Einleitung (Vorrede zur 1. Sitzung)

Die Vorlesung

"Höhere Methoden der Analysis in der Physik" (HMAP)

ist ein Grenzgebiet zwischen theoretischer Physik und Analysis angesiedelt. Wir hoffen, mit dieser interdisziplinären Veranstaltung sowohl Studierende der Mathematik als auch der Physik anzusprechen. Die Entwicklung der Quantenmechanik (QM) im ersten Drittel des 20. Jahrhunderts hat ganz wesentliche Impulse geliefert für die Hilbertraumtheorie wie auch für die Theorie der Distributionen (= verallgemeinerte Funktionen). Es liegt also nahe, die fundamentale Gleichung der nichtrelativistischen QM zum Ausgangspunkt der Betrachtungen zu machen. Die zeitabhängige Schrödingergleichung lautet

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi = -\Delta\psi + V\psi \qquad (SG_v)$$

Hierbei sind

- i die imaginäre Einheit;
- $\psi : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \to \mathbb{C}$, $(x,t) \mapsto \psi(x,t)$ die gesuchte Lösung, die die zeitliche Entwicklung eines physikalischen Zustands beschreibt;

- $\Delta = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}$ der Laplace-Operator, bei dem ein sehr allgemeiner Ableitungsbegriff zugrunde liegt;

- $V : \psi \mapsto V\psi$, $V\psi(x) := V(x)\psi(x)$ der Multiplikationsoperator (auch: Multiplikator, eine spezielle lineare Abbildung) mit einer reellwertigen Potentialfunktion $V : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $x \mapsto V(x)$ oder auch $V : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $(x,t) \mapsto V(x,t)$ und schließlich

- $\hat{H} := -\Delta + V$ der sog. Hamilton-Operator.

Die Eindeutigkeit von Lösungen in einer großen Klasse von Funktionen wird erzielt, indem man zusätzlich die Anfangsbedingung $\psi(0,x) = \psi_0(x)$ stellt. Das ist das sogenannte Cauchy-Problem für (SG_V).

(SG_V) spielt in der QM eine ebenso fundamentale Rolle wie das 2. Newtonsche Axiom

$$F = m\ddot{x} = m\frac{d^2x}{dt^2} \qquad (N2)$$

in der klassischen Mechanik. In (N2) ist

$$x : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^3, \quad t \mapsto x(t) = (x_1(t), x_2(t), x_3(t))$$

die gesuchte Lösung, die die Bahn eines Körpers der

Masse m unter dem Einfluss der äußeren Kraft F bewegt. Diese ist durch die Vorgabe von

Ort $x(0)$ und Impuls $m\dot{x}(0) = m\frac{dx}{dt}(0)$

zum Startzeitpunkt $t_0 = 0$ für ihre gesamte Lebensdauer eindeutig festgelegt. Insofern handelt es sich bei der Newtonschen Mechanik um (den Prototyp) eine(r) deterministische(n) Theorie. Ferner sind für jede Zeit $t > 0$ der Ort $x(t)$ und der Impuls $m\dot{x}(t)$ scharf definiert und bilden den physikalischen Zustand des beschriebenen Körpers – bei einem Ein-Teilchensystem also einen Punkt im $\mathbb{R}^6$ der mit der Zeit t variiert.

Die Quantenmechanik ist im folgenden Sinn ebenfalls eine <u>deterministische</u> <u>Theorie</u>: Bei (SG_V) handelt es sich um eine homogene lineare Differentialgleichung (Dgl.) 1. Ordnung in der Zeit- und 2. Ordnung in den Raumvariablen. In einer sehr großen Klasse "vernünftiger" Funktionen sind die Lösungen des Cauchy-Problems für (SG_V) eindeutig bestimmt (solange sie existieren). Wesentlicher Unterschied zur klassischen Mechanik: Ort und Impuls eines quantalen Teilchens lassen sich leicht gleichzeitig exakt bestimmen. Vielmehr ist die Zustandsfunktion ψ wahrscheinlichkeitstheoretisch zu interpretieren:

- $\int_{\Omega} |\psi(x,t)|^2 dx$ = W.-keit, dass sich ein durch ψ beschriebenes Teilchen zur Zeit $t \in \mathbb{R}$ im Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ befindet;

- $\int_{\Omega} |\hat{\psi}(\xi,t)|^2 d\xi$ = W.-keit, dass ein durch ψ beschriebenes Teilchen zur Zeit t einen Impuls hat ($\xi \in \mathbb{R}^n$), der sich im Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ befindet. Hierbei ist

$$\hat{\psi}(\xi,t) = (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix\xi} \psi(x,t)\, dx, \qquad x \cdot \xi = \sum_{i=1}^{n} x_i \xi_i,$$

die Fouriertransformierte von $\psi(\cdot,t)$.

- Beobachtbare Größen ($a, b, \ldots$; sog. Observablen) werden durch unbeschränkte lineare Abbildungen (= Operatoren) $A, B, \ldots$ repräsentiert. Das Integral

$$\langle A \rangle := \int_{\mathbb{R}^n} \psi(x,t)\, \overline{A\psi(x,t)}\, dx$$

ist der Erwartungswert der Observable a im Zustand $\psi(t)$.

Bsp.: Die beobachtbare Größe "Ort" wird durch den Multiplikator mit der Integrationsvariable $x \in \mathbb{R}^n$

repräsentiert, d.h. $A\Psi(x,t) = x\Psi(x,t)$. Der Erwartungs-
wert für die Lage eines durch Ψ beschriebenen Teilchens ist dann

$$\langle x \rangle := \int_{\mathbb{R}^n} \Psi(x,t)\, x\, \overline{\Psi}(x,t)\, dx \in \mathbb{R}^n.$$

Soweit zur Einführung, Qualifizierteres zur Quantenmechanik dürfen Sie von Herrn Reichwein erwarten. Von meiner Seite aus soll es in dieser Vorlesung um die Analysis der Schrödinger-Gleichung gehen. Die analytischen Methoden zur Behandlung von (SG_V) kommen in erster Linie aus zwei Teilgebieten der Analysis:

(1) Fourieranalysis und "temperierte" Distributionen (das ist eine spezielle Klasse verallgemeinerter Funktionen, zu der auch Maße gehören); um damit umgehen zu können, muss man ein wenig (abstrakt) integrieren können.

(2) Funktionalanalysis, insbesondere die Theorie unbeschränkter Operatoren in Hilberträumen. (Ein Hilbertraum ist ein mit einem Skalarprodukt ausgestatteter Vektorraum, der bezüglich der hierdurch induzierten Norm vollständig ist.)

Hieraus ergeben sich drei Gegenstände für diese und die folgende Sitzung:

1.1 Abstrakte Integration;

1.2 Banachräume und Hilberträume, allgemeiner: Topologische Vektorräume;

1.3 Fouriertransformation und temperierte Distributionen (⇝ CP für die freie Schrödingergleichung)