|^3) \quad (6.17)$$

Der entscheidende Schritt ist nun, zu zeigen, daß man die Terme höherer Ordnung lokal zum Verschwinden bringen kann.

- Wir betrachten dazu der Ausdruck $\int_0^1 (1-t) \frac{\partial^2}{\partial t^2} \varphi(tz) dt$. Partielle Integration liefert

$$\begin{aligned} \int_0^1 (1-t) \frac{\partial^2}{\partial t^2} \varphi(tz) dt &= -z \underbrace{(\nabla_z \varphi)(0)}_{=0} + \int_0^1 \frac{\partial}{\partial t} \varphi(tz) dt \\ &= \varphi(z) - \varphi(z=0). \end{aligned} \quad (6.18)$$

- Wegen $\frac{\partial^2}{\partial t^2} \varphi(tz) = z^T (D_z^2 \varphi)(tz) z$ gilt

$$\begin{aligned} \varphi(z) - \varphi(z=0) &= \frac{1}{2} z^T Q(z) z \quad \text{mit} \\ Q(z) &:= 2 \int_0^1 (1-t) (D_z^2 \varphi)(tz) dt, \end{aligned} \quad (6.19)$$

und durch Vergleich mit (6.17) folgt weiter

$$\begin{aligned} Q(0) &= 2 \left[t - \frac{1}{2} t^2 \right]_0^1 (D_z^2 \varphi)(0) \\ &= (D_z^2 \varphi)(0) \\ &= \begin{pmatrix} +1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & +1 & & & 0 \\ & & & -1 & & \\ & 0 & & & \ddots & \\ & & & & & -1 \end{pmatrix} \\ &= \text{diag}(\underbrace{+1, \dots, +1}_{r \text{ mal}}, \underbrace{-1, \dots, -1}_{d-r \text{ mal}}). \end{aligned} \quad (6.20)$$

Wir suchen nun noch einen Diffeomorphismus der Form $y(z) = A(z)z$ mit einer Matrix A , die glatt von z abhängt und $A(0) = \mathbb{1}$ erfüllt. Wenn dann

$$Q(z) = A(z)^T Q(0) A(z), \quad (6.21)$$

so gilt

$$\varphi(z) - \varphi(z=0) = \frac{1}{2} z^T Q(z) z = \frac{1}{2} z^T A(z)^T Q(0) \underbrace{A(z)z}_{=y(z)} = \frac{1}{2} y^T Q(0) y \quad (6.22)$$

mit $y(z=0) = 0$ (stationärer Punkt). Damit wäre der Satz gezeigt.

- Sei $M(n, \mathbb{R})$ der Raum der $d \times d$ -Matrizen mit reellen Einträgen und $M_s(n, \mathbb{R})$ der Unterraum der symmetrischen Matrizen. Definiere

$$\begin{aligned} F : M(d, \mathbb{R}) &\rightarrow M_s(d, \mathbb{R}) \\ A &\mapsto A^T Q(0) A \end{aligned} \quad (6.23)$$

mit Ableitung $dF : M(d, \mathbb{R}) \rightarrow L_{M(d, \mathbb{R}) \rightarrow M_s(d, \mathbb{R})}$, und an der Stelle A

$$\begin{aligned} dF(A) : M(d, \mathbb{R}) &\rightarrow M_s(d, \mathbb{R}) \\ B &\mapsto B^T Q(0) A + A^T Q(0) B \end{aligned} \quad (6.24)$$

(Bemerkung: $F(A+B) = F(A) + \underbrace{B^T Q(0) A + A^T Q(0) B}_{=dF(A)(B)} +$ Terme, die quadratisch in den Matrixelementen von B sind). Insbesondere ist

$$dF(\mathbf{1})(B) = B^T Q(0) + Q(0) B \quad (6.25)$$

surjektiv, denn für beliebiges $C \in M_s(d, \mathbb{R})$ wähle $B = \frac{1}{2} Q(0)^{-1} C$, und es gilt $(Q(0)^{-1} = Q(0) = Q(0)^T)$

$$dF(\mathbf{1})(B) = \frac{1}{2} C^T Q(0) Q(0) + \frac{1}{2} Q(0) Q(0) C = C. \quad (6.26)$$

Damit garantiert uns der Satz über implizite Funktionen (bzw. Satz über die Umkehrfunktion) ein glattes Rechtsinverses G von F , d.h. $F \circ G = \text{id}$, wobei G eine Umgebung von $Q(0) \in M_s(d, \mathbb{R})$ auf eine Umgebung von $\mathbf{1} \in M(d, \mathbb{R})$ abbildet.

- Wähle nun $A(z) = G(Q(z))$, und es gilt wie gewünscht

$$Q(z) = (F \circ G)(Q(z)) = F(A(z)) = A(z)^T Q(0) A(z). \quad (6.27)$$

Dies schließt den Beweis des Morse-Lemmas 6.2 ab. □

Nun wenden wir Satz 6.2 auf $I(\hbar) = I_1(\hbar) + \mathcal{O}(\hbar^\infty)$ an,

$$\begin{aligned} I(\hbar) &= \int_U a(x) e^{\frac{i}{\hbar} \varphi(x)} d^d x + \mathcal{O}(\hbar^\infty) \\ &= \int_V a(x(y)) e^{\frac{i}{\hbar} \varphi(x(y))} \left| \det \frac{\partial x_k}{\partial y_l}(y) \right| d^d y + \mathcal{O}(\hbar^\infty) \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} \varphi(x_0)} \int_V a(x(y)) e^{\frac{i}{2\hbar} y^T Q(0) y} \left| \det \frac{\partial x_k}{\partial y_l}(y) \right| d^d y + \mathcal{O}(\hbar^\infty). \end{aligned} \quad (6.28)$$

Wir nennen $Q := Q(0)$ und $b(y) := a(x(y)) \left| \det \frac{\partial x_k}{\partial y_l}(y) \right|$, und es bleibt

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi(x_0)} I(\hbar) = \int_V b(y) e^{\frac{i}{2\hbar} y^T Q y} d^d y + \mathcal{O}(\hbar^\infty) = \int_{\mathbb{R}^d} b(y) e^{\frac{i}{2\hbar} y^T Q y} d^d y + \mathcal{O}(\hbar^\infty). \quad (6.29)$$

Das zweite Gleichheitszeichen gilt, weil der Integrand genau einen stationären Punkt (bei $y = 0$) hat, und wir eine Zerlegung der Eins analog zu (6.13) verwenden können.

Im verbleibenden Integral verwenden wir die Parsevalsche Gleichung für eine Fouriertransformation ohne \hbar , d.h. wir definieren (nur hier)

$$\hat{f}(\xi) := \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} f(x) e^{-ix\xi} d^d x. \quad (6.30)$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} f(x) \overline{g(x)} d^d x &= \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \hat{f}(\xi) e^{ix\xi} \overline{\hat{g}(\xi')} e^{ix\xi'} d^d \xi' d^d \xi \\ &= (2\pi)^d \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \hat{f}(\xi) \overline{\hat{g}(\xi')} \delta(\xi - \xi') d^d \xi' d^d \xi \\ &= (2\pi)^d \int_{\mathbb{R}^d} \hat{f}(\xi) \overline{\hat{g}(\xi)} d^d \xi. \end{aligned} \quad (6.31)$$

Nun benötigen wir noch die Fouriertransformation der komplexen Gauß-Funktion $e^{\frac{i}{2\hbar} y^T Q y}$.

Lemma 6.3. (Gaußsches Integral) Sei M reell symmetrisch und nicht singulär, dann gilt

$$\frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{\frac{i}{2} x^T M x - ix\xi} d^d x = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} |\det M|^{1/2}} e^{i\frac{\pi}{4} \operatorname{sgn} M} e^{-\frac{i}{2} \xi^T M^{-1} \xi}. \quad (6.32)$$

BEWEIS: Siehe Übungsaufgabe 2.

Damit ($M = \frac{1}{\hbar} Q$, $M^{-1} = \hbar Q$, $|\det M| = \hbar^{-d}$) gilt

$$\int_{\mathbb{R}^d} b(y) e^{\frac{i}{2\hbar} y^T Q y} d^d y = (2\pi\hbar)^{d/2} e^{i\frac{\pi}{4} \operatorname{sgn} Q} \int_{\mathbb{R}^d} \hat{b}(\xi) e^{-\frac{i\hbar}{2} \xi^T Q \xi} d^d \xi. \quad (6.33)$$

Nun können wir die e-Funktion in Potenzen von \hbar entwickeln und erhalten als führenden Term

$$\int_{\mathbb{R}^d} \hat{b}(\xi) e^{-\frac{i\hbar}{2} \xi^T Q \xi} d^d \xi = \int_{\mathbb{R}^d} \hat{b}(\xi) [1 + \mathcal{O}(\hbar)] d^d \xi = b(0) + \mathcal{O}(\hbar). \quad (6.34)$$

Es war $b(0) = a(x_0) \left| \det \frac{\partial x_k}{\partial y_l}(y=0) \right|$. Nun gilt aber

$$Q = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y_k \partial y_l}(y=0) = \frac{\partial x_n}{\partial y_l}(y=0) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_n \partial x_m}(x=x_0) \frac{\partial x_m}{\partial y_k}(y=0) \quad (6.35)$$

sowie $|\det Q| = 1$, d.h.

$$1 = |\det(D_x^2 \varphi)(x_0)| \left| \frac{\partial x_n}{\partial y_l}(y=0) \right|^2, \quad (6.36)$$

und damit also

$$b(0) = \frac{a(x_0)}{|\det(D_x^2\varphi)(x_0)|^{1/2}}. \quad (6.37)$$

Alle Ergebnisse dieses Abschnitts ergeben zusammen das folgende Theorem.

Satz 6.4. (stationäre Phase mit isolierten stationären Punkten) Sei

$$I(\hbar) = \int_{\mathbb{R}^d} a(x) e^{\frac{i}{\hbar}\varphi(x)} d^d x \quad (6.38)$$

mit $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$, $\varphi \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$ reellwertig mit einem einzigen, nicht entarteten stationären Punkt $x_0 \in \text{supp } a$. Dann gilt

$$I(\hbar) = (2\pi\hbar)^{\frac{d}{2}} a(x_0) e^{\frac{i}{\hbar}\varphi(x_0)} \frac{e^{i\frac{\pi}{4} \text{sgn}(D^2\varphi)(x_0)}}{|\det(D^2\varphi)(x_0)|^{1/2}} + \mathcal{O}(\hbar^{\frac{d}{2}+1}). \quad (6.39)$$

Falls $\text{supp } a$ mehrere isolierte, nicht entartete, stationäre Punkte enthält, dann müssen ihre Beiträge addiert werden.

BEWEIS: s.o.

Bemerkungen:

- Satz 6.4 liefert genau das in Abschnitt 6.1 geratene Ergebnis (6.4).
- Terme von höherer Ordnung in \hbar lassen sich prinzipiell berechnen, indem man die Entwicklung der e-Funktion in (6.34) zu höheren Ordnungen fortsetzt. Dadurch ergeben sich Ableitungen von $b(y)$ und die Ausdrücke werden schnell unübersichtlich. Ist man nur in einem speziellen Fall explizit an den Termen höherer Ordnung interessiert, so kann es rechentechnisch einfacher sein, das heuristische Argument aus Abschnitt 6.1 wie folgt fortzusetzen: Man setzt die Entwicklung der Phasenfunktion zu entsprechend höherer Ordnung fort, $\varphi(x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^T (D^2\varphi)(x_0) (x - x_0) + R(x - x_0)$ ($R(x - x_0) = \mathcal{O}(|x - x_0|^3)$), und entwickelt danach wiederum $e^{\frac{i}{\hbar}R(x-x_0)}$ zu geeigneter Ordnung. Die Integrale der einzelnen Summanden liefern dann Momente einer Gauß-Verteilung.

Als Nächstes möchten wir Integrale der Form

$$I(\hbar; y) := \int_{\mathbb{R}^d} a(x, y) e^{\frac{i}{\hbar}\varphi(x, y)} d^d x \quad (6.40)$$

betrachten, bei denen Amplitude und Phase glatt von einem Parameter $a \in \mathbb{R}^l$ abhängen. Sei nun $x_0 \in \mathbb{R}^d$ ein stationärer Punkt, d.h.

$$(\nabla_x \varphi)(x_0, y_0) = 0 \quad \text{für ein } y_0 \in \mathbb{R}^l. \quad (6.41)$$

Falls x_0 nicht entartet ist, d.h.

$$\det(D_x^2\varphi)(x_0, y_0) = \det \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_k}(x_0, y_0) \neq 0, \quad (6.42)$$

dann können wir $(\nabla_x \varphi)(x, y) = 0$ lokal nach x auflösen und erhalten $y \mapsto x_0(y)$ aus einer Umgebung von $y_0 \in \mathbb{R}^l$ in eine Umgebung von $x_0 \in \mathbb{R}^d$ mit

$$(\nabla_x \varphi)(x_0(y), y) = 0 \quad \text{und} \quad (D_x^2 \varphi)(x_0(y), y) \neq 0 \quad (\text{und konstant}). \quad (6.43)$$

In diesem Fall erhalten wir als Verallgemeinerung von Satz 6.4 die folgende Aussage.

Satz 6.5. *Sei $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^l)$ so, daß $\{x \in \mathbb{R}^d \mid \exists y \in \mathbb{R}^l \text{ mit } a(x, y) \neq 0\}$ in einem Kompaktum in \mathbb{R}^d enthalten ist. Weiter sei $\varphi \in C^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^l)$ reellwertig mit (in \mathbb{R}^d) isolierten, nicht entarteten stationären Punkten $x_{0,j}(y)$. Dann gilt*

$$I(\hbar, y) = (2\pi\hbar)^{\frac{d}{2}} \sum_j a(x_{0,j}(y), y) e^{\frac{i}{\hbar} \varphi(x_{0,j}(y), y)} \frac{e^{i\frac{\pi}{4} \operatorname{sgn}(D^2\varphi)(x_{0,j}(y), y)}}{|\det(D^2\varphi)(x_{0,j}(y), y)|^{1/2}} + \mathcal{O}(\hbar^{\frac{d}{2}+1}). \quad (6.44)$$

BEWEIS: Obige Überlegung und Anwendung von Satz 6.4.

Als letzten Fall möchten wir nun noch die Situation betrachten, wenn der stationäre Punkt nicht isoliert ist, sondern eine Mannigfaltigkeit $M \subset \mathbb{R}^d$ existiert, auf der $\varphi(x)$ stationär ist, d.h.

$$M := \{x \in \mathbb{R}^d \mid (\nabla \varphi)(x) = 0\} \quad (6.45)$$

sei eine glatte Untermannigfaltigkeit mit Dimension $l < d$. Eine hinreichende Bedingung dafür ist, daß die Ableitung der Funktion

$$\nabla \varphi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d \quad (6.46)$$

surjektiv auf M ist $\Leftrightarrow \operatorname{rang}(D^2\varphi)(x) = d-l \quad \forall x \in M$. Dann können wir lokal Koordinaten $(u(x), v(x))$ einführen, so daß $x \in M \Leftrightarrow v(x) = 0$, d.h. $u = (u_1, \dots, u_l)$ parametrisieren M (lokal). Wir definieren $\phi(u, v)$ und $A(u, v)$ durch

$$\phi(u(x), v(x)) = \varphi(x), \quad A(u(x), v(x)) = a(x), \quad (6.47)$$

und Stationarität bedeutet

$$\phi(u, 0) = \varphi_M \quad (\text{konstant}) \quad (6.48)$$

Für festes u hat $\phi(u, v)$ einen stationären Punkt bei $v = 0$, welcher nicht entartet ist, da

$$\operatorname{rang}(D_v^2 \phi)(u, 0) = \operatorname{rang} \frac{\partial^2 \phi}{\partial v_j \partial v_k}(u, 0) = n - l \quad \forall u. \quad (6.49)$$

Daraus folgt außerdem $\text{sgn } D_v^2 = \text{const.}$ (da kein Eigenwert von $D_v^2\phi$ das Vorzeichen wechseln kann). Wir können also in

$$\begin{aligned} I(\hbar) &= \int_{\mathbb{R}^d} a(x) e^{\frac{i}{\hbar}\varphi(x)} d^d x \\ &= \int_M \int A(u, v) e^{\frac{i}{\hbar}\phi(u, v)} \left| \frac{\partial x(u, v)}{\partial(u, v)} \right| d^{d-l} v d^l u + \mathcal{O}(\hbar^\infty) \end{aligned} \quad (6.50)$$

Satz 6.5 anwenden (im v -Integral) und erhalten:

Satz 6.6. (stationäre Phase mit Familie von stationären Punkten) Sei $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$, $\varphi \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$ reellwertig und so, daß die Menge $M = \{x \in \mathbb{R}^d \mid (\nabla\varphi)(x) = 0\}$ ihrer stationären Punkte eine glatte l -dimensionale Untermannigfaltigkeit des \mathbb{R}^d ist. Dann gilt

$$I(\hbar) = (2\pi\hbar)^{\frac{d-l}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\varphi_M} \int_M A(u, 0) \frac{e^{i\frac{\pi}{4} \text{sgn}(D_v^2\phi)(u, 0)}}{|\det(D_v^2\phi)(u, 0)|^{1/2}} \left| \frac{\partial x(u, v)}{\partial(u, v)} \right| d^l u + \mathcal{O}(\hbar^{\frac{d-l}{2}+1}). \quad (6.51)$$

Bemerkungen:

- Beiträge mehrerer solcher M , isoliert voneinander, müssen addiert werden.
- Familien stationärer Punkte tragen für $\hbar \rightarrow 0$ stärker bei als isolierte stationäre Punkte.

7 WKB-Methode und EBK-Quantisierung

Die WKB-Methode hat ihren Namen von den Arbeiten von Wentzel, Kramers und Brillouin, [35, 36, 37], die kurz nach Entwicklung der Wellenmechanik untersuchten in welchem Sinne sich die alte Quantentheorie nach Bohr und Sommerfeld bzw. die klassische Mechanik aus der Quantenmechanik ableiten lassen. Statt der Bezeichnung WKB findet man auch BKW (v.a. in der französischen Literatur) oder JWKB für die Beiträge Jeffreys' [38]. Als Kurzwellenasymptotik ist die Methode aber bereits viel älter als ihre Anwendung in der Quantenmechanik und beschreibt z.B. auch den Übergang von der Wellenoptik zur geometrischen Optik.

Versucht man, stationäre WKB-Lösungen zu konstruieren, so müssen bestimmte Konsistenzbedingungen erfüllt werden, die die Form korrigierter Bohr-Sommerfeld-Regeln annehmen, vgl. Abschnitt 1. Nach einer Arbeit von Keller [39], die – wie bereits Einsteins Arbeit [8] im Kontext der alten Quantentheorie – eine koordinatenunabhängige Formulierung dieser Regeln erreicht und geometrische Strukturen im klassischen Phasenraum betont, werden die korrigierten Quantisierungsregeln als Einstein-Brillouin-Keller-Quantisierung (EBK) bezeichnet. In ihnen tritt eine topologische Invariante, der Maslov-Index [40, 41, 42] auf.

Darstellungen der WKB-Methode enthalten sowohl viele Quantenmechanik-Bücher als auch Texte über semiklassische oder mikrolokale Analysis. Drei gute Beispiele, in sehr unterschiedlichem Stil, sind (1) das Quantenmechanik-Lehrbuch von Messiah [14, Kapitel 6], in dem die WKB-Methode auf ähnliche Weise behandelt wird, wie in unserer Übungsaufgabe 3, (2) ein Anhang in Arnolds Lehrbuch-Buch über klassische Mechanik [43, Anhang 11], in dem v.a. die geometrischen Aspekte betont werden und (3) das Buch von Lazutkin [44], eine sehr ausführliche Darstellung mit vielen technischen Details. Empfehlenswert sind außerdem die Originalarbeit von Keller [39] und sein Review-Artikel [45] sowie ein Review-Artikel von Duistermaat [46].

7.1 Motivation

Wir möchten approximative Lösungen der Schrödingergleichung im Limes $\hbar \rightarrow 0$ finden. Ebene Wellen

$$\psi_p(x, t) = a e^{\frac{i}{\hbar}px - E(p)t}, \quad a \in \mathbb{C}, \quad p \in \mathbb{R}^d \quad \text{mit} \quad E(p) = \frac{p^2}{2m}, \quad (7.1)$$

sind Lösungen der freien Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \quad (7.2)$$

Dabei löst die Phasenfunktion $S(x, t) = px - E(p)t$ die Hamilton-Jacobi-Gleichung,

$$\frac{(\nabla S)^2}{2m} + \frac{\partial S}{\partial t} = 0, \quad (7.3)$$

für ein freies Teilchen. Für die Schrödingergleichung mit Potential

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right) \psi(x, t) \quad (7.4)$$

macht man lokal einen Ansatz als “ebene Welle”

$$\psi_{\text{WKB}}(x, t) = a_{\hbar}(x, t) u e^{\frac{i}{\hbar}S(x, t)} \quad (7.5)$$

wobei ψ auf viel kleineren Skalen oszilliert als das Potential V , d.h. der schnell (für $\hbar \rightarrow 0$) oszillierende Faktor $e^{\frac{i}{\hbar}S(x, t)}$ sieht lokal ein näherungsweise konstantes Potential, und der Vorfaktor $a_{\hbar}(x, t)$ stellt einen langsam variierenden Vorfaktor dar – man setzt daher weiter an

$$a_{\hbar}(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^n a_n(x, t). \quad (7.6)$$

Wenn wir \hbar -unabhängige Funktionen S und a_n finden, so haben wir eine WKB-Lösung konstruiert.

7.2 Quasimoden

Zunächst ist nicht klar, welche Bedeutung approximative Lösungen der Schrödingergleichung haben. Man kann sich z.B. fragen, ob eine stationäre WKB-Lösung und der zugehörige approximative Eigenwert irgendetwas mit Eigenfunktionen und dem Spektrum des Schrödingeroperators zu tun. Mithilfe des Begriffs der Quasimode lassen sich diese Frage formulieren und präzise Aussagen zeigen. Wir deuten hier nur kurz die einfachsten Fälle an, und verweisen für eine ausführlichere Darstellung z.B. auf [44].

Definition 7.1. (Quasimode) Sei $\varepsilon \geq 0$ und \hat{H} mit Definitionsbereich $D_{\hat{H}}$ selbstadjungiert in einem Hilbertraum \mathcal{H} . Das Paar (ψ, E) mit $\psi \in \mathcal{H}$, $\|\psi\| = 1$, $E \in \mathbb{R}$, ist eine ε -Quasimode falls

$$\|\hat{H}\psi - E\psi\| \leq \varepsilon. \quad (7.7)$$

Bemerkungen:

- Quasimoden mit $\varepsilon = 0$ sind Paare von Eigenwerten und Eigenfunktionen von \hat{H} .
- Manchmal bezeichnen wir auch kurz das ψ aus Definition 7.1 als Quasimode.

Was folgt nun für das Spektrum von \hat{H} ?

Satz 7.2. Sei (E, ψ) eine ε -Quasimode von \hat{H} , und \hat{H} habe kein kontinuierliches Spektrum im Interval $[E - \varepsilon, E + \varepsilon]$. Dann enthält dieses Interval einen Eigenwert von \hat{H} .

BEWEIS: Nimm an $E \notin \text{spec } \hat{H}$. Der Abstand von E zum Spektrum ist gegeben durch $d_E := \|(\hat{H} - E \text{id})^{-1}\|_{\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}}^{-1}$ (Kehrwert der Resolvente in Operatornorm). Schätze ab

$$\begin{aligned} d_E^{-1} &= \|(\hat{H} - E \text{id})^{-1}\|_{\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}} \\ &= \sup_{\phi \neq 0} \frac{\|(\hat{H} - E \text{id})^{-1}\phi\|}{\|\phi\|} \\ &\geq \frac{\|((\hat{H} - E \text{id})^{-1}\phi')\|}{\|\phi'\|} \end{aligned} \quad (7.8)$$

für irgendein $\phi' \in \mathcal{H}$. Wähle $\phi' = (\hat{H} - E \text{id})\psi$, dann gilt

$$d_E^{-1} \geq \frac{\|\psi\|}{\|(\hat{H} - E \text{id})\psi\|} \geq \frac{1}{\varepsilon}, \quad (7.9)$$

d.h. $d_E \leq \varepsilon$. □

Man weiß also dann, daß die Energie E einer ε -Quasimode (E, ψ) in der Nähe eines Eigenwerts liegt. Über das Verhältnis von ψ und der zugehörigen Eigenfunktion weiß man zunächst nichts. Man kann aber zeigen, daß – falls \hat{H} im Interval $[E - \delta, E + \delta]$ genau einen Eigenwert mit Eigenfunktion ϕ hat – gilt

$$\|\psi - e^{i\alpha}\phi\| \leq 2\frac{\varepsilon}{\delta} \quad (7.10)$$

für ein $\alpha \in \mathbb{R}$, siehe z.B. [44, §32].

7.3 WKB-Ansatz

In Übungsaufgabe 3 haben wir in einer Dimension gesehen, welche Terme sich ergeben, wenn man $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ auf ψ_{WKB} anwendet. Das Ergebnis überträgt sich direkt auf mehrere Dimensionen. Wir wollen nun die Anwendung eines Weyl-Operators mit Symbol $H \in S_{\text{cl}}(m)$, d.h.

$$H(p, x) \sim \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^j H_j(p, x), \quad H_j \in S(m), \quad (7.11)$$

auf ψ_{WKB} betrachten.

Lemma 7.3. Sei \hat{H} ein Weyl-Operator mit klassischem Symbol $H \in S_{\text{cl}}(m)$ und ψ_{WKB} eine WKB-Wellenfunktion,

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = a_{\hbar}(x) e^{\frac{i}{\hbar} S(x)}, \quad a_{\hbar}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^k a_k(x) \quad (7.12)$$

mit $S, a_k \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$. Dann gilt

$$\begin{aligned} (\hat{H}\psi_{\text{WKB}})(x) = & \left\{ H_0(\nabla_x S(x), x) a_0(x) + \frac{\hbar}{i} \left[H_0(\nabla_x S(x), x) a_1(x) \right. \right. \\ & + (\nabla_p H_0)(\nabla_x S(x), x) (\nabla_x a_0)(x) + \frac{1}{2} \nabla_x [(\nabla_p H_0)(\nabla_x S(x), x)] a_0(x) \\ & \left. \left. + i H_1(\nabla_x S(x), x) a_0(x) \right] + \mathcal{O}(\hbar^2) \right\} e^{\frac{i}{\hbar} S(x)}. \end{aligned} \quad (7.13)$$

BEWEIS:

$$(\hat{H}\psi_{\text{WKB}})(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} H\left(p, \frac{x+y}{2}\right) e^{\frac{i}{\hbar} p(x-y)} a_{\hbar}(y) e^{\frac{i}{\hbar} S(y)} d^d p d^d y \quad (7.14)$$

Entwickle die Phase um $y = x$:

$$S(y) = S(x) + (\nabla_x S)(x)(y-x) + R(y) \quad (7.15)$$

mit

$$R(y) := S(y) - S(x) + (\nabla_x S)(x)(y-x) \quad (7.16)$$

d.h. für R gilt

$$R(x) = 0, \quad (\nabla_y R)(x) = 0, \quad \frac{\partial^2 R}{\partial y_j \partial y_k}(y) = \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k}(y). \quad (7.17)$$

Damit erhalten wir

$$e^{-\frac{i}{\hbar} S(x)} (\hat{H}\psi_{\text{WKB}})(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} H\left(p, \frac{x+y}{2}\right) a_{\hbar}(y) e^{\frac{i}{\hbar} (p - \nabla_x S(x))(x-y) + \frac{i}{\hbar} R(y)} d^d p d^d y \quad (7.18)$$

Entwickle nun $H\left(p, \frac{x+y}{2}\right) a_{\hbar}(y) e^{\frac{i}{\hbar}R(y)}$ um $y = x$,

$$H\left(p, \frac{x+y}{2}\right) a_{\hbar}(y) e^{\frac{i}{\hbar}R(y)} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{[(y-x)\nabla_z]^\nu}{\nu!} \left(H\left(p, \frac{x+z}{2}\right) a_{\hbar}(z) e^{\frac{i}{\hbar}R(z)} \right) \Big|_{z=x}. \quad (7.19)$$

Wir verwenden

$$(y-x) e^{\frac{i}{\hbar}p(x-y)} = -\frac{\hbar}{i} \nabla_p e^{\frac{i}{\hbar}p(x-y)} \quad (7.20)$$

und integrieren ν mal partiell,

$$e^{-\frac{i}{\hbar}S(x)} (\hat{H}\psi_{\text{WKB}})(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{\frac{i}{\hbar}(p-\nabla_x S(x))(x-y)} \cdot \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} \left[\frac{\hbar}{i} \nabla_p \nabla_y \right]^\nu \left(H\left(p, \frac{x+y}{2}\right) a_{\hbar}(y) e^{\frac{i}{\hbar}R(y)} \right) \right]_{y=x} d^d p d^d y. \quad (7.21)$$

Das y -Integral ergibt $\delta(p - \nabla_x S(x))$, und wir können das p -Integral ausführen,

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar}S(x)} (\hat{H}\psi_{\text{WKB}})(x) &= \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} \left[\frac{\hbar}{i} \nabla_p \nabla_y \right]^\nu \left(H\left(p, \frac{x+y}{2}\right) a_{\hbar}(y) e^{\frac{i}{\hbar}R(y)} \right) \right]_{\substack{y=x \\ p=\nabla_x S(x)}} \\ &= \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} \left[\frac{\hbar}{i} \nabla_p \nabla_y \right]^\nu \left(\frac{\hbar}{i} \right)^{j+k} \left(i^j H_j\left(p, \frac{x+y}{2}\right) a_k(y) e^{\frac{i}{\hbar}R(y)} \right) \right]_{\substack{y=x \\ p=\nabla_x S(x)}} \end{aligned} \quad (7.22)$$

wobei wir im letzten Schritt die asymptotischen Reihen für H und a_{\hbar} eingesetzt haben. Nun sammeln wir alle Terme der Ordnungen \hbar^0 und \hbar^1 . In führender Ordnung treten nur H_0 und a_0 auf, und alle ∇_y wirken auf $e^{\frac{i}{\hbar}R(y)}$. Unter Beachtung der Eigenschaften (7.17) bleibt nur

$$\hbar^0 : H_0(\nabla_x S(x), x) a_0(x). \quad (7.23)$$

In nächster Ordnung treten auch H_1 und a_1 auf,

$$\frac{\hbar}{i} : H_0(\nabla_x S(x), x) a_1(x) + iH_1(\nabla_x S(x), x) a_0(x) + \dots \quad (7.24)$$

sowie Terme, in denen ∇_y einmal auf a_{\hbar} , H oder $\nabla_y R$ wirkt,

$$\begin{aligned} &\dots + (\nabla_p H_0)(\nabla_x S(x), x) (\nabla_x a_0)(x) \\ &+ \frac{1}{2} (\nabla_p \nabla_x H_0)(\nabla_x S(x), x) a_0(x) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 H_0}{\partial p_j \partial p_k} \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k}(x) a_0(x), \end{aligned} \quad (7.25)$$

$$\underbrace{\hspace{15em}}_{=\frac{1}{2} \nabla_x [(\nabla_p H_0)(\nabla_x S(x), x)] a_0(x)}$$

wobei die ersten beiden Terme von $\nu = 1$ stammen und der dritte von $\nu = 2$. \square

Wir stellen außerdem fest, daß jeder Term, der $a_N(x)$ enthält, mindestens von der Ordnung $\mathcal{O}(\hbar^N)$ ist (bzw. $\mathcal{O}(\hbar^{N+n})$ für ein $n \geq 0$). Analog ist jeder Term der $(\partial_x^\alpha a_N)(x)$ enthält (mit einem Multiindex $\alpha \in \mathbb{N}_0^d$), von der Ordnung $\mathcal{O}(\hbar^{N+|\alpha|+n})$ für ein $n \geq 0$. Wir nutzen diese Beobachtung zum Beweis der folgenden Aussage:

Korollar zu Lemma 7.3. *Macht man für die Lösung der Schrödingergleichung,*

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = (\hat{H}\psi)(x, t) \quad (7.26)$$

mit Anfangsbedingung $\psi(x, 0) = \sum_{k=0}^{\infty} (-i\hbar)^k a_k(x, 0) e^{\frac{i}{\hbar}S(x,0)}$ einen WKB-Ansatz

$$\psi_{\text{WKB}}(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^k a_k(x, t) e^{\frac{i}{\hbar}S(x,t)}, \quad (7.27)$$

so erhält man durch Vergleich der Koeffizienten von \hbar^n , $n = 0, 1, 2, \dots$, ein rekursives Cauchy-Problem für die Funktionen S, a_0, a_1, \dots

BEWEIS: Zunächst stellen wir fest, daß

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi_{\text{WKB}}}{\partial t}(x, t) &= \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^k \left(i\hbar \frac{\partial a_k}{\partial t}(x, t) - a_k(x, t) \frac{\partial S}{\partial t}(x, t) \right) e^{\frac{i}{\hbar}S(x,t)} \\ &= \left[-\frac{\partial S}{\partial t}(x, t) a_0(x, t) - \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^k \left(\frac{\partial S}{\partial t}(x, t) a_k(x, t) + \frac{\partial a_{k-1}}{\partial t}(x, t) \right) \right] e^{\frac{i}{\hbar}S(x,t)}. \end{aligned} \quad (7.28)$$

Durch Vergleich mit (7.22) erhalten wir also aus der Schrödingergleichung in führender Ordnung (\hbar^0) die Gleichung

$$\left[H_0(\nabla_x S(x, t), x) + \frac{\partial S}{\partial t}(x, t) \right] a_0(x, t) = 0, \quad (7.29)$$

d.h. für nichttriviales a_0 muß die Phase S die klassische Hamilton-Jacobi-Gleichung, mit dem Hauptsymbol von \hat{H} als Hamiltonfunktion, erfüllen. In Ordnung \hbar^k finden wir Gleichungen der Form

$$\begin{aligned} &\left[H_0(\nabla_x S(x, t), x) + \frac{\partial S}{\partial t}(x, t) \right] a_k(x, t) \\ &+ \frac{\partial a_{k-1}}{\partial t}(x, t) + (\nabla_p H_0)(\nabla_x S(x, t), x) (\nabla_x a_{k-1})(x, t) + \dots = 0, \end{aligned} \quad (7.30)$$

wobei “...” a_{k-1} , S und Ableitungen von S sowie a_{k-l} , $l \geq 2$, und Ableitungen von a_{k-l} enthält. Da S laut der \hbar^0 -Gleichung die Hamilton-Jacobi-Gleichung erfüllt, fällt a_k aus der Gleichung der Ordnung \hbar^k heraus, und letztere wird zur Bestimmungsgleichung für a_{k-1} . \square

7.4 Lösung der Hamilton-Jacobi-Gleichung: Lagrange-Untermannigfaltigkeiten

Wir untersuchen die Schrödingergleichung mit Anfangsbedingung

$$\psi(x, 0) = A_0(x) e^{\frac{i}{\hbar} S_0(x)}, \quad A_0 \in \mathbb{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d). \quad (7.31)$$

Für die Lösung machen wir einen WKB-Ansatz, $\psi_{\text{WKB}}(x, t) = a_\hbar(x, t) e^{\frac{i}{\hbar} S(x, t)}$, mit

$$S(x, 0) = S_0(x), \quad a_0(x, 0) = A_0(x), \quad a_k(x, 0) = 0 \quad \forall k \geq 1. \quad (7.32)$$

Definition 7.4. (Lagrange-Untermannigfaltigkeit) Eine Untermannigfaltigkeit Λ des Phasenraums, $\Lambda \subset \mathbb{R}^{2d}$ heißt Lagrange-Untermannigfaltigkeit falls (i) $\dim \Lambda = d$ und (ii) die symplektische 2-Form auf Λ identisch verschwindet.

Lemma 7.5. Sei $S(x) \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$, dann ist

$$\Lambda_S := \{(p, x) \in \mathbb{R}^d \mid p = \nabla_x S(x)\} \quad (7.33)$$

eine Lagrange-Untermannigfaltigkeit. Umgekehrt kann jede glatte Lagrange-Untermannigfaltigkeit, die sich diffeomorph auf den Konfigurationsraum projizieren läßt (d.h. sie ist der Graph einer Funktion), durch eine Funktion S wie oben erzeugt werden.

BEWEIS: (i) $\dim \Lambda_S = d$ trivial erfüllt, da so parametrisiert.

(ii) symplektische 2-Form

$$\begin{aligned} dp_j \wedge dx_j &= d \frac{\partial S}{\partial x_j}(x) \wedge dx_j \\ &= \underbrace{\frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k}(x)}_{\text{symmetrisch}} \underbrace{dx_k \wedge dx_j}_{\text{anti-symmetrisch unter } j \leftrightarrow k} = 0 \end{aligned} \quad (7.34)$$

□

Wir können also dem Anfangszustand $\psi(x, 0)$ die Lagrange-Untermannigfaltigkeit Λ_{S_0} zuordnen. Weiter wissen wir, daß $\psi(x, t)$ eine Phase $S(x, t)$ hat, die sich durch Lösung der Hamilton-Jacobi-Gleichung,

$$H_0(\nabla_x S(x, t), x) + \frac{\partial S}{\partial t}(x, t) = 0 \quad (7.35)$$

ergibt. Daher können wir $\psi(x, t)$ die Lagrange-Untermannigfaltigkeit

$$\Lambda_S(t) := \left\{ (p, x) \in \mathbb{R}^d \mid p = \nabla_x S(x, t), H_0(\nabla_x S(x, t), x) + \frac{\partial S}{\partial t}(x, t) = 0, S(x, 0) = S_0(x) \right\} \quad (7.36)$$

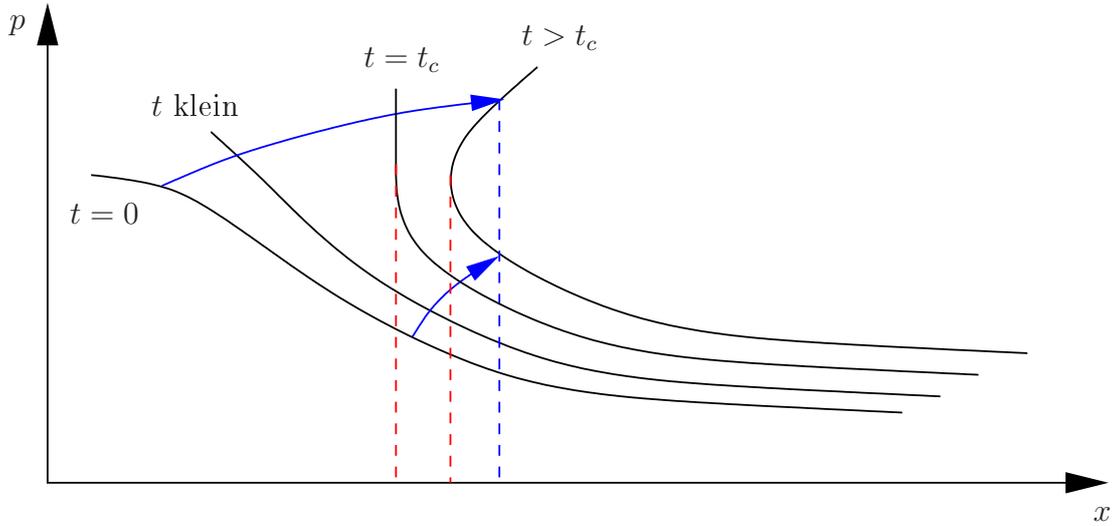


Abbildung 9: Zeitentwicklung der Lagrange-Untermannigfaltigkeit $\Lambda_S(t)$ (schwarz). Punkte auf Λ_{S_0} bewegen sich entlang klassischer Trajektorien (blau). Zur Zeit t_c tritt erstmals eine senkrechte Tangente auf (rot), und für Zeiten $t > t_c$ liegt eine Kaustik vor (rot). Es gibt dann zwei Trajektorien, die beide auf Λ_{S_0} starten und zur Zeit t am selben Ort x ankommen (blau).

zuordnen. Es gilt offensichtlich $\Lambda_S(0) = \Lambda_{S_0}$.

Für kleine Zeiten t hat die Hamilton-Jacobi-Gleichung eine eindeutige Lösung, und für die Lagrange-Untermannigfaltigkeit gilt der folgende Satz, der uns außerdem bereits andeutet, wie wir für größere Zeiten vorgehen müssen.

Satz 7.6. Für die oben definierte Lagrange-Untermannigfaltigkeit $\Lambda_S(t)$ gilt (für hinreichend kleine Zeiten t)

$$\Lambda_S(t) = \{ \phi_{H_0}^t(p, x) \in \mathbb{R}^{2d} \mid (p, x) \in \Lambda_S(0) \} . \quad (7.37)$$

BEWEIS: Sei $x(t)$ die Lösung von

$$\dot{x}(t) = (\nabla_p H)(\nabla_x S(x(t), t), x(t)) \quad \text{mit } x(0) = x . \quad (7.38)$$

Weiter sei $p(t) := \nabla_x S(x(t), t)$. Damit gilt

$$(p(0), x(0)) = (\nabla_x S_0(x), x) \in \Lambda_S(0) \quad (7.39)$$

und auch $(p(t), x(t)) \in \Lambda_S(t)$. Zu zeigen ist nun

$$(p(t), x(t)) = \phi_0^t(\nabla_x S_0(x), x) \quad (\text{z.Z.}) . \quad (7.40)$$

Berechne die Zeitableitung von $p(t)$,

$$\dot{p}_j(t) = \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k}(x(t), t) \dot{x}_k(t) + \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial t}(x(t), t) . \quad (7.41)$$

Aus der Hamilton-Jacobi-Gleichung folgt durch Ableiten nach x_j

$$\frac{\partial H_0}{\partial p_k}(\nabla_x S(x, t), x) \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k}(x, t) + \frac{\partial H_0}{\partial x_j}(\nabla_x S(x, t), x) + \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial t}(x, t) = 0. \quad (7.42)$$

Auswerten an der Stelle $x = x(t)$ ergibt

$$\underbrace{\frac{\partial H_0}{\partial p_k}(\nabla_x S(x(t), t), x(t))}_{=\dot{x}_k(t)} \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k}(x(t), t) + \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial t}(x(t), t) = -\frac{\partial H_0}{\partial x_j}(\nabla_x S(x(t), t), x(t)), \quad (7.43)$$

und durch Einsetzen in $\dot{p}_j(t)$ folgt

$$\dot{p}(t) = -(\nabla_p H_0)(\underbrace{\nabla_x S(x(t), t)}_{=p(t)}, x(t)). \quad (7.44)$$

Die Gleichungen (7.38), (7.44) und (7.39) implizieren gemeinsam das gewünschte Ergebnis $(p(t), x(t)) = \phi_0^t(\nabla_x S_0(x), x)$. \square

Bemerkungen:

- Für kleine Zeiten läßt sich $\Lambda_S(t)$ in der Form von Lemma 7.5 darstellen. Im allgemeinen wird aber zu einer Zeit t_c erstmals ein Eigenwert von $\frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k}$ divergieren. Für $t > t_c$ hat die Hamilton-Jacobi-Gleichung keine eindeutige Lösung mehr. Wir können aber $\Lambda_S(t)$ durch eine mehrwertige Funktion erzeugen, d.h. S hat nun mehrere Zweige, wie in Abb. 9 skizziert. Entsprechend ist die Wellenfunktion dann eine Linearkombination von WKB-Funktionen, die mit den unterschiedlichen Zweigen von S assoziiert sind. Die Menge der Punkte x , an denen sich die Anzahl der Zweige von S ändert, nennt man **Kaustik**.
- Wenn wir später stationäre WKB-Lösungen suchen, benötigen wir Lagrange-Untermannigfaltigkeiten, die invariant unter dem Hamiltonschen Fluß $\phi_{H_0}^t$ sind.

Wie findet man nun die Funktion $S(x, t)$?

Lemma 7.7. Sei $S(x, t)$ eine Lösung der Hamilton-Jacobi-Gleichung (7.35) mit Anfangsdaten $S(x, 0) = S_0(x)$. Weiter sei $(p(t), x(t)) = \phi_{H_0}^t(\nabla_x S(x, 0), x)$, dann gilt

$$\frac{d}{dt} S(x(t), t) = p(t)\dot{x}(t) - H(p(t), x(t)). \quad (7.45)$$

Bemerkungen:

- $p(t)\dot{x}(t) - H(p(t), x(t)) = L(x(t), \dot{x}(t))$ mit der Lagrangfunktion $L(x, \dot{x})$.
- $H(p(t), x(t)) = H(p(0), x(0)) = E$ mit der Energie E der Trajektorie.

BEWEIS: Wir differenzieren,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}S(x(t), t) &= \frac{\partial S}{\partial t}(x(t), t) + \nabla_x S(x(t), t) \dot{x}(t) \\ &= -H(\nabla_x S(x(t), t), x(t)) + \nabla_x S(x(t), t) \dot{x}(t) \\ &= -H(p(t), x(t)) + p(t)\dot{x}(t), \end{aligned} \quad (7.46)$$

wobei wir zunächst die Hamilton-Jacobi-Gleichung (7.35) und dann Satz 7.6, d.h. $p(t) = \nabla_x S(x(t), t)$, verwendet haben. \square

Damit können wir nun $S(x, t)$ direkt integrieren,

$$\begin{aligned} S(x(t), t) &= S_0(x(0)) + \int_0^t [p(t')\dot{x}(t') - H(p(t'), x(t'))] dt' \\ &= S_0(x(0)) + \int_{x(0)}^{x(t)} p dx - Et, \end{aligned} \quad (7.47)$$

wobei das verbleibende Integral entlang der Trajektorie $\{(p(t'), x(t')), 0 \leq t' \leq t\}$ auszuführen ist. Dabei bezeichnet E die Energie, die, für eine zeitunabhängige Hamiltonfunktion, entlang der Bahn erhalten ist.

Bemerkungen:

- Wir hätten die Energie E auch schon früher separieren können – Schrödinger (multiplikativ), Hamilton-Jacobi (additiv) – da autonomes System.
- Für die beiden Trajektorien in Abb. 9 wird die Energie i.A. unterschiedlich sein – man schreibt evt. besser $E = H(p(0), x(0))$.
- Für zeitabhängiges H_0 geht aber auch alles durch, dann ist $S(x(t), t) = S_0(x(0)) + \int_0^t L(x(t'), \dot{x}(t')) dt'$.
- Uns fehlt noch die relative Phase zwischen den Lösungen, die zu verschiedenen Zweigen von S gehören.

7.5 Crash-Kurs in Hamilton-Jacobi-Theorie

Wir geben hier nur einen kurzen Abriss mit den wichtigsten Formeln ohne Beweise. Details findet man in Lehbüchern über klassische Mechanik, wie z.B. [47] oder auch Gutzwillers Buch über Chaos und Quantenchaos [48].

Wir betrachten im Folgenden stets Trajektorien, die in Zeit t den Anfangspunkt (ξ, y) und den Endpunkt (p, x) verbinden,

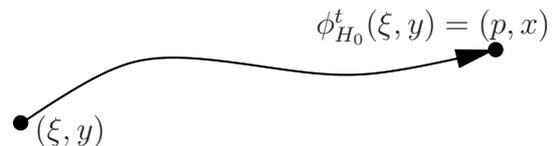


Abbildung 10: Trajektorie (im Phasenraum) von (ξ, y) nach (p, x) .

d.h. $\phi_{H_0}^t(\xi, y) = (p, x)$, vergleiche Abbildung 10. Diese Lösungen bezeichnen wir für einen Moment mit $P(t'; \xi, y, t), X(t', \xi, y, t), 0 \leq t' \leq t$ d.h.

$$P(0; \xi, y, t) = \xi, \quad P(t; \xi, y, t) = p, \quad (7.48)$$

$$X(0; \xi, y, t) = y, \quad X(t; \xi, y, t) = x. \quad (7.49)$$

Nun wechseln wir die Perspektive und betrachten anstatt eines Anfangswertproblems ein Variationsproblem: Wir geben uns z.B. x und y vor und suchen eine Lösung der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen, die diese beiden Orte (im Konfigurationsraum!) in Zeit t verbindet. Dazu lösen wir die erste Gleichung von (7.49) nach ξ auf, d.h. wir beschaffen uns eine Funktion $\xi(x, y, t)$. Dies ist nur dann möglich, wenn $\det \frac{\partial X_j}{\partial \xi_k} \neq 0$. Falls hingegen $\det \frac{\partial X_j}{\partial \xi_k} = 0$, so nennt man die Orte y und x zueinander konjugiert. Es gibt dann mehrere Bahnen, die die Orte y und x (im Konfigurationsraum!) in Zeit t verbinden – man spricht von **konjugierten Punkten**, siehe Abb. 11.

Sei nun $(P(t'; x, y, t), X(t'; x, y, t)), 0 \leq t' \leq t$ (Vorsicht: Andere Notation als oben!) eine Lösung der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen mit $X(0) = y$ und $X(t) = x$, d.h. wir geben uns einen Anfangsort y und einen Endort x vor und suchen eine Lösung der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen, die diese in der Zeit t verbindet.

Man nennt

$$R(x, y, t) = \int_0^t L(X(t'; x, y, t), \dot{X}(t'; x, y, t)) dt' \quad (7.50)$$

mit der Lagrangefunktion L , die Hamiltonsche Prinzipalfunktion. R ist eine erzeugende Funktion für eine kanonische Transformation von (p, x) auf (ξ, y) ,

$$p = \nabla_x R(x, y, t), \quad \xi = -\nabla_y R(x, y, t), \quad (7.51)$$

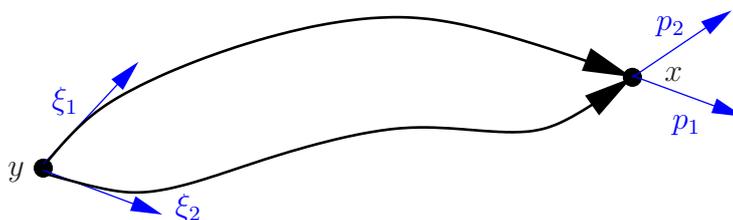


Abbildung 11: Zwei unterschiedliche Bahnen führen in der Zeit t von y nach x (im Konfigurationsraum!) – die Punkte sind zueinander konjugiert.

denn

$$\begin{aligned}
\frac{\partial R}{\partial x_j}(x, y, t) &= \int_0^t \left[\underbrace{\frac{\partial L}{\partial X_k}(X(t'; x, y, t), \dot{X}(t'; x, y, t))}_{=\frac{d}{dt'} \frac{\partial L}{\partial \dot{X}_k} \text{ (Euler-Lagrange)}} \frac{\partial X_k}{\partial x_j}(t'; x, y, t) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\partial L}{\partial \dot{X}_k}(X(t'; x, y, t), \dot{X}(t'; x, y, t)) \underbrace{\frac{\partial \dot{X}_k}{\partial x_j}(t'; x, y, t)}_{=\frac{d}{dt'} \frac{\partial X_k}{\partial x_j}} \right] dt' \\
&= \int_0^t \frac{d}{dt'} \left[\underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{X}_k}(X(t'; x, y, t), \dot{X}(t'; x, y, t))}_{=P_k(t'; x, y, t) \text{ (kanonisch konjugierter Impuls)}} \frac{\partial X_k}{\partial x_j}(t'; x, y, t) \right] dt' \\
&= \left[P(t'; x, y, t) \frac{\partial X_k}{\partial x_j}(t'; x, y, t) \right]_0^t = p_k \cdot \delta_{kj} - \xi_k \cdot 0 = p_j
\end{aligned} \tag{7.52}$$

und analog

$$\frac{\partial R}{\partial y_j}(x, y, t) = \dots = p_k \cdot 0 - \xi_k \cdot \delta_{kj} = -\xi_j \tag{7.53}$$

Mit einer Legendre-Transformation erhalten wir

$$\begin{aligned}
S(x, \xi, t) &= R(x, y, t) - y \nabla_y R(x, y, t) \\
&= R(x, y, t) + y \xi,
\end{aligned} \tag{7.54}$$

wobei y überall als Funktion von (x, ξ, t) ausgedrückt werden muß. Eine einfache Rechnung zeigt dann⁵

$$p = \nabla_x S(x, \xi, t), \quad y = \nabla_\xi S(x, \xi, t). \tag{7.55}$$

Damit ist $S(x, \xi, t)$ also unsere in Abschnitt 7.4 gefundene Lösung der Hamilton-Jacobi-Gleichung mit Anfangsbedingung $S(x, \xi, 0) = S_0(x) = \xi x$.

Weitere Legendre-Transformationen liefern

$$\begin{aligned}
W(p, \xi, t) &= S(x, \xi, t) - x \nabla_x S(x, \xi, t) \\
&= S(x, \xi, t) - p x
\end{aligned} \tag{7.56}$$

mit

$$x = -\nabla_p W(p, \xi, t), \quad y = \nabla_\xi W(x, \xi, t) \tag{7.57}$$

⁵ $\nabla_x S = \nabla_x R = p$ und

$$\frac{\partial S(x, \xi, t)}{\partial \xi_j} = \frac{\partial}{\partial y_j} [R(x, y(x, \xi, t), t) + y(x, \xi, t) \xi] = \underbrace{\frac{\partial R}{\partial y_k} \frac{\partial y_k}{\partial \xi_j}}_{=-\xi_k} + \frac{\partial y_k}{\partial \xi_j} \xi_k + y_j = y_j$$

sowie

$$\begin{aligned} G(p, y, t) &= W(p, \xi, t) - \xi \nabla_{\xi} W(p, \xi, t) \\ &= W(p, \xi, t) - \xi y \end{aligned} \quad (7.58)$$

mit

$$x = -\nabla_p G(p, y, t), \quad y = -\nabla_y G(p, y, t). \quad (7.59)$$

Die Erzeugenden S und R (F_2 und F_1 nach Goldsteins [47] Nomenklatur) erfüllen die Hamilton-Jacobi-Gleichung. Dagegen löst W (F_4 nach [47]) die Gleichung

$$H(p, -\nabla_p W(p, \xi, t)) + \frac{\partial W}{\partial t}(p, \xi, t) = 0, \quad (7.60)$$

und ebenso G (F_3 nach [47]). Die Graphen von $\nabla_x R$, $\nabla_x S$, $-\nabla_p W$ und $-\nabla_p G$ sind Lagrange-Untermannigfaltigkeiten, die sich gemäß Satz 7.6 in der Zeit entwickeln.

7.6 Lösung der Transportgleichung für a_0

Wir untersuchen weiter die Schrödingergleichung mit Anfangsbedingung

$$\psi(x, 0) = A_0(x) e^{\frac{i}{\hbar} S_0(x)}, \quad A_0 \in \mathbb{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d). \quad (7.61)$$

Für die Lösung machen wir einen WKB-Ansatz, $\psi_{\text{WKB}}(x, t) = a_{\hbar}(x, t) e^{\frac{i}{\hbar} S(x, t)}$, mit

$$S(x, 0) = S_0(x), \quad a_0(x, 0) = A_0(x), \quad a_k(x, 0) = 0 \quad \forall k \geq 1. \quad (7.62)$$

Zunächst betrachten wir die spezielle Anfangsbedingung $S_0(x) = \xi x$ und zeigen die Abhängigkeit von ξ explizit an, indem wir anstatt $S(x, t)$ und $a_k(x, t)$ nun $S(x, \xi, t)$ und $a_k(x, \xi, t)$ schreiben. Mithilfe von Satz 7.3 erhalten wir für den führenden Term a_0 der Amplitude die Transportgleichung

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial a_0}{\partial t}(x, \xi, t) + (\nabla_p H_0)(\nabla_x S(x, \xi, t), x) (\nabla_x a_0)(x, \xi, t) \\ &\quad + \frac{1}{2} \nabla_x [(\nabla_p H_0)(\nabla_x S(x, \xi, t), x)] a_0(x, \xi, t) + i H_1(\nabla_x S(x, \xi, t), x) a_0(x, \xi, t) \end{aligned} \quad (7.63)$$

Wir betrachten diese Gleichung zunächst entlang von Lösungen der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen, d.h. $x \mapsto x(t)$. Damit wird

$$\frac{\partial a_0}{\partial t}(x(t), \xi, t) + (\nabla_p H_0)(\nabla_x S(x(t), \xi, t), x(t)) (\nabla_x a_0)(x(t), \xi, t) = \frac{d}{dt} a_0(x(t), \xi, t) \quad (7.64)$$

eine Ableitung entlang der Flußlinien von $\phi_{H_0}^t$.

Wir lösen zunächst die Transportgleichung für $H_1 \equiv 0$,

$$\frac{d}{dt}a_0(x(t), \xi, t) + \frac{1}{2}\nabla_x [(\nabla_p H_0)(\nabla_x S(x(t), \xi, t), x(t))] a_0(x(t), \xi, t) = 0, \quad (7.65)$$

die Lösung für beliebiges Subhauptsymbol H_1 erhält man dann durch Multiplikation mit $\exp(-i \int_0^t H_1(\nabla_x S(x(t'), t'), x(t')) dt')$. Der Übersichtlichkeit halber betrachten wir hier und im weiteren Verlauf den Fall $H_1 \equiv 0$.

Lemma 7.8. *Sei $S(x, \xi, t)$ Lösung der Hamilton-Jacobi-Gleichung, $H_0(\nabla_x S, x) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$, dann gilt*

$$\frac{\partial^2 H_0}{\partial p_j \partial p_k} \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 H_0}{\partial p_j \partial x_j} = -\frac{d}{dt} \log \det \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_k}. \quad (7.66)$$

(Wir unterdrücken hier alle Argumente, d.h. $H_0 = H_0(\nabla_x S, x)$, $S = S(x(t), \xi, t)$)

BEWEIS: Durch Ausrechnen findet man⁶

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dt} \log \det \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_k} &= -\frac{d}{dt} \operatorname{tr} \log \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_k} \\ &= -\frac{d}{dt} \log \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_j} \\ &= -\left(\frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_k} \right)^{-1} \left[\frac{\partial^3 S}{\partial x_k \partial \xi_j \partial x_l} x_l + \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial \xi_j} (-H_0) \right] \\ &= -\left(\frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_k} \right)^{-1} \left[\frac{\partial^3 S}{\partial x_k \partial \xi_j \partial x_l} \frac{\partial H_0}{\partial p_l} - \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial H_0}{\partial p_l} \frac{\partial^2 S}{\partial x_l \partial \xi_j} \right) \right] \\ &= -\underbrace{\left(\frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_k} \right)^{-1} \left[-\frac{\partial^2 S}{\partial x_l \partial \xi_j} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial H_0}{\partial p_l} \right) \right]}_{=\delta_{kl}} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial H_0}{\partial p_k} \right) \\ &= \frac{\partial^2 H_0}{\partial p_j \partial p_k} \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 H_0}{\partial p_k \partial x_k}, \end{aligned} \quad (7.67)$$

wobei in der 3. Zeile die Hamilton-Jacobi-Gleichung und in der 4. Zeile die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen verwendet wurden. \square

Mithilfe von Lemma 7.8 erhalten wir sofort

$$a(x(t), \xi, t) = A_0(x(0)) \sqrt{\det \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_k}(x(t), \xi, t)}, \quad (7.68)$$

⁶Hier und im Folgenden schreiben wir stets kurz $\frac{\partial a_j}{\partial b_k}$ für die Matrix mit den Einträgen $\frac{\partial a_j}{\partial b_k}$; bis hier kann man das als Indeschreibweise mit Summenkonvention verstehen – darüberhinaus steht aber auch $\left(\frac{\partial a_j}{\partial b_k} \right)^{-1}$ für die Inverse der Matrix $\frac{\partial a_j}{\partial b_k}$.

Tatsächlich ist auch die Lösung der ursprünglichen Transportgleichung (7.63) – mit $H_1 = 0$, jedoch ohne explizite Auswertung auf einer Trajektorie – von dieser Form,

$$a(x, \xi, t) = A_0(y(x, \xi, t)) \sqrt{\det \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_k}(x, \xi, t)}. \quad (7.69)$$

wie man durch einsetzen feststellt. Dabei ist $y(x, \xi, t) = \nabla_\xi S(x, \xi, t)$ der Anfangsort der Trajektorie, die in der Zeit t mit Anfangsimpuls ξ zu x führt. Wir überzeugen uns daß der Vorfaktor $A_0(y(x, \xi, t))$ tatsächlich eine Konstante bezüglich des Differentialoperators $\frac{\partial}{\partial t} + (\nabla_x H_0)(\nabla_x S(x, \xi, t))\nabla_x$ ist,

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + (\nabla_x H_0)(\nabla_x S(x, \xi, t))\nabla_x \right] A_0(y(x, \xi, t)) = \left[\frac{\partial A_0}{\partial y_j} \frac{\partial y_j}{\partial t} + \frac{\partial H_0}{\partial p_k} \frac{\partial A_0}{\partial y_j} \frac{\partial y_j}{\partial x_k} \right] \quad (7.70)$$

wobei

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_j}{\partial t} &= \frac{\partial^2 S}{\partial \xi_j \partial t} = -\frac{\partial}{\partial \xi_j} H_0(\nabla_x S(x, \xi, t), x) = -\frac{\partial H_0}{\partial p_k} \frac{\partial^2 S}{\partial x_k \partial \xi_j} \\ \text{und} \quad \frac{\partial y_j}{\partial x_k} &= \frac{\partial^2 S}{\partial x_k \partial \xi_j}, \end{aligned} \quad (7.71)$$

d.h.

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + (\nabla_x H_0)(\nabla_x S(x, \xi, t))\nabla_x \right] A_0(y(x, \xi, t)) = \frac{\partial A_0}{\partial y_j} \left[-\frac{\partial H_0}{\partial p_k} + \frac{\partial H_0}{\partial p_k} \right] \frac{\partial^2 S}{\partial x_k \partial \xi_j} = 0 \quad (7.72)$$

Als Wurzel der Jacobi-Determinante für eine Koordinatentransformation von x nach y garantiert der $\sqrt{\det}$ -Faktor die Wahrscheinlichkeitserhaltung, denn

$$\begin{aligned} \int_G |\psi_{\text{WKB}}(x, t)|^2 d^d x &\sim \int_G |a_0(x, \xi, t)|^2 d^d x = \int_G |A_0(y(x, \xi, t))|^2 \underbrace{\left| \det \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_k}(x, \xi, t) \right|}_{\left| \det \frac{\partial y_k}{\partial x_j}(x, \xi, t) \right|^2} d^d x \\ &= \int_{G'} |A_0(y)|^2 d^d y \\ &\sim \int_{G'} |\psi_{\text{WKB}}(y, 0)|^2 d^d y \end{aligned} \quad (7.73)$$

mit $G \subset \mathbb{R}^2$ und $G' = \{y \in \mathbb{R}^d \mid x \in G \text{ wobei } \phi_{H_0}^t(\xi, y) = (p, x)\}$.

Zuletzt können wir noch die Einschränkung auf die spezielle Anfrangsbedingung $S_0(x) = \xi x$ fallenlassen, und wieder beliebige Anfangsbedingungen $S_0(x)$ (die zu Lagrange-Untermannigfaltigkeiten ohne Kaustiken führen) zulassen. Der Anfangsimpuls ξ ist dann für jedes x unterschiedlich und durch den Wert $\xi = \nabla_y S_0(y)$ gegeben, wobei $(\xi, y) \in \Lambda_S(0)$ mit $\phi_{H_0}^t(\xi, y) = (\nabla_x S, x)$.

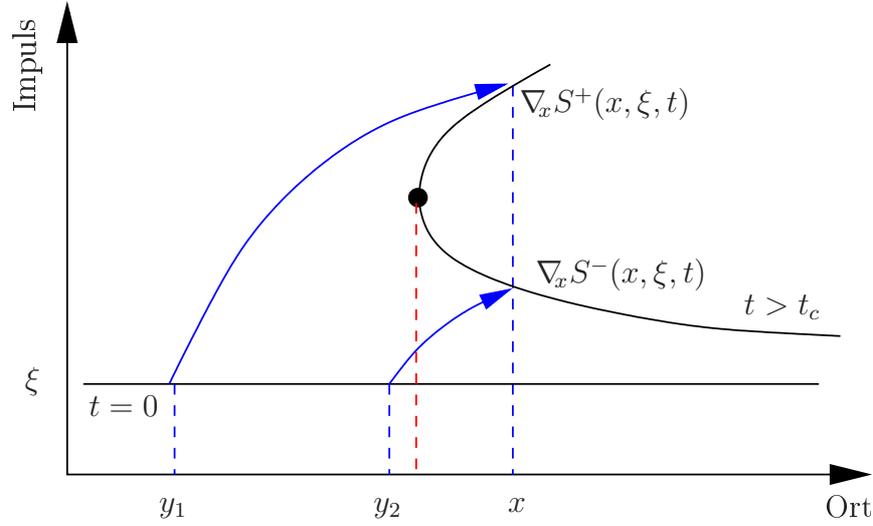


Abbildung 12: Zur Zeit t_c hat sich die erste Kaustik gebildet (rot). Für Zeiten $t > t_c$ gibt es zwei Bahnen, die auf $\Lambda_S(0)$ starten und zur Zeit t am Ort x ankommen. Folglich kann die Lagrange-Untermannigfaltigkeit Λ_S nur noch lokal als Graph von Funktionen $\nabla_x S^\pm$ dargestellt werden.

7.7 Kaustiken und die WKB-Funktion im Impulsraum

Bisher haben wir (für hinreichend kleine Zeiten, d.h. solange $\Lambda_S(t)$ noch keine Kaustik gebildet hat) die folgende WKB-Lösung gefunden,

$$\psi_{\text{WKB}}(x, t) \sim A_0(y(x, \xi, t)) \sqrt{\det \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_k}(x, \xi, t)} e^{\frac{i}{\hbar} S(x, \xi, t)}. \quad (7.74)$$

Da alle Eigenwerte von $\frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_k}$ noch positiv sind, vgl. Abb. 13, können wir auch schreiben

$$\psi_{\text{WKB}}(x, t) \sim A_0(y(x, \xi, t)) \sqrt{\left| \det \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_k}(x, \xi, t) \right|} e^{\frac{i}{\hbar} S(x, \xi, t)} \quad (7.75)$$

Zu einer Zeit t_c divergiere zum ersten Mal ein Eigenwert von $\frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_k}$ (Kaustik) – die Lagrange-Mannigfaltigkeit $\Lambda_S(t)$ lässt sich nicht mehr global als Graph des Gradienten einer erzeugenden Funktion darstellen, vgl. Abb. 12. Für Zeiten $t > t_c$ rechnen wir daher – weg von der Kaustik – mit einer Linearkombination von Termen der Form (7.75).

Wir überlegen uns nun alles explizit in einer Dimension, formulieren das Ergebnis aber gleich für beliebige d .

In der Nähe der Kaustik betrachten wir die Wellenfunktion im Impulsraum,

$$g(p, t) = (2\pi\hbar)^{d/2} \mathcal{F}[\psi(\cdot, t)](p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} \psi(x, t) e^{-\frac{i}{\hbar} px} d^d x. \quad (7.76)$$

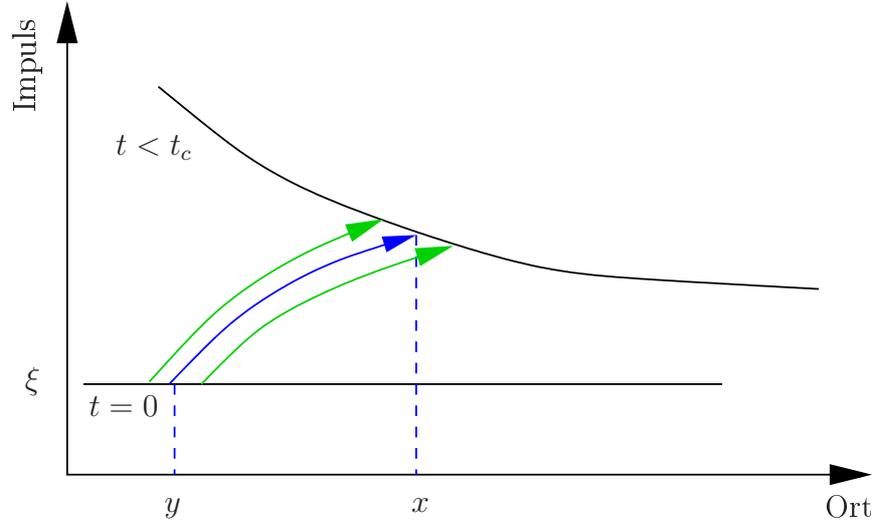


Abbildung 13: Die Matrix $\frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_k} = \frac{\partial y_k}{\partial x_j}$ misst die Änderung des Anfangsorts y , wenn der Endort x auf der Lagrange-Untermannigfaltigkeit verschoben wird. Solange sich keine Kaustik gebildet hat, führen größere (kleinere) x zu kleineren y , d.h. alle Eigenwerte von $\frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_k}$ sind positiv.

Wir könnten für $g(p, t)$ einen WKB-Ansatz machen, d.h.

$$g_{\text{WKB}}(p, t) = b_{\hbar}(p, t) e^{\frac{i}{\hbar} W(p, t)}, \quad b_{\hbar}(p, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^k b_k(p, t), \quad (7.77)$$

und z.B. W und b_0 explizit bestimmen. Stattdessen wollen wir die WKB-Funktion im Impulsraum durch Fouriertransformation der WKB-Funktion im Ortsraum gewinnen (dort, wo beide eindeutig definiert sind – in Abb. 12 “unterhalb” der Kaustik). Wir betrachten also

$$\begin{aligned} g_{\text{WKB}}(p, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} \psi_{\text{WKB}}(x, t) e^{-\frac{i}{\hbar} px} d^d x \\ &\sim \frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} a_0(x, \xi, t) e^{\frac{i}{\hbar} (S(x, \xi, t) - px)} d^d x \end{aligned} \quad (7.78)$$

und wenden die Methode der stationären Phase an. Stationäre Punkte sind durch die Bedingung

$$\nabla_x S(x, \xi, t) = p \quad (7.79)$$

bestimmt. Die Phase am stationären Punkt ist dann

$$S(x(p, \xi, t), \xi, t) - px(p, \xi, t) =: W(p, \xi, t), \quad (7.80)$$

d.h. die Legendre-Transformierte der Phase $S(x, \xi, t)$ im Ortsraum, vgl. Abschnitt 7.5.

Damit erhalten wir

$$g_{\text{WKB}}(p, t) \sim a_0(x(p, \xi, t), \xi, t) \frac{e^{i\frac{\pi}{4} \text{sgn} \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k}(x(p, \xi, t), \xi, t)}}{\left| \det \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k}(x(p, \xi, t), \xi, t) \right|^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar} W(p, \xi, t)}. \quad (7.81)$$

Die Eigenwerte von $\frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k}$ sind alle negativ (wir befinden uns in Abb. 12 im unteren Zweig von $\Lambda_S(t)$), d.h. $\text{sgn} \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k} = -d$. Außerdem gilt (wir unterdrücken wieder die meisten Argumente)

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 W}{\partial p_j \partial \xi_k}(p, \xi, t) &= \frac{\partial^2}{\partial p_j \partial \xi_k} [S(x(p, \xi, t), \xi, t) - px(p, \xi, t)] \\ &= \frac{\partial}{\partial p_j} \left[\frac{\partial S}{\partial \xi_k} + \underbrace{\frac{\partial S}{\partial x_l} \frac{\partial x_l}{\partial \xi_k}}_{=p_l} + \frac{\partial x_l}{\partial \xi_k} p_l \right] \\ &= \frac{\partial^2 S}{\partial x_l \partial \xi_k} \frac{\partial x_l}{\partial p_j} = \frac{\partial^2 S}{\partial x_l \partial \xi_k} \left(\frac{\partial p_j}{\partial x_l} \right)^{-1} \\ &= \frac{\partial^2 S}{\partial x_l \partial \xi_k}(x(p, \xi, t), \xi, t) \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_l}(x(p, \xi, t), \xi, t) \right)^{-1} \end{aligned} \quad (7.82)$$

und damit

$$\left| \det \frac{\partial^2 S}{\partial x_l \partial \xi_k}(x(p, \xi, t), \xi, t) \right|^{\frac{1}{2}} \left| \det \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k}(x(p, \xi, t), \xi, t) \right|^{-\frac{1}{2}} = \left| \det \frac{\partial^2 W}{\partial p_j \partial \xi_k}(p, \xi, t) \right|^{\frac{1}{2}}. \quad (7.83)$$

Die WKB-Funktion im Impulsraum lautet also

$$g_{\text{WKB}}(p, t) \sim \underbrace{A_0(y(p, \xi, t)) e^{-i\frac{\pi}{4}d}}_{=b_0(p, \xi, t)} \sqrt{\det \frac{\partial^2 W}{\partial p_j \partial \xi_k}(p, \xi, t)} e^{\frac{i}{\hbar} W(p, \xi, t)} \quad (7.84)$$

Diese Lösung ist in der Nähe der (Ortsraum-)Kaustik wohldefiniert, d.h. wir können sie über die Kaustik hinaus ausdehnen.

Nun stellen wir die Lagrange-Untermannigfaltigkeit $\Lambda_S(t)$ ober- und unterhalb der Kaustik (vgl. Abb. 12) durch den Gradienten von Funktionen $S_+(x, \xi, t)$ und $S_-(x, \xi, t)$ dar. Im p -Integral der Fourier-Rücktransformation erhalten wir (mit x jenseits der Kaustik, vgl. Abb. 12) zwei stationäre Punkte,

$$\nabla_p W(p, \xi, t) - x = 0 \quad \Rightarrow \quad p^\pm(x, \xi, t) = \nabla_x S^\pm(x, \xi, t). \quad (7.85)$$

Die (schnell oszillierende) Phase wird wieder

$$W(p^\pm(x, \xi, t), \xi, t) + p^\pm(x, \xi, t)x = S^\pm(x, \xi, t) \quad (7.86)$$

und damit

$$\psi_{\text{WKB}}(x, t) = \sum_{\pm} A_0(y(x, \xi, t)) e^{-i\frac{\pi}{4}d} \sqrt{\left| \det \frac{\partial^2 W}{\partial p_j \partial \xi_k}(p^\pm(x, \xi, t), \xi, t) \right|} e^{i\frac{\pi}{4} \text{sgn} \frac{\partial^2 W}{\partial p_j \partial p_k}(p^\pm(x, \xi, t), \xi, t)} \frac{e^{\frac{i}{\hbar} S^\pm(x, \xi, t)}}{\left| \det \frac{\partial^2 W}{\partial p_j \partial p_k}(p^\pm(x, \xi, t), \xi, t) \right|^{1/2}}. \quad (7.87)$$

Eine Rechnung analog zu (7.82) liefert

$$\left| \det \frac{\partial^2 W}{\partial p_j \partial \xi_k}(p^\pm(x, \xi, t), \xi, t) \right|^{\frac{1}{2}} \left| \det \frac{\partial^2 W}{\partial p_j \partial p_k}(p^\pm(x, \xi, t), \xi, t) \right|^{-\frac{1}{2}} = \left| \det \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_k}(x, \xi, t) \right|^{\frac{1}{2}}. \quad (7.88)$$

An der Kaustik wechselt gerade eine Eigenwert von $\frac{\partial^2 W}{\partial p_j \partial p_k}$ das Vorzeichen von $+$ nach $-$ (in einer Dimension sieht man das leicht, wenn man Abb. 12 um 90° nach rechts links dreht), d.h.

$$\text{sgn} \frac{\partial^2 W}{\partial p_j \partial p_k}(p^+(x, \xi, t), \xi, t) = \text{sgn} \frac{\partial^2 W}{\partial p_j \partial p_k}(p^+(x, \xi, t), \xi, t) - 2 = d - 2. \quad (7.89)$$

Damit erhalten wir insgesamt für die WKB-Funktion jenseits der ersten Kaustik

$$\begin{aligned} \psi_{\text{WKB}}(x, t) \sim & A_0(y(x, \xi, t)) \sqrt{\left| \det \frac{\partial^2 S^+}{\partial x_j \partial \xi_k}(x, \xi, t) \right|} e^{\frac{i}{\hbar} S^+(x, \xi, t) - i\frac{\pi}{2}} \\ & + A_0(y(x, \xi, t)) \sqrt{\left| \det \frac{\partial^2 S^-}{\partial x_j \partial \xi_k}(x, \xi, t) \right|} e^{\frac{i}{\hbar} S^-(x, \xi, t)}. \end{aligned} \quad (7.90)$$

Jede Trajektorie von $\Lambda_S(0)$ nach $\Lambda_S(t)$, die auf dem oberen Zweig von $\Lambda_S(t)$ hat zu einem Zeitpunkt t' mit $0 < t' < t$ die Kaustik berührt, vgl. Abb. 14a. Beim Durchgang durch eine Kaustik müssen wir also immer mit einem Phasenfaktor $\exp(-i\pi/2)$ multiplizieren.

Für eine Wellenfunktion ψ_{WKB} , die mit einer beliebigen Lagrange-Untermannigfaltigkeit assoziiert ist, haben wir nun zwei Möglichkeiten, die Phasenfaktoren der Beiträge der unterschiedlichen Zweige zu bestimmen:

1. Wir betrachten, wie sich $\Lambda_S(t)$ aus einer Lagrange-Untermannigfaltigkeit $\Lambda_S(0)$ ohne Kaustiken entwickelt. Für jeden Zweig von $\Lambda_S(t)$ suchen wir uns eine Trajektorie von $\Lambda_S(0)$ nach $\Lambda_S(t)$, die auf diesem Zweig endet und ordnen ihr eine Zahl ν zu. Auf $\Lambda_S(0)$ setzen wir $\nu = 0$. Dann verfolgen wir die Trajektorie bis zur Zeit t . Bei jedem Durchgang durch eine Kaustik erhöhen (erniedrigen) wir ν um die Anzahl der Eigenwerte von $\frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k}$, die das Vorzeichen von $-$ nach $+$ (von $+$ nach $-$) wechseln. Der entsprechende Zweig von $\Lambda_S(t)$ erhält dann den Phasenfaktor $e^{i\frac{\pi}{2}\nu}$. Die Zahl ν ist der **Morseindex** der Trajektorie (blau), siehe z.B. [49, 48].

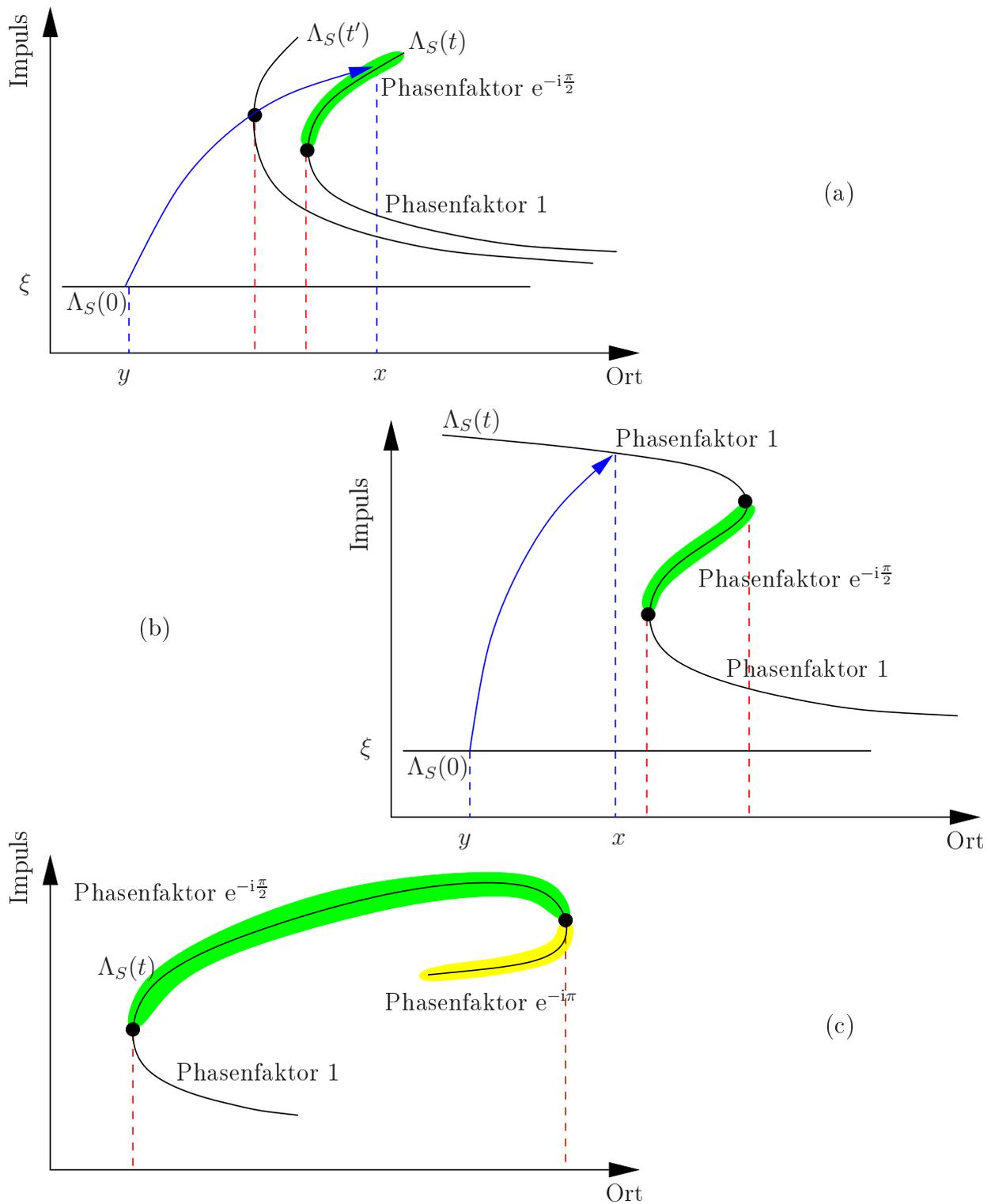


Abbildung 14: Illustration zur Berechnung von Morse- und Maslovindizes

2. Wir folgen einer Kurve \mathcal{C} in $\Lambda_S(t)$, und ordnen ihr eine Zahl μ zu. Am Startpunkt setzen wir $\mu = 0$. Jedesmal, wenn wir eine Kaustik durchqueren, erhöhen (erniedrigen) wir μ um die Anzahl der Eigenwerte von $\frac{\partial^2 W}{\partial p_j \partial p_k}$, die einen Vorzeichenwechsel von $+$ nach $-$ (von $-$ nach $+$) machen. Dem Zweig von $\Lambda_S(t)$, auf dem die Kurve endet, ordnen wir die Phase $e^{-i\frac{\pi}{2}\mu}$ zu. Die Zahl $\mu \bmod 4$ ist der **Maslovindex** der Kurve $\mathcal{C} \subset \Lambda_S$, siehe z.B. [40, 42, 48].

Wir illustrieren diese Regeln in Abb. 14.

In einer Dimension genügt es, zwischen der Orts- und Impulsdarstellung zu wechseln, um die Wellenfunktion über Kaustiken hinaus fortzusetzen. Für mehrere Freiheitsgrade sind i.A. auch gemischte Darstellungen notwendig, d.h. Wellenfunktionen, die von einem Orts- und einigen Impulskoordinaten abhängen. Die Parametrisierung einer Lagrange-Untermannigfaltigkeit kann man allerdings stets so wählen, daß (lokal) von den kanonischen konjugierten Paaren (p_j, x_j) immer nur eine Variable als Parameter auftritt (d.h. niemals Ort und Impuls mit demselben Index j), siehe z.B. [42, Lemma 4.5]. Damit läßt sich das obige Vorgehen generell zum Fortsetzen über Kaustiken hinweg verwenden.

7.8 EBK-Quantisierung

Wir suchen nun approximative Eigenfunktionen (vgl. Abschnitt 7.2, d.h. stationäre WKB-Lösungen). Entsprechend betrachten wir die stationäre Schrödingergleichung,

$$(\hat{H}\psi)(x) = E\psi(x), \quad (7.91)$$

und machen einen WKB-Ansatz

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = a_{\hbar}(x) e^{\frac{i}{\hbar}S(x)}, \quad a_{\hbar} = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^k a_k(x). \quad (7.92)$$

Wir wissen, daß wir einer WKB-Wellenfunktion eine Lagrange-Untermannigfaltigkeit zuordnen können (weg von Kaustiken). Die Funktion S löst jetzt die zeitunabhängige Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$H_0(\nabla_x S, x) = E. \quad (7.93)$$

Für stationäre WKB-Lösungen muß auch Λ_S invariant unter dem Fluß $\phi_{H_0}^t$ sein. Lokal haben wir immer (bis auf Kaustiken)

$$\Lambda_S = \{(p, x) \in \mathbb{R}^{2d} \mid p = \nabla_x S\}. \quad (7.94)$$

Im Allgemeinen erwarten wir mehrere Zweige, sowohl für die Wellenfunktion

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \sum_j a_{\hbar}^j(x) e^{\frac{i}{\hbar}S_j(x)} \quad (7.95)$$

als auch für die Lagrange-Untermannigfaltigkeit

$$\Lambda_S = \bigcup_j \{(p, x) \in \mathbb{R}^{2d} \mid p = \nabla_x S_j\}, \quad (7.96)$$

alles bis auf Kaustiken (dort parametrisieren wir Λ_S durch Impulse, oder gemischt).

Aus der Hamilton-Jacobi-Gleichung (7.93) folgt

$$\Lambda_S \subseteq \Omega_E \quad (7.97)$$

mit der Energieschale

$$\Omega_E = \{(p, x) \in \mathbb{R}^{2d} \mid H_0(p, x) = E\}. \quad (7.98)$$

Im Folgenden setzen wir stets voraus, daß Ω_E kompakt ist.

7.8.1 Wann dürfen wir WKB-Funktionen erwarten?

Für Systeme mit nur einem Freiheitsgrad stellt sich die Situation vergleichsweise einfach dar.

Lemma 7.9. *Für ein System mit nur einem Freiheitsgrad ($d = 1$) ist die Energieschale Ω_E selbst eine invariante Lagrange-Untermannigfaltigkeit.*

BEWEIS: “invariant”

- $\phi_{H_0}^t$ erhält die Energie, d.h. $\phi_{H_0}^t(\Omega_E) \subseteq \Omega_E$
- $\phi_{H_0}^t$ erhält das Phasenraumvolumen $\Rightarrow \phi_{H_0}^t(\Omega_E) = \Omega_E$

“Lagrangesch”: $\dim \Omega_E = 2d - 1 = 1 = d$, und in zwei Dimension ist jede eindimensionale Untermannigfaltigkeit Lagrangesch, denn parametrisiere lokal $p(x) \Rightarrow dp \wedge dx = \frac{\partial p}{\partial x} dx \wedge dx = 0$

□

Für $d \geq 2$ Freiheitsgrade wird die Situation komplizierter.

- Energieschale: $\dim \Omega_E = 2d - 1$
- Lagrange-Untermannigfaltigkeit: $\dim \Lambda_S = D$ ($\Rightarrow \Lambda_S \subset \Omega_E$ für WKB-Wellenfunktion)
- Trajektorie: $(\xi, y) \in \mathbb{R}^{2d}$ fest, $\dim\{(p, x) \in \mathbb{R}^{2d} \mid (p, x) = \phi^t(\xi, y), t \in \mathbb{R}\} = 1$

Ist nun z.B. der Hamiltonsche Fluß $\phi_{H_0}^t$ ergodisch auf der Energieschale, dann ist die Trajektorie $\{\phi^t(\xi, y) \mid t \in \mathbb{R}\}$ dicht in Ω_E für fast alle $(\xi, y) \in \Omega_E$ (eine typische Bahn kommt jedem Punkt beliebig nahe – daher ist das Zeitmittel gleich dem Mittel über die Energieschale). Damit ist i.A. auch $\phi_{H_0}^t(\Lambda_S)$ dicht in Ω_E , und wir haben keine Chance, eine eindeutige WKB-Funktion zu konstruieren!

Um fortfahren zu können, fordern wir nun Integrabilität im folgenden Sinne.

Satz 7.10. (Liouville-Arnold) *Für ein Hamiltonsches System mit Hamiltonfunktion $H_0 : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$ seien $d - 1$ weitere Erhaltungsgrößen A_2, A_3, \dots, A_d (in Involution) gegeben, d.h. (mit $A_1 := H_0$)*

$$\{A_j, A_k\} = 0 \quad \forall j, k = 1, \dots, d. \quad (7.99)$$

Betrachte die Niveaumenge der Funktion A_j ,

$$M_a := \{(p, x) \mid A_j = a_j, i = 1, \dots, n\}. \quad (7.100)$$

Die Funktionen A_j seien unabhängig auf M_a , d.h. die 1-Formen dA_j seien linear unabhängig an jedem Punkt auf M_a . Wie nennen diese System integrabel und es gilt:

1. M_a ist eine glatte Mannigfaltigkeit, die invariant unter dem Hamiltonschen Fluß $\phi_{H_0}^t$ ist.
2. Falls M_a zusammenhängend und kompakt ist, dann ist M_a diffeomorph zum d -dimensionalen Torus

$$\mathbb{T}^d = \{(\theta_1, \dots, \theta_d) \pmod{2\pi}\}. \quad (7.101)$$

3. Der Hamiltonsche Fluß $\phi_{H_0}^t$ definiert eine quasiperiodische Bewegung auf M_a , d.h.

$$\dot{\theta} = \omega(a). \quad (7.102)$$

4. Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen können durch Quadarturen gelöst werden.

BEWEIS: siehe Vorlesung *Mathematische Physik I* (Stefan Teufel, WS 06/07) oder [43, Kapitel 10]

Bemerkungen:

- Hamiltonsche Flüsse mit $d = 1$ sind integrabel.
- Die Flüsse $\phi_1^t := \phi_{H_0}^t$, $\phi_j^t := \phi_{A_j}^t$, $j = 2, \dots, d$ vertauschen, d.h

$$\phi_j^t \circ \phi_k^s = \phi_k^s \circ \phi_j^t. \quad (7.103)$$

- Die Tori sind die Lagrange-Untermannigfaltigkeiten, für die wir WKB-Funktionen konstruieren möchten.
- Die Erhaltungsgrößen H_0, A_2, \dots, A_d und die Winkel $\theta_1, \dots, \theta_d$ sind i.A. keine Paare kanonisch konjugierter Variablen. Man kann aber andere Erhaltungsgrößen, die Wirkungsvariablen

$$I_j := \frac{1}{2\pi} \oint_{C_j} p \, dx, \quad (7.104)$$

eingeführen, die kanonisch konjugiert zu den θ_j sind. Die Hamiltonfunktion \overline{H} in den Variablen (I, θ) ist dann nur eine Funktion der Wirkungen I nicht aber der Winkel θ , d.h. $\overline{H}(I)$. Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen lauten also

$$\dot{\theta} = (\nabla_I \overline{H})(I) =: \omega_I. \quad (7.105)$$

7.8.2 Quantisierungsregel in einer Dimension

Die Energieschale Ω_E ist zugleich Trajektorie und Lagrange-Untermannigfaltigkeit. Wenn unsere WKB-Wellenfunktion zur Zeit $t = 0$ mit Ω_E assoziiert ist, so bleibt sie es auch für alle Zeiten⁷. Wenn wir zur Zeit $t = 0$ an einem Punkt $(\xi, y) \in \Omega_E$ Amplitude und Phase von ψ_{WKB} festlegen, so erhalten wir zum Zeitpunkt t einen Beitrag vom Punkt $(p, x) = \phi_{H_0}^t(\xi, y) \in \Omega_E$. In führender Ordnung erhalten wir am Punkt (p, x) die Phase

$$\frac{1}{\hbar} \left(S_0(y) + \int_y^x P dX - Et \right) - \frac{\pi}{2} \mu, \quad (7.106)$$

wobei μ der Maslovindex von $\{(p, x) \in \mathbb{R}^2 \mid (p, x) = \phi_{H_0}^{t'}(\xi, y), 0 \leq t' \leq t\}$ ist. Der Vorfaktor ist in führender \hbar -Ordnung lediglich $A_0(y)$ multipliziert mit der Wurzel aus dem Betrag der Jacobideterminante einer Variablentransformation von y nach x .

Wir wählen nun zur Zeit $t = 0$ für Amplitude und Phase am Punkt (p, x) , genau die Werte, der sich – bis auf den Faktor $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ – auch zur Zeit t durch Integration der Anfangsbedingung an (ξ, y) ergeben.

Die Zeitabhängigkeit von ψ_{WKB} ergibt sich damit zu $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, d.h. die Energie der möglichen Quasimode beträgt E .

Allerdings wird diese Konstruktion nicht für beliebige Energien E gelingen, es muß nämlich die folgende Konsistenzbedingung erfüllt sein. Sei $T > 0$ die Periode der Bewegung, d.h. die kleinste Zeit, für die $\phi_{H_0}^T(\xi, y) = (\xi, y)$ gilt. Der Beitrag des Punkts (ξ, y) zur Wellenfunktion ψ_{WKB} beträgt dann in führender Ordnung

$$A_0(y) \sqrt{\det \frac{\partial y_j}{\partial x_k}} e^{\frac{i}{\hbar}(S_0(y) + \int_y^x P dX - Et) - i\frac{\pi}{2}\mu}. \quad (7.107)$$

Dies muß aber gleich dem Wert $A_0(y)e^{\frac{i}{\hbar}S_0(y)}$ zur Zeit Null multipliziert mit dem Phasenfaktor $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ sein. Wir erhalten also als Konsistenzbedingung

$$\frac{1}{\hbar} \oint P dX - \frac{\pi}{2} \mu \stackrel{!}{=} 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (7.108)$$

d.h. die korrigierte Bohr-Sommerfeld-Regel

$$\oint P dX \stackrel{!}{=} 2\pi\hbar \left(n + \frac{\mu}{4} \right), \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (7.109)$$

Dabei ist μ der Maslovindex eines Umlaufs um die Energieschale.

Kann die klassische Wirkung auf der Linken Seite von (7.109) bestimmte Werte nicht annehmen, so ergeben sich entsprechende Einschränkungen an die möglichen Werte der Quantenzahl n . Beispiele für mögliche Werte des Maslovindex' sind in Abb. 15 skizziert.

⁷Bis auf Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\hbar^\infty)$

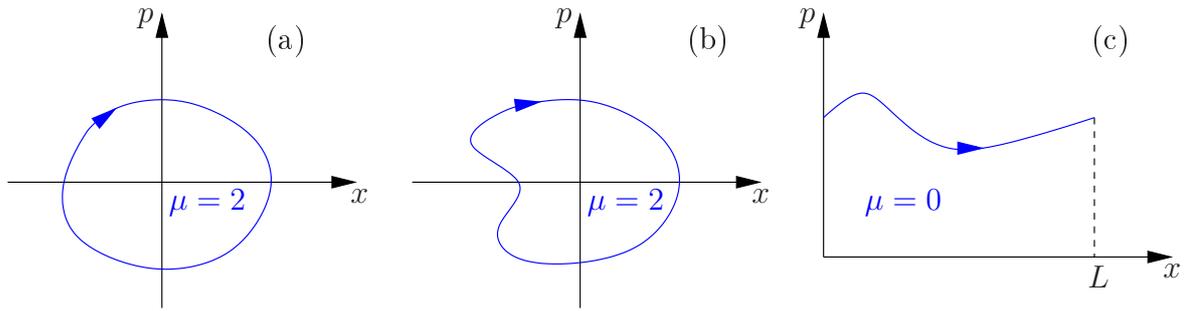


Abbildung 15: Der Maslovindex μ einer Kurve mißt nur die Topologie – “Eindellungen”, wie von (a) nach (b) führen nicht zu Änderungen. Im Fall (c) ist die Koordinate x bereits L -periodisch – wie z.B. der Winkel eines mathematischen Pendels.

Beispiel: Für eine eindimensionale Potentialmulde, wie wir sie bereits in Übungsaufgabe 3 behandelt haben, erhalten wir eine Bewegung zwischen zwei Umkehrpunkten, d.h. $\mu = 2$ (Situation (a) in Abb. 15). Die Wirkung

$$S(E) = \oint p dx \quad \text{mit} \quad p = \pm \sqrt{2m[E - V(x)]}, \quad (7.110)$$

kann nur positive Werte annehmen. Somit lautet die Quantisierungsbedingung

$$\oint p dx = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (7.111)$$

Diese haben wir bereits in Übungsaufgabe 3 gefunden, indem wir die Lösung der Schrödingergleichung in der Nähe der Umkehrpunkte (Airy-Funktion) sowie deren Asymptotik betrachtet haben. Für den harmonischen Oszillator $H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2$ sind die semiklassischen Eigenwerte gleich den quantenmechanischen.

7.8.3 Skizze für d Dimensionen

In $d \geq 2$ Dimensionen konstruieren wir WKB-Funktionen, die mit den invarianten Tori aus dem Satz von Liouville und Arnold. Wir gehen zunächst vor wie im eindimensionalen Fall. Die Invarianz der Tori unter $\phi_{H_0}^t$ garantiert uns wieder, daß eine WKB-Funktion, die zur Zeit $t = 0$ mit einem bestimmten Torus Λ assoziiert war, dies auch wieder – bis auf $\mathcal{O}(\hbar^\infty)$ – für alle Zeiten bleibt. Wir legen wieder Amplitude und Phase des Beitrags eines Punktes $(\xi, y) \in \Lambda$ zur Wellenfunktion fest. An einem Punkt $(p, x) \in \Lambda$ mit $(p, x) = \phi_{H_0}^t(\xi, y)$ wählen wir wieder zu Zeit $t = 0$ die Phase zu

$$\frac{1}{\hbar} \left(S_0(y) + \int_y^x P dX \right) - \frac{\pi}{2}\mu, \quad (7.112)$$

und den Vorfaktor $A_0(y)\sqrt{\det \partial y_j / \partial x_k}$. Allerdings erreichen wir für $d > 1$ so nicht alle Punkte auf Λ .

An dieser Stelle bedienen wir uns der kommutierenden Flüsse ϕ_2^t bis ϕ_d^t , entlang derer wir ebenfalls WKB-Lösungen konstruieren können: Die Erhaltungsgröße A_j spielt dann die Rolle der klassischen Hamilton-Funktion und der Weyl-Operator $\text{op}[A_j]$ die des quantenmechanischen Hamiltonoperators.

Durch Verkettungen $\phi_d^{t_d} \circ \dots \circ \phi_1^{t_1}$ erreichen wir jeden Punkt auf dem Torus Λ . Entsprechend legen wir die Phase von ψ_{WKB} zur Zeit $t = 0$ am Punkt $(p, x) = (\phi_d^{t_d} \circ \dots \circ \phi_1^{t_1})(\xi, y)$ zu

$$\frac{1}{\hbar} \left(S_0(y) + \int_y^x P \, dX \right) - \frac{\pi}{2} \mu \quad (7.113)$$

fest. Hierbei ist der Integrationsweg zunächst entlang der Verkettung der Flüsse zu nehmen und der Maslovindex μ für diesen Weg auszuwerten. Da Λ Lagrangesch ist, dürfen wir den Integrationsweg aber beliebig deformieren, ohne daß sich dabei der Wert des Integrals ändert. Der Maslovindex ist ebenfalls invariant unter solchen Deformationen.

Konsistenzbedingungen erhalten wir nun, wenn wir einen Weg von y nach y wählen, der nicht auf einen Punkt zusammenziehbar ist. Es muß dann gelten

$$\frac{1}{\hbar} \oint P \, dX - \frac{\pi}{2} \mu = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (7.114)$$

Es genügt, diese Bedingung für eine Basis $\{\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_d\}$ geschlossener Wege auf Λ zu erfüllen, vgl. Abb. 2. Ein Vertreter für \mathcal{C}_j ist dann ein Weg, längs dessen die Winkelvariable θ_j um 2π anwächst, während alle anderen Winkel θ_k , $k \neq j$, konstant sind. Dann gilt

$$\oint_{\mathcal{C}_j} P \, dX = 2\pi I_j, \quad (7.115)$$

wobei I_j die zu θ_j kanonisch konjugierte Wirkungsvariable ist. Die korrigierten Bohr-Sommerfeld-Regeln

$$\oint_{\mathcal{C}_j} P \, dX = 2\pi \hbar \left(n_j + \frac{\mu_j}{4} \right), \quad n_j \in \mathbb{Z}, \quad (7.116)$$

werden Einstein-Brillouin-Keller- (EBK-) oder Torus-Quantisierung genannt. Hierbei ist μ_j der Maslovindex des Weges \mathcal{C}_j .

Die EBK-Regeln legen die möglichen Werte der Wirkungen I fest, für die sich stationäre WKB-Wellenfunktionen konstruieren lassen. Ist wieder \overline{H} die Hamiltonfunktion in Wirkungs- und Winkelvariablen, so lauten die approximativen Energieeigenwerte

$$E_n = \overline{H} \left(\hbar \left(n + \frac{\mu}{4} \right) \right), \quad (7.117)$$

mit $n \in \mathbb{Z}^d$ beziungsweise einer Teilmenge davon, falls die Wirkungsvariablen klassisch nur bestimmte Werte annehmen können.

Beispiel: **Zentralpotential 3D... Kepler-Problem und Vergleich mit Abschnitt 1**

Literatur

- [1] G. Joos: *Lehrbuch der Theoretischen Physik*, Akademische Verlagsgesellschaft m.b.H, Frankfurt am Main, 10. Aufl., (1959).
- [2] N. Bohr: *On the Constitution of Atoms and Molecules. I.*, Phil. Mag. **26** (1913) 1–25.
- [3] A. Sommerfeld: *Zur Quantentheorie der Spektrallinien*, Ann. Phys. (Leipzig) **51** (1916) 1–94, 125–167.
- [4] J. J. Balmer: *Notiz über die Spectrallinien des Wasserstoffs*, Ann. Phys. Chem. **25** (1885) 80–87.
- [5] M. Planck: *Die physikalische Struktur des Phasenraumes*, Ann. Phys. (Leipzig) **50** (1916) 385–418.
- [6] K. Schwarzschild: *Zur Quantenhypothese*, Sitzungsb. Königl. Preuss. Akad. Wiss. (1916) 548–569.
- [7] P. S. Epstein: *Zur Theorie des Starkeffektes*, Ann. Phys. (Leipzig) **50** (1916) 489–520.
- [8] A. Einstein: *Zum Quantensatz von Sommerfeld und Epstein*, Verh. Dtsch. Phys. Ges. **19** (1917) 82–92.
- [9] J. Liouville: *Sur l'intégration des équations différentielles de la Dynamique*, J. Math. Pures Appl. **20** (1855) 137–138.
- [10] A. Sommerfeld: *Atombau und Spektrallinien*, Band I, Friedr. Vieweg & Sohn GmbH, Braunschweig, 8. Aufl., (1969).
- [11] N. Bohr: *Spektren und Atombau*, Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig, 2. Aufl., (1924).
- [12] M. Reed und B. Simon: *Methods of Modern Mathematical Physics I, Functional Analysis*, Academic Press, New York, (1970).
- [13] M. Reed und B. Simon: *Methods of Modern Mathematical Physics II, Fourier Analysis, Self-Adjointness*, Academic Press, New York, (1970).
- [14] A. Messiah: *Quantenmechanik*, Band 1, Walter de Gruyter, Berlin, New York, 3. Aufl., (1991).
- [15] L. Hörmander: *The Analysis of Linear Partial Differential Operators*, Band I, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, (1983).
- [16] L. Hörmander: *The Analysis of Linear Partial Differential Operators*, Band I–IV, Springer-Verlag, 2. Aufl., (1990).

- [17] D. Robert: *Autour de l'Approximation Semi-Classique*, Birkhäuser, Boston, (1987).
- [18] G. B. Folland: *Harmonic Analysis in Phase Space*, Nr. 122 in Annals of Mathematics Studies, Princeton University Press, Princeton, (1989).
- [19] A. Grigis und J. Sjöstrand: *Microlocal Analysis for Differential Operators*, London Mathematical Society Lecture Note Series, Cambridge University Press, Cambridge, (1994).
- [20] M. Dimassi und J. Sjöstrand: *Spectral asymptotics in the semi-classical limit*, Cambridge University Press, Cambridge, (1999).
- [21] A. Martinez: *An Introduction to Semiclassical and Microlocal Analysis*, Springer-Verlag, New York Berlin Heidelberg, (2002).
- [22] L. C. Evans und M. Zworski: *Lectures on Semiclassical Analysis*, Lecture Notes, Version 0.3, Department of Mathematics, UC Berkeley, <http://math.berkeley.edu/~zworski/semiclassical.pdf>.
- [23] R. G. Littlejohn: *The semiclassical evolution of wave packets*, Phys. Rep. **138** (1986) 193–291.
- [24] G. P. Berman und G. M. Zaslavsky: *Condition of stochasticity in quantum nonlinear systems*, Physica A **91** (1978) 450–460.
- [25] M. V. Berry und N. L. Balazs: *Evolution of semiclassical quantum states in phase space*, J. Phys. A **12** (1979) 625–642.
- [26] M. Combescure und D. Robert: *Semiclassical spreading of quantum wave packets and applications near unstable fixed points of the classical flow*, Asymptot. Anal. **14** (1997) 377–404.
- [27] D. Bambusi, S. Graffi und T. Paul: *Long time semiclassical approximation of quantum flows: a proof of the Ehrenfest time*, Asymptot. Anal. **21** (1999) 149–160.
- [28] A. Bouzouina und D. Robert: *Uniform semiclassical estimates for the propagation of quantum observables*, Duke Math. J. **111** (2002) 223–252.
- [29] S. De Bièvre und D. Robert: *Semiclassical propagation on $|\log \hbar|$ time scales*, Int. Math. Res. Not. (2003) 667–696.
- [30] R. Schubert: *Semiclassical behaviour of expectation values in time evolved Lagrangian states for large times*, Commun. Math. Phys. **256** (2005) 239–254.
- [31] R. Schubert: *Semiclassical wave propagation for large times*, arXiv:0705.0134v1 [math-ph].

- [32] S. A. Fulling: *Spectral oscillations, periodic orbits, and scaling*, J. Phys. A **35** (2002) 4049–4066.
- [33] M. Born und E. Wolf: *Principles of optics: Electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*, Pergamon Press, New York, (1959).
- [34] J. Bolte und F. Steiner: *A Note on the Gutzwiller Trace Formula*, Anlage zur Vorlesung “Theorie des Chaos”, Universität Ulm, (1997).
- [35] G. Wentzel: *Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingungen für die Zwecke der Wellenmechanik*, Z. Physik **38** (1926) 519–529.
- [36] H. A. Kramers: *Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung*, Z. Physik **39** (1926) 828–840.
- [37] L. Brillouin: *La mécanique ondulatoire de Schrödinger; une méthode générale par approximations successives*, Compt. Rend. **183** (1926) 24–26.
- [38] H. Jeffreys: *On certain approximate solutions of linear differential equations of the second order*, Proc. London Math. Soc. **23** (1925) 428–436.
- [39] J. B. Keller: *Corrected Bohr-Sommerfeld Quantum Conditions for Nonseparable Systems*, Ann. Phys. (NY) **4** (1958) 180–185.
- [40] V. P. Maslov: *Théorie des Perturbations et Méthodes Asymptotiques*, Dunod, Paris, (1972).
- [41] V. I. Arnold: *Une classe caractéristique intervenant dans les conditions de quantification*, in: V. P. Maslov: *Théorie des Perturbations et Méthodes Asymptotiques*, Dunod, Paris, (1972).
- [42] V. P. Maslov und M. V. Fedoriuk: *Semi-Classical Approximation in Quantum Mechanics*, D. Reidel, Dordrecht, (1981).
- [43] V. I. Arnold: *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Springer-Verlag, New York, (1989).
- [44] V. F. Lazutkin: *KAM theory and semiclassical approximations to eigenfunctions*, Springer-Verlag, Berlin, (1993).
- [45] J. B. Keller: *Semiclassical mechanics*, SIAM Rev. **27** (1985) 485–504.
- [46] J. J. Duistermaat: *Oscillatory integrals, Lagrange immersions and unfolding of singularities*, Comm. Pure Appl. Math. **27** (1974) 207–281.
- [47] H. Goldstein: *Klassische Mechanik*, AULA-Verlag, Wiesbaden, 11. Aufl., (1991).

- [48] M. C. Gutzwiller: *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, New York, (1990).
- [49] L. S. Schulman: *Techniques and Applications of Path Integration*, Wiley, New York, (1981).