

Zerfall und Irreversibilität

Die verallgemeinerte Quantenmechanik der
Brüsseler Schule und die Richtung der Zeit

von **Kim Boström**



Januar 1999

Zerfall und Irreversibilität

Die verallgemeinerte Quantenmechanik der
Brüsseler Schule und die Richtung der Zeit

von Kim Boström



Diplomarbeit in Physik

2. überarbeitete Fassung

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

– Fakultät für Physik –

Januar 1999

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	i
Überblick	vii
1 Irreversibilität, Instabilität und die Richtung der Zeit	1
1.1 Logische Tücken	1
1.2 Die zwei Fraktionen der Brüsseler Schule	2
1.3 Irreversibilität	3
1.4 Begegnung mit einem Zirkelschluß	6
1.5 Instabilität	7
2 Das Friedrichsmodell und das Wigner-Weisskopf-Modell	11
2.1 Definition des Friedrichsmodells	11
2.2 Mikroskopisches Modell	12
2.3 Überführung in das Wigner-Weisskopf-Modell	16
2.4 Überführung in das Friedrichsmodell	18
2.5 Bestimmungsgleichung für die Überlebensamplitude	23
2.6 Nakajima-Zwanzig-Projektionen	25
3 Die quantenoptische Methode	27
3.1 Alternative Wege	27
3.1.1 Der Wigner-Weisskopf-Ansatz	27
3.1.2 Störungstheorie	30
3.1.3 Direkte Störungstheorie	32
3.2 Konkrete Berechnung	33
4 Transformationen	35
4.1 Fourier- und Laplace-Transformation	35
4.2 LF-Transformation	37
4.3 LF-Transformation der Bestimmungsgleichung	40
5 Die Resolvente	43
5.1 Resolvente und Spektrum	43
5.2 Green-Operatoren	46
5.2.1 Green-Operatoren im Energiebild	46
5.2.2 Green-Operatoren im Zeitbild	48
5.2.3 Zusammenhänge	49

5.3	Eigenvektoren	51
6	Lösung im Rahmen der Standard-Quantenmechanik	53
6.1	Konstruktion der Resolvente	53
6.2	Konstruktion der Eigenvektoren	55
6.2.1	Diskrete Eigenvektoren	55
6.2.2	Kontinuierliche Eigenvektoren	57
6.2.3	Resultierende Spektralzerlegungen	57
6.3	Versteckte Pole auf Riemann-Flächen	59
6.4	Die Überlebensamplitude	60
6.4.1	Verformung des Integrationsweges	60
6.4.2	Approximation des Pols	65
7	Konzepte der Brüsseler Schule	67
7.1	Komplexe Eigenwerte	67
7.2	Analytische Fortsetzung und Zeitordnungsregel	68
7.3	Verallgemeinerte Eigenvektoren	70
7.4	Äquivalenz zur Standard-Quantenmechanik	75
7.5	Anwendung auf das Friedrichsmodell	79
8	Jenseits des Hilbertraums	83
8.1	Der Rigged Hilbert Space	83
8.2	Der RHS der Standard-Quantenmechanik	85
8.3	Der RHS der Brüsseler Schule	86
8.4	Intrinsische Irreversibilität	89
8.5	Begründung der Wahl des RHS	90
8.5.1	Realistische Fraktion	90
8.5.2	Kritik	91
8.5.3	Fundamentalistische Fraktion	92
8.5.4	Kritik	92
9	Ein alternativer RHS	93
9.1	Konstruktion und Eigenschaften	93
9.2	Physikalische Betrachtungen	95
	Zusammenfassung	99
	Danksagung	103

Einleitung

*Was ihr den Geist der Zeiten heißt,
Das ist im Grund der Herren eigner Geist,
In dem die Zeiten sich bespiegeln.*

J. W. Goethe¹

Obwohl sich die Welt um uns herum offensichtlich von einer feststehenden Vergangenheit in eine ungewisse Zukunft entwickelt, enthalten die fundamentalen Gleichungen der Physik keine Auszeichnung einer bestimmten Richtung für die zeitliche Entwicklung physikalischer Systeme. Weder in der klassischen, noch in der relativistischen Mechanik, noch in der Quantenmechanik findet man einen Zeitpfeil auf der fundamentalen Ebene².

Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik führt eine Auszeichnung der Zeitrichtung ein, indem er sagt: In abgeschlossenen Systemen nimmt die Entropie eines Systems in positiver Zeitrichtung zu oder bleibt gleich³. Es gibt aber bei genauerer Betrachtung keinen echten *Beweis* für diesen Hauptsatz; man muß ihn vielmehr als Bestandteil eines Axiomensystems verstehen, das die Basis für die physikalische Theorie der Thermodynamik bildet. Überdies ist der Begriff der Entropie mit einer gewissen Subjektivität verknüpft: Die thermodynamische Entropie entspricht der *versteckten Information* in einem Makrozustand, d.h. einem Zustand, von dem nur makroskopische Größen wie Energie, Teilchenzahl, Volumen, Druck und Temperatur bekannt sind. Die Entropie eines Makrozustands ist ein Maß für das Phasenraumvolumen, das alle Mikrozustände bilden, die dieselben makroskopischen Eigenschaften haben⁴. Um die thermodynamische Entropie eines Systems zu erhalten, müssen Informationen über den mikroskopischen Zustand des Systems systematisch vernachlässigt werden. Hat aber eine solche Vernachlässigung von Informationen objektiven Charakter? Zu solchen Fragen sollte der *Laplacesche Dämon* zu Rate gezogen werden. Dieser Dämon ist ein wahrer Prüfstein in Fragen der Objektivität: Er besteht aus einer gedachten Intelligenz, welche keinerlei Beschränkung hinsichtlich der Zugänglichkeit von Informationen unterliegt, sofern diese Beschränkung nicht prinzipieller Natur ist. Eine prinzipielle Beschränkung spielt erst in der Quantenmechanik eine Rolle, wo es bestimmte beobachtbare Größen gibt, die nicht einmal im Prinzip gleichzeitig exakt bestimmbar sind. In der klassischen Mechanik gibt es keine solchen Größen und daher ist der Laplacesche Dämon imstande, den Zustand eines klassischen Systems, unabhängig von seinem Grad der Komplexität, absolut genau zu kennen. Er muß keine Messungen machen, die

¹Johann Wolfgang Goethe (1749-1832). Zitat aus "Faust" im Munde von Dr. Faust.

²Siehe zu diesem Thema z.B. [14, 25, 27, 23, 11]

³Das Vorzeichen der Zeit ist natürlich Konvention. Es reicht, daß die Entropie in einer Zeitrichtung nicht abnimmt.

⁴Die Beziehung $S = k \ln \Omega$ gilt in exakter Weise nur für eine Gleichverteilung der Mikrozustände innerhalb des Volumens Ω , d.h. für mikrokanonische Systeme.

mit Ungenauigkeiten behaftet sind; er *kennt* den Zustand. In den Worten von *Pierre Simon Laplace*⁵:

“Ein Intellekt, der zu einem gegebenen Zeitpunkt alle in der Natur wirkenden Kräfte kennt und die Lage aller Dinge, aus denen die Welt besteht – angenommen dieser besagte Intellekt wäre groß genug, diese Daten zu analysieren –, würde in derselben Formel die Bewegungen der größten Körper im Universum und die der kleinsten Atome erfassen; ihm wäre nichts ungewiß, und die Zukunft wie die Vergangenheit wären seinen Augen gegenwärtig.”

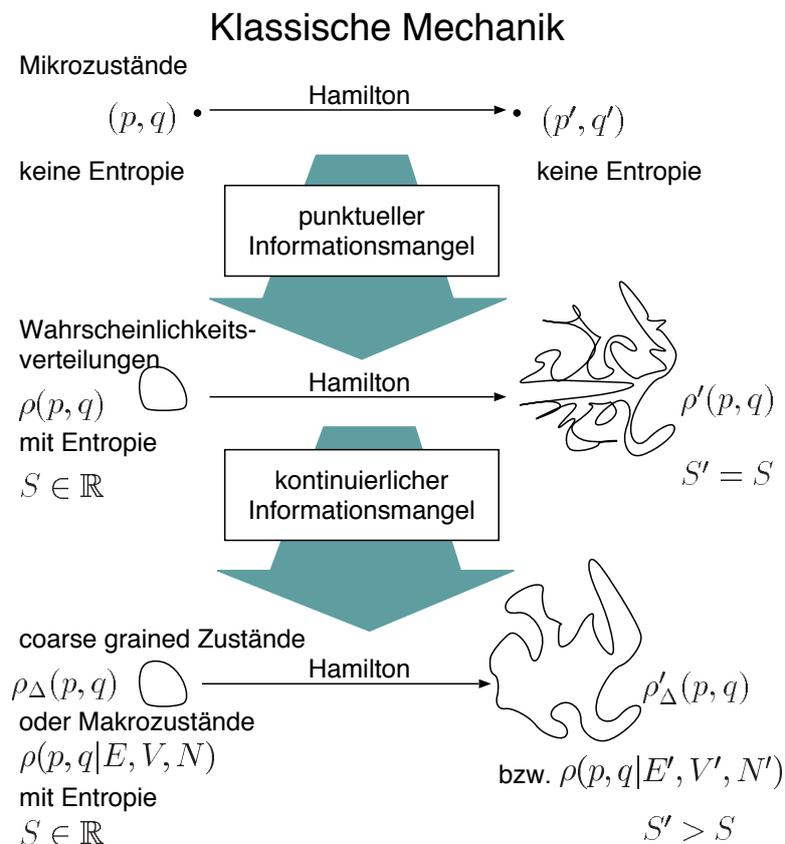


Abbildung 1: Die Situation in der klassischen Mechanik: Die Mikrozustände sind Punkte im Phasenraum, besitzen keine definierbare Entropie und werden durch die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen reversibel auf andere Mikrozustände abgebildet. Wenn nur unvollständige Informationen vorliegen, sind die Zustände Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf dem Phasenraum mit reellwertiger Entropie. Statt eines Punktes entspricht nun ein Fleck dem Zustand des Systems, der sich gemäß Hamiltonscher Dynamik mit der Zeit zu zerfasern beginnt. Nach dem Satz von Liouville bleibt jedoch das Volumen des Flecks dabei zeitlich konstant und somit auch seine Entropie. Betrachtet man den zerfaserten Fleck nun unter Vernachlässigung von Informationen, so fließt der Fleck ineinander und erscheint voluminöser: Die Entropie des Systems ist scheinbar gestiegen.

Für einen Laplaceschen Dämon, der den Zustand des Systems absolut genau kennt, gibt es keine versteckten Informationen und damit auch keine Entropie, die steigen könnte. Für

⁵Pierre Simon Laplace, französischer Philosoph und Physiker (1749-1827). Zitiert in [5], Seite 122

ihn gibt es nur die fundamentalen Bewegungsgleichungen, und die sind reversibel, d.h. zeitlich umkehrbar. In Abbildung 1 sehen wir eine schematische Darstellung der Situation in der klassischen Mechanik.

In der Quantenmechanik ist die Situation entschieden anders. Ort und Impuls eines Teilchens sind hier, im Gegensatz zur klassischen Mechanik, keine zulässigen Größen zur Bestimmung des Zustands eines Systems. Die Unschärferelation besagt, daß Ort und Impuls prinzipiell nicht zugleich exakt bestimmbar sind, sondern daß vielmehr das Produkt ihrer Unschärfen einen festen Wert nicht unterschreitet. Der Laplacesche Dämon hätte in der Quantenmechanik keine Chance: Ein Mikrozustand, gegeben durch Ort und Impuls jedes Teilchens des Systems, bliebe auch ihm verborgen. Ein Punkt im Phasenraum wiche stets einem Fleck mit einer bestimmten Ausdehnung, dem damit eine endliche Entropie zukommt, die dann in der Tat die Tendenz hat zu steigen. Ist der Zeitpfeil damit erklärt? Leider nein. Der Zustandsbegriff der Quantenmechanik ist nicht derjenige der klassischen Mechanik. Anstelle von Ort und Impuls tritt eine Menge von Observablen (wie Energie, Ort und Drehimpuls), die miteinander verträglich sind und deren genaue Kenntnis bezüglich jedes einzelnen Teilchens den Zustand des Systems eindeutig bestimmt. Anstelle der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen für Ort und Impuls tritt die Schrödinger-Gleichung für den quantenmechanischen Zustand des Systems. Und diese fundamentale Gleichung ist, ebenso wie die Hamiltonschen Gleichungen, reversibel⁶. Die Situation ist also um keinen Deut besser geworden. Der Zustandsbegriff und der mathematische Formalismus haben sich geändert, die fundamentalen Gleichungen sind nach wie vor reversibel. Der Entropiebegriff hat sich der neuen Situation angepaßt und ist zur "von Neumann-Entropie" geworden. Diese Entropie zeigt jedoch keinerlei Tendenz zu steigen. Erst wenn man systematisch Informationen vernachlässigt, erhält man einen Zustand, dessen Entropie mit der Zeit zunimmt. Auch hier wird eine Art "Makrozustand" durch die Menge aller "Mikrozustände" definiert, für die ausgewählte Observablen dieselben Werte annehmen. Dem entspricht eine *Projektion* des Zustands auf einen Teilraum des Zustandsraums, wobei unwiederbringlich Informationen verlorengehen. Der Begriff "Makrozustand" bleibt hier allerdings in Anführungszeichen, da er in der Quantenmechanik nicht verwendet wird. Der Zustand wird projiziert, wobei ihm die Informationen bezüglich eines Teilsystems entzogen werden, das man als *Umgebung* bezeichnet. Was hier ferner als "Mikrozustand" bezeichnet wird, ist der eigentliche quantenmechanische Zustand des Gesamtsystems, repräsentiert durch eine Dichtematrix. Viele solcher "Mikrozustände" können durch eine Projektion – etwa durch eine Nakajima-Zwanzig-Projektion (siehe Abschnitt 2.6) – auf denselben "Makrozustand" abgebildet werden, ganz analog zur klassischen Mechanik, wo verschiedene Mikrozustände durch makroskopische Zustandsvariablen mit demselben Makrozustand identifiziert werden.

Die Entropie eines solchen quantenmechanischen "Makrozustands" hat dann die Tendenz, in einer Zeitrichtung zuzunehmen⁷, und man kann in Richtung seines Anwachsens einen Zeitpfeil legen. Die vernachlässigte Information betrifft einen Teil des Gesamtsystems, den man als

⁶Natürlich erhielte man eine Irreversibilität und damit einen Zeitpfeil in der Quantenmechanik, wenn man das von Neumannsche Projektionspostulat neben der Schrödingergleichung als fundamentale Gleichung für die Entwicklung von Quantensystemen betrachtet. Es handelt sich jedoch um kein dynamisches Gesetz, da es die Zeit als Parameter nicht enthält. Diese Diskussion gehört in den Bereich des Meßproblems und ist nicht Gegenstand dieser Arbeit.

⁷Die Entropie nimmt auch, vom Zeitpunkt des Anfangszustands aus, in der entgegengesetzten Richtung zu. Geht man jedoch von einem Anfangszustand in der fernen Vergangenheit aus, dann hat seitdem die Entropie des projizierten Zustands tendenziell zugenommen. Man könnte hier eine elementare Debatte über die Evidenz solcher Anfangszustände beginnen, das führt aber zu weit. Es soll uns reichen, daß ab einem bestimmten Zeitpunkt gewisse Größen (hier die Entropie) eine zeitlich richtungsgebundene Entwicklung zeigen.

“Umgebung” bezeichnet und der sich der Beobachtung entzieht.

Es erscheint sicherlich plausibel, daß im realistischen Fall tatsächlich nicht *jeder* Teil des Universums beobachtet werden kann und es somit immer eine “Umgebung” gibt, welche unvermeidlich mit dem System, welches der Beobachtung zugänglich ist, wechselwirkt. Von Joos und Zeh wurde 1985 gezeigt [13], daß diese Wechselwirkung signifikante Auswirkungen hat und nicht per se vernachlässigt werden kann. In der zitierten Veröffentlichung wurde die Wechselwirkung eines Staubkorns im interstellaren Weltraum mit seiner “Umgebung” berechnet und gezeigt, daß auch dieses System, welches sicherlich die denkbar beste Realisierung eines “isolierten” Systems darstellt, eine nicht zu vernachlässigende Umgebung besitzt und bereits nach unglaublich kurzer Zeit jede Interferenzfähigkeit verliert, die es von klassischen Systemen unterscheidbar machen würde. Zu weitergehenden Informationen siehe auch [27] und [10]. In Abbildung 2 sehen wir eine schematische Darstellung der Situation in der Quantenmechanik.

Eine Schlußfolgerung aus diesen Sachverhalten wäre, daß der Zeitpfeil sowohl in der klas-

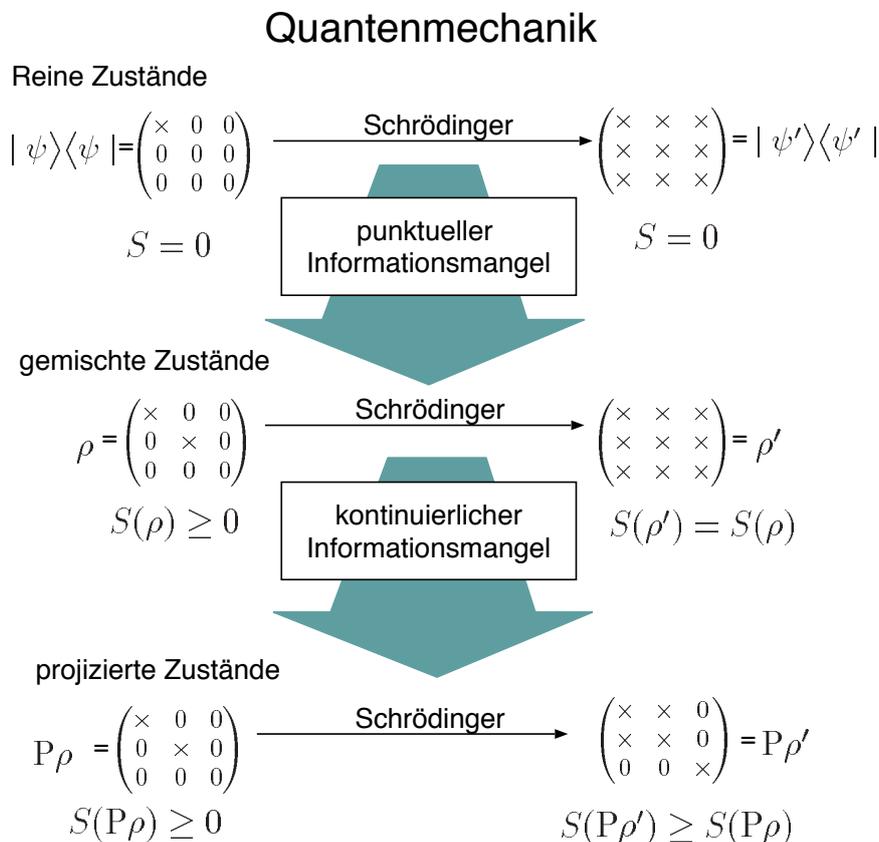


Abbildung 2: Die Situation in der Quantenmechanik: Reine Zustände im Dichtematrix-Formalismus sind Projektoren auf eindimensionale Teilräume und besitzen keinerlei Entropie. Liegen nur unvollständige Informationen vor, wird der Zustand durch ein Gemisch beschrieben, das eine endliche Entropie besitzt. Dieses beginnt mit der Zeit zu “zerfasern”, d.h. es enthält immer mehr verschränkte Zustände. Die Entropie bleibt jedoch durch die unitäre Dynamik erhalten. Vernachlässigt man systematisch unzugängliche Informationen, wird die Dichtematrix auf einen Teilraum projiziert – etwa durch eine Nakajima-Zwanzig-Projektion (siehe Abschnitt 2.6). Die Entropie der projizierten Dichtematrix steigt mit dem Grad ihrer ursprünglichen Zerfaserung, also wächst die Entropie des Systems scheinbar mit der Zeit.

sischen als auch in der Quantenmechanik aus dem Unvermögen resultiert, alle beobachtbaren Größen im Universum zu kennen. Die Zeit *erscheint* uns mithin richtungsgebunden. Einer quantenmechanischen Version des Laplaceschen Dämons, der einen maximalen Satz aller verträglicher Observablen des Universums zugleich mißt, also den exakten quantenmechanischen Zustand des Universums kennt, wäre diese Erscheinung jedoch fremd. Ihm wäre auch in der Quantenwelt "nichts ungewiß, und die Zukunft wie die Vergangenheit wären seinen Augen gegenwärtig". Man mag diese Vision akzeptieren, ihre philosophische Kraft bewundern und sich der Vorstellung widmen, daß die Zeit nur ein Phänomen des menschlichen Bewußtseins ist. Oder man sucht weiterhin, unzufrieden mit dieser Vorstellung, nach einer fundamentalen Begründung des Zeitpfeils.

Die **Brüsseler Schule**, eine Gruppe von renommierten Physikern und Mathematikern um *Ilya Prigogine* (Nobelpreis für Chemie 1977), hat die letztere Möglichkeit gewählt. Sie ist unzufrieden mit der Vorstellung des Zeitpfeils als ein subjektives Phänomen menschlicher Wahrnehmung und hat sich auf die Suche nach seiner fundamentalen Rechtfertigung gemacht. Laut ihrer Veröffentlichungen war diese Suche erfolgreich. Die Brüsseler Schule behauptet, die **intrinsische Irreversibilität** quantenmechanischer Prozesse gefunden zu haben, woraus sich ein Zeitpfeil direkt ableiten ließe. Im Rahmen ihres Modells können sich meßbare Zustände nur in eine Zeitrichtung entwickeln. Es macht daher keinen Sinn, von einer "Umkehrung" dieser Entwicklung zu sprechen. Der Zeitpfeil ließe sich dann in Richtung dieser unumkehrbaren Entwicklung legen. Angesichts der jahrhundertealten Diskussion wäre dies natürlich eine Sensation.

Fazit

- Die fundamentalen Bewegungsgleichungen der Physik sind reversibel und implizieren keinen Zeitpfeil.
- Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik zeichnet zwar eine Zeitrichtung aus, ist aber nicht beweisbar und muß axiomatisch gefordert werden.
- Die statistische und die quantenmechanische Entropie basieren auf der *punktuellen* Unvollständigkeit von Wissen. Beide Entropien bleiben zeitlich konstant, was einer Erhaltung der Information entspricht.
- Die thermodynamische Entropie und die Entropie eines projizierten Quantenzustands steigen mit der Zeit. In beiden Fällen werden Informationen *kontinuierlich* vernachlässigt. Die Entropiesteigerung entspricht einem kontinuierlichen Informationsverlust.
- Für den Laplaceschen Dämon gibt es weder punktuell noch kontinuierlich vernachlässigte Informationen. Für ihn ist die Entropie eine artifizielle Größe, die in seiner Erfahrungswelt nicht vorkommt. Wenn man den Laplaceschen Dämon zum Richter über eine Argumentation macht, so wird er keine Herleitung des Zeitpfeils akzeptieren, die auf dem Begriff der Entropie aufbaut. Um den Dämon zu überzeugen, muß eine Irreversibilität auf der fundamentalen Ebene gefunden werden. Die Brüsseler Schule behauptet, eine solche gefunden zu haben.

Überblick

Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt auf der verallgemeinerten Quantenmechanik der Brüsseler Schule. Diese behauptet, einen Zeitpfeil in Form einer sogenannten “intrinsischen Irreversibilität” auf der fundamentalen Ebene der quantenmechanischen Bewegungsgleichung gefunden zu haben. Wir werden den Ursprung dieser Irreversibilität untersuchen und außerdem die Argumentationen der Brüsseler Schule, die eine Umformulierung des mathematischen Fundaments der Quantenmechanik rechtfertigen sollen.

Abgesehen von seiner metaphysischen Komponente bietet die verallgemeinerte Quantenmechanik der Brüsseler Schule jedoch auch gewisse pragmatische Vorteile. Die verallgemeinerten Spektralzerlegungen erhalten bei gestörten Systemen, die eigentlich als “nicht integrabel” gelten, eine Analytizität im Störparameter. Dies ermöglicht eine Entwicklung von Störreihen, die sonst nicht vollziehbar wäre. Außerdem bietet die verallgemeinerte Quantenmechanik eine kompakte Notation, in der die Dynamik des Systems intuitiv erkennbar und leicht zu approximieren ist. Um den Mechanismus der Instabilität deutlich erkennbar werden zu lassen, wenden wir uns dem einfachsten Modell zu, in dem Instabilität herrscht: dem Friedrichsmodell. Wir werden es mit einem weiteren Modell, dem Wigner-Weisskopf-Modell, in Verbindung bringen. Wir werden untersuchen, unter welchen Annahmen man beide Modelle ineinander überführen kann und damit zeigen, wie das Friedrichsmodell physikalisch zu interpretieren ist. Wir werden danach das Friedrichsmodell mit verschiedenen Methoden behandeln und diese dabei miteinander vergleichen. Insbesondere werden wir mit den Methoden der Standard-Quantenmechanik die entscheidenden Aussagen über die Dynamik des Systems erhalten. Anschließend stellen wir den Formalismus der Brüsseler Schule vor und extrahieren seine wesentlichen Mechanismen. Wir erhalten dabei explizite Konstruktionsvorschriften, die im Prinzip auf jedes quantenmechanische Modell anwendbar sind. Diese Konstruktionsvorschriften bedeuten eine wesentliche Erleichterung in Verständnis und Anwendung der Methoden der Brüsseler Schule und liegen in dieser Form meines Wissens noch nicht vor. Die Anwendung dieser Konstruktionsvorschriften auf das Friedrichsmodell liefern die von der Brüsseler Schule eingeführten verallgemeinerten Vektoren, deren Dynamik wir untersuchen werden. Die verallgemeinerte Quantenmechanik der Brüsseler Schule bedarf eines erweiterten mathematischen Rahmens, der sich auf das Konzept des *Gel'fand-Tripels* stützt. Dieses Konzept wird auch in der Standard-Quantenmechanik bereits seit langer Zeit verwendet, jedoch nicht in der von der Brüsseler Schule favorisierten Form. Um diese Form zu rechtfertigen, gibt es in der Brüsseler Schule zwei Argumentationsrichtungen. Wir werden beide Richtungen genau untersuchen und dabei feststellen, daß die Argumentation der *realistischen Fraktion* eine Herleitung des Zeitpfeils nicht zuläßt. Abschließend werden wir zeigen, daß auch die Argumentation der *fundamentalistischen Fraktion* für eine Herleitung des Zeitpfeils nicht in Frage kommt, weil sie sich auf die Wahl eines speziellen Gel'fand-Tripels stützt, in welchem die verallgemeinerten Vektoren definierbar sind und eine intrinsische Irreversibilität herrscht. Indem wir ein Gel'fand-Tripel konstruieren, welches den Anforderungen

genügt, in welchem jedoch keine intrinsische Irreversibilität herrscht, zeigen wir, daß die Argumentation der fundamentalistischen Fraktion in dieser Form nicht aufrechterhalten werden kann.

Kapitel 1

Irreversibilität, Instabilität und die Richtung der Zeit

In diesem Kapitel wollen wir zunächst untersuchen, wann von einer Herleitung des Zeitpfeils tatsächlich gesprochen werden kann. Wir werden die beiden Fraktionen der Brüsseler Schule und ihre unterschiedliche Argumentation bezüglich einer Herleitung des Zeitpfeils vorstellen. Anschließend wollen wir die Irreversibilität von Prozessen und die Instabilität von Zuständen definieren und zueinander in Beziehung setzen. Wir werden verschiedene Arten von Irreversibilität formulieren und zeigen, wie sich mit ihrer Hilfe ein Zeitpfeil legen läßt. Es stellt sich jedoch heraus, daß dabei die Gefahr besteht, einem Zirkelschluß zu unterliegen. Schließlich zeigen wir, daß die Existenz instabiler Zustände direkt mit einer Nichtintegrabilität des Systems zusammenhängt.

1.1 Logische Tücken

Die entscheidende Frage nach der Richtung der Zeit ist sicherlich folgende: Muß man ihre Existenz axiomatisch fordern oder kann man sie aus einem von ihr unabhängigen axiomatischen Begriffssystem *ableiten*? Diese Frage ist so allgemein und so fundamental, daß sie wahrscheinlich gar nicht lösbar ist. Dagegen ist es immer möglich, anhand eines gegebenen axiomatischen Begriffssystems zu entscheiden, ob hier eine echte Ableitung des Zeitpfeils oder vielmehr ein Zirkelschluß oder gar ein Fehlschluß vorliegt.

Ein Zirkelschluß kann durch eine Tautologie in der Axiomatik verursacht werden. Eine **Tautologie** ist eine Aussage, die nicht mehr Informationen enthält, als bereits in den darin verwendeten Begriffen steckt. Zum Beispiel ist die Aussage "Ein Kreis ist rund" eine Tautologie, weil der Begriff des Kreises bereits seine Rundheit beinhaltet. Um Tautologien zu vermeiden, muß man also die Definition der verwendeten Begriffe sehr genau untersuchen. Ein **Zirkelschluß** hat die Form "Wenn A dann A ", d.h. er schließt auf seine eigenen Voraussetzungen. Im Fall einer vorliegenden Argumentation, die angeblich den Schluß auf einen Zeitpfeil darstellt, müssen wir untersuchen, ob

- a) die fundamentalen Begriffe, auf denen die Argumentation aufgebaut ist, bereits einen Zeitpfeil enthalten (Tautologie),
- b) die Voraussetzungen, die einen Schluß auf den Zeitpfeil ermöglichen, einen solchen zugrundelegen (Zirkelschluß), und ob

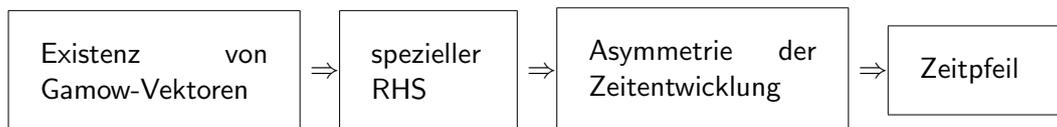
- c) die Argumentationskette an irgendeiner Stelle eine Lücke aufweist, d.h. ein dort gezogener Schluß unzulässig ist (Fehlschluß).

Wenn sich für die von der Brüsseler Schule vorgebrachte Argumentation eine dieser Eigenschaften zeigen läßt, dann ist sie logisch nicht haltbar.

1.2 Die zwei Fraktionen der Brüsseler Schule

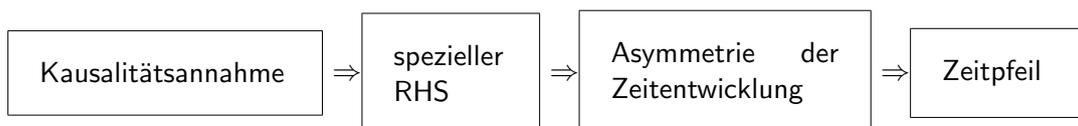
Die Brüsseler Schule spaltet sich offenbar in zwei Fraktionen auf, die sich jeweils in der Axiomatik unterscheiden. Die eine Fraktion, im folgenden als **fundamentalistische Fraktion** bezeichnet, ist der Ansicht, daß sich der Zeitpfeil aus bestimmten mathematischen Verhältnissen ergibt. Die mathematischen Verhältnisse wiederum hängen mit der Existenz verallgemeinerter Vektoren, insbesondere der "Gamow-Vektoren" zusammen, die ergänzend zu den herkömmlichen Hilbertraum-Vektoren zur Systembeschreibung hinzugezogen werden. Sie werden in einem ganz besonderen Zustandsraum angesiedelt, der von dem Hilbertraum der herkömmlichen Quantenmechanik abweicht, nämlich einem speziell zugeschnittenen sogenannten "*rigged Hilbert space (RHS)*". Die Argumentation lautet etwa folgendermaßen: Gamow-Vektoren werden axiomatisch zu quantenmechanischen Zuständen erklärt. Diese Vektoren sind nur definierbar in besagtem RHS. In diesem Zustandsraum herrscht eine Asymmetrie in der zeitlichen Entwicklung der Zustände, welches die Definition eines Zeitpfeils legitimiert. In schematischer Form:

Argumentation der fundamentalistischen Fraktion



Die andere Fraktion, im folgenden als **realistische Fraktion** bezeichnet, will die Verwendung der Gamow-Vektoren nicht axiomatisch fordern (dies geht über den fundamentalen Rahmen der Standard-Quantenmechanik hinaus), sondern begründet die Verwendung des speziellen RHS als Zustandsraum durch Kausalitätsannahmen, die eigentlich auch der Axiomatik der herkömmlichen Quantenmechanik angehören. Diese Fraktion vertritt die Ansicht, daß eine Quantenmechanik, die auf Kausalität beruht, den speziellen RHS inklusive der darin enthaltenen Gamow-Vektoren zur Systembeschreibung verwenden *muß*, mit anderen Worten: daß die herkömmliche Quantenmechanik irrtümlicherweise unvollständig ist. In dieser Unvollständigkeit läge dann der Grund, weshalb die intrinsische Irreversibilität physikalischer Prozesse bisher nicht erkannt und ein Zeitpfeil daher nicht auf fundamentaler Ebene definiert werden konnte. Die Argumentation sieht schematisch folgendermaßen aus:

Argumentation der realistischen Fraktion



Fazit

- Die Existenz des Zeitpfeils muß entweder axiomatisch gefordert oder aus zugrundeliegenden Axiomen hergeleitet werden.
- Das einer Herleitung zugrundeliegende Axiomensystem darf keinen Zeitpfeil enthalten.
- Die Brüsseler Schule teilt sich in zwei Fraktionen mit unterschiedlicher Axiomatik auf:
Die **fundamentalistische Fraktion** postuliert die Existenz nicht herkömmlicher Zustandsvektoren, die **realistische Fraktion** leitet einen nicht herkömmlichen Zustandsraum aus Kausalitätsannahmen her.

1.3 Irreversibilität

Stellen wir uns ein Wasserglas vor, das am Rande einer Tischplatte balanciert (siehe Abbildung 1.1). Diesen Zustand wollen wir mit A bezeichnen. Eine kleine Erschütterung, etwa das Klopfen mit der Hand auf den Tisch, wird das Glas aus seinem labilen Gleichgewicht bringen, es wird nach unten fallen und am Boden in tausend Scherben zerspringen, wobei das verspritzte Wasser in die Ritzen des Bodens einsickern wird. Dieser Zustand soll mit B bezeichnet werden und der Übergang von A nach B im Verlaufe der Zeit, die noch durch keine Richtung ausgezeichnet ist, mit $A \rightarrow B$. Wir werden bis an unser Lebensende warten können: Niemals wird das Wasser aus den Ritzen rinnen und sich mit den Scherben zu einem gefüllten Wasserglas zusammensetzen, um dann auf den Tisch zu hüpfen, wo es in sein labiles Gleichgewicht zurückkehrt. Wenn wir diesen Vorgang mit einer Videokamera festhalten und ihn rückwärts betrachten, erscheint er uns als grotesk. Offenbar handelt es sich um einen *irreversiblen Prozeß*.

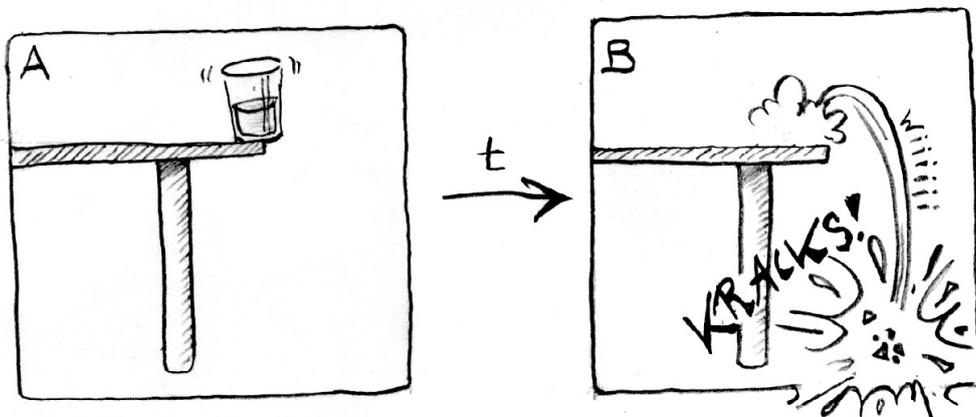


Abbildung 1.1: Ein irreversibler Prozeß?

Definition 1 (echt irreversibler Prozeß) Ein Prozeß $A \rightarrow B$ heißt **echt irreversibel**, wenn seine Umkehrung niemals spontan stattfindet, d.h.

$$A \rightarrow B \quad \text{aber} \quad B \not\rightarrow A \quad (1.1)$$

Nun läßt sich ein Zeitpfeil legen: Findet man zu einem Zeitpunkt den Zustand A und zu einem anderen Zeitpunkt den Zustand B vor, so nennen wir letzteren den *späteren* Zeitpunkt. Bezüglich A liegt B in der *Zukunft*, und bezüglich B liegt A in der *Vergangenheit*. Der Zeitpfeil zeigt von der Zukunft in die Vergangenheit.

Wir haben hier die Irreversibilität eines Prozesses anhand der Häufigkeit des Auftretens seiner Umkehrung definiert. Der obige Prozeß ist deshalb irreversibel, weil seine Umkehrung *nie* auftritt.

In der *Thermodynamik* definiert man irreversible Prozesse anders:

Definition 2 (thermodynamisch irreversibler Prozeß) Ein **thermodynamisch irreversibler Prozeß** kann nicht ohne eine dauerhafte Änderung des Mikrozustandes von Objekt oder Umwelt umgekehrt werden.

Diese dauerhafte Änderung kann als Erinnerungsspeicher dienen, mit dessen Hilfe Vergangenheit und Zukunft im Prinzip voneinander unterscheidbar wären. Wenn wir obigen Prozeß "gewaltsam" umkehren wollen, müßten wir die Scherben mühsam wieder zusammenfügen und das Wasser aus den Bodenritzen zurücksaugen. Auch wenn uns all dies gelingen würde, entstünde bei unseren Mühen zwangsläufig Wärme, die in die Umgebung abgestrahlt werden würde und damit eine dauerhafte Veränderung des Umgebungszustandes verursachte. Die thermodynamische Definition trägt gerade dem Umstand Rechnung, daß ein irreversibler Prozeß eben niemals *spontan* umgekehrt abläuft, sondern *gewaltsam* umgekehrt werden muß. Es handelt sich also letztlich um eine Abwandlung der von uns formulierten Definition von Irreversibilität: Ein Prozeß, dessen Umkehrung niemals spontan abläuft, ist gemäß Definition 1 irreversibel. Also kann er nur gewaltsam umgekehrt werden und ist gemäß Definition 2 thermodynamisch irreversibel.

Der Laplacesche Dämon hat das Schauspiel ebenfalls verfolgt, aber etwas anderes gesehen: Für ihn sind, unter strenger Einhaltung der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen, ein Haufen Atome von einem Ort an einen anderen gewandert. Er fängt nicht an zu lachen, wenn er den Videofilm rückwärts betrachtet: Dort wandern nun dieselben Atome in umgekehrter Abfolge von einem Ort zum andern, wieder unter strenger Einhaltung der Gleichungen.

Warum erscheint uns, im Gegensatz zum Laplaceschen Dämon, der rückwärts abgespielte Film unrealistisch? Die Antwort darauf liefert die statistische Mechanik. Die Wahrscheinlichkeit für das Herunterfallen und Zerspringen eines Wasserglases ist wesentlich höher als für die Umkehrung dieses Vorgangs! Es gibt nicht sehr viele Mikrozustände, die einem Glas Wasser ähneln, das auf dem Tisch steht und gleich herunterfallen wird. Aber es gibt noch *viel* weniger Mikrozustände, die einem Scherbenhaufen und verspritztem Wasser ähneln und bei denen die Bewegung aller beteiligten Teilchen gerade so koordiniert ist, daß sie sich zu einem Wasserglas zusammenfügen, welches von selbst auf den Tisch springt. Je mehr Zustände einer Klasse es gibt, umso häufiger tauchen sie in der Natur auf. Also bemerken wir wesentlich häufiger, wie ein Wasserglas vom Tisch fällt als umgekehrt¹. Die Wahrscheinlichkeit für die Umkehrung des Prozesses ist zwar nicht *exakt* Null, aber so unglaublich winzig, daß man sie ruhigen Gewissens mit Null gleichsetzen kann.

¹Diese umgangssprachliche Argumentation illustriert den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik: Der Makrozustand des Wasserglases auf dem Tisch ist von sehr kleiner Entropie: Nur verhältnismäßig wenig Mikrozustände kommen in Frage, und das durch sie gebildete Volumen bestimmt die Entropie. Es bedarf jedoch eines Zustands von *noch geringerer* Entropie, der sich in diesen Zustand entwickeln kann, da die Entropie bei diesem Vorgang gemäß dem zweiten Hauptsatz steigen muß. Dem entspricht ein noch kleineres Phasenraumvolumen. So unwahrscheinlich also Zustand A bereits ist, jeder ihn verursachende Zustand muß *noch unwahrscheinlicher* sein. Berechnungen zeigen, daß der Unterschied der Wahrscheinlichkeiten tatsächlich gigantisch ist.

In diesem Zusammenhang sollte man das **Poincaré-Wiederkehr-Theorem** erwähnen (siehe dazu [19]), nach welchem es immer eine Zeit τ gibt, nach welcher der Zustand eines (ergodischen) Systems dem Ausgangszustand beliebig nahe kommt. Zwar verbietet ein anderer Satz, daß es sich jemals wieder in *genau demselben* Zustand befindet², aber immerhin ist der wiederkehrte Zustand für ein genügend großes τ makroskopisch nicht mehr vom Ausgangszustand zu unterscheiden. Damals, als dieses Theorem bewiesen wurde, entbrannte eine hitzige Debatte, weil damit ja offenbar eine physikalische Rechtfertigung für die philosophische Vision “Alles kehrt wieder” gefunden wurde. Eine Rechnung von *Boltzmann* (siehe dazu [17] und [25]) zeigte jedoch, daß bereits für ein simples System wie ein ideales Gas, das in der 1 cm^3 großen Ecke einer Schachtel von 1 m^3 Volumen festgehalten und dann freigelassen wird, die Wiederkehrzeit etwa $10^{10^{26}}$ Sekunden beträgt. Nach einer Zeit, die das Alter des Universums um Größenordnungen übertrifft, wird sich das Gas von selbst wieder in der Ecke ansammeln. Wenn die Wiederkehrzeit für so einfache Systeme bereits mehr als astronomisch groß ist, dann wird sie für komplexere Systeme wie Wassergläser auf Tischen oder den Zustand der Neuronen eines Gehirns erst recht sinnlos groß sein. Die philosophische Vision ist damit (aus physikalischer Sicht) vom Tisch.

Systeme allerdings, die verhältnismäßig kleine Wiederkehrzeiten aufweisen, kann man hingegen als “ziemlich reversibel” bezeichnen. Denn wenn A der Ausgangszustand ist, in den das System nach einer nicht zu großen Zeit τ über den Zwischenzustand B ungefähr zurückkehrt, dann ist der Prozeß $A \rightarrow B$ *fast* reversibel (nicht ganz, denn das System kehrt nicht genau zu A zurück).

Mit Hilfe von Wahrscheinlichkeiten läßt sich ebenfalls eine Art von Irreversibilität definieren:

Definition 3 (statistisch irreversibler Prozeß) Ein Prozeß $A \rightarrow B$ heißt **statistisch irreversibel**, wenn seine Umkehrung mit geringerer Wahrscheinlichkeit P stattfindet, d.h.

$$P(A \rightarrow B) > P(B \rightarrow A) \quad (1.2)$$

Ein *echt irreversibler* Prozeß ist ein Spezialfall des statistisch irreversiblen, für den nämlich die Wahrscheinlichkeit der Umkehrung gleich Null ist. Aus der Reversibilität der Bewegungsgleichungen folgt jedoch, daß jeder Prozeß im Prinzip auch umgekehrt ablaufen kann. Also gibt es keine echt irreversiblen, sondern stattdessen *fast* irreversible Prozesse, für die die Umkehrung extrem unwahrscheinlich ist.

Den Laplaceschen Dämon interessiert das alles nicht besonders. Worte wie “ziemlich”, “fast”, “ähnlich” und “wahrscheinlich” langweilen ihn nur. Er streckt sich gähnend auf seiner reversiblen Couch aus und dreht ein wenig die Zeit zurück, weil er der 27. Folge von *Star Trek* nicht genügend Aufmerksamkeit geschenkt hat (verpassen kann er sie ja nicht!).

²Gemeint ist jener Satz, der besagt, daß sich Phasenraum-Trajektorien nicht schneiden.

Fazit

Es lassen sich verschiedene Arten von Irreversibilität definieren:

- Ein **echt irreversibler Prozeß** findet nur in einer Zeitrichtung statt und
- ein **statistisch irreversibler Prozeß** findet mit höherer Wahrscheinlichkeit in einer Zeitrichtung statt.

Jede dieser Definitionen legt einen Zeitpfeil in Richtung der einzig möglichen bzw. wahrscheinlicheren Entwicklung fest.

1.4 Begegnung mit einem Zirkelschluß

Die Wahrscheinlichkeit, die einem Phasenraumpunkt zugeordnet wird, ist genau Null. Das bedeutet nicht, daß er nicht vorliegen kann. Es ist nur unmöglich, ihn exakt zu messen, d.h. ein noch nicht vollständig bestimmter Zustand kann nicht zufällig mit diesem Punkt zusammenfallen. Ein vollständig bestimmter Zustand liegt dagegen mit der Wahrscheinlichkeit Eins an jenem Punkt des Phasenraums. Da es aber kontinuierlich viele Zustände gibt, entspricht dies einer negativ unendlichen Entropie, d.h. es sind unendlich viele Informationen nötig, um diesen Punkt zu lokalisieren. Eine reelle Zahl zeichnet sich durch unendlich viele Nachkommastellen aus, d.h. zu ihrer Kodierung benötigt man unendlich viele Bits. Für einen Laplaceschen Dämon, dem diese unendliche Information zur Verfügung steht, macht eine Wahrscheinlichkeit, den Zustand zu bestimmen, keinen Sinn, denn er *kennt* ihn ja. Aber für jeden realen Informationsverarbeiter (wie z.B. der Mensch) bleiben noch unendlich viele Informationen verborgen, so daß er sich nur mit Wahrscheinlichkeiten dafür begnügen kann, daß eine Messung, die auf seinem begrenzten Wissen aufbaut, zu diesem oder jenem Ergebnis führt.

In der Quantenmechanik ist die Situation noch verschärfter: *Selbst wenn* man den Quantenzustand eines Systems durch Messung eines vollständigen Satzes kommutierender Observablen scharf bestimmen könnte, wäre der Ausgang einer Messung darin nicht enthaltener Observablen ungewiß. Auch dem Laplaceschen Dämon stünden nur Wahrscheinlichkeitsaussagen zur Verfügung, wenn er uns einen Hinweis geben wollte. Der Begriff der Wahrscheinlichkeit ist demnach nur für Prognosen auf der Basis von vorhandenem Wissen sinnvoll. Damit laufen wir allerdings mit der Herleitung eines Zeitpfeils auf der Basis von Begriffen, die Wahrscheinlichkeitsaussagen enthalten, in die Gefahr eines Zirkelschlusses. Die Begriffe "Wissen" und "Prognose" beinhalten bereits einen Zeitpfeil, da Wissen nur über vergangene und eine Prognose nur über zukünftige Ereignisse möglich ist. Für *C. F. von Weizsäcker* ist dieses Konzept sogar die Grundlage der Physik überhaupt [25]. Nach ihm zählt der Zeitpfeil zum axiomatischen Fundament der Physik und ist daher per se nicht herleitbar.

Wir können auf den Wahrscheinlichkeitsbegriff in der klassischen Mechanik nicht verzichten, wenn wir realistisch sein wollen. In der Quantenmechanik aber ist er prinzipiell unvermeidbar. Wenn wir also an dieser Stelle nicht bereits die Herleitung eines Zeitpfeils ad absurdum führen wollen, müssen wir Wahrscheinlichkeiten begrifflich von jeder Zeitrichtung trennen. Definieren wir also:

- a) **Wissen** ist eine Ansammlung von Informationen über den Zustand eines Systems zu beliebigen Zeitpunkten.
- b) **Vermutungen** sind potentielle Informationen, d.h. Aussagen über den Zustand eines Systems zu beliebigen Zeitpunkten, die sich bei Nachprüfen als wahr oder falsch herausstellen.
- c) **Die Wahrscheinlichkeit einer Vermutung** ist ein Maß für die Gewißheit, daß sie durch eine Messung zum vermuteten Zeitpunkt verifiziert wird.
- d) **Übergänge** von einem Zustand in den nächsten können in beide Zeitrichtungen stattfinden und zugeordnete Wahrscheinlichkeiten beziehen sich auf die Vermutung, daß dieser Übergang stattfindet.

Damit liegen die definierten Begriffe zwar in der Zeit, aber beziehen sich nicht auf eine bevorzugte Richtung. Vermutungen können Prognosen, aber auch auch "Epignosen" sein, Wissen kann auch "zukünftige" Ereignisse betreffen, und Übergänge können auch in die "Vergangenheit" stattfinden. Alles in allem: Die Begriffe "Zukunft" und "Vergangenheit" sind auf dieser Ebene bedeutungsleer.

Wenn wir den Begriff der Wahrscheinlichkeit so auffassen, können wir ihn verwenden, um zu Aussagen über die Richtung der Zeit zu gelangen.

Fazit

- Der Begriff der Wahrscheinlichkeit wird im allgemeinen mit einem Zeitpfeil in Verbindung gebracht.
- Wahrscheinlichkeiten sind in der Quantenmechanik prinzipiell unumgänglich.
- Wenn man quantenmechanische Begriffe verwendet, um einen Zeitpfeil herzuleiten, gerät man in die Gefahr eines Zirkelschlusses.
- Um einen Zirkelschluß zu vermeiden, muß der Begriff der Wahrscheinlichkeit unabhängig von der Zeitrichtung formuliert werden.

1.5 Instabilität

Mit dem Begriff der Wahrscheinlichkeit läßt sich nicht nur die Irreversibilität von Prozessen, sondern auch die Instabilität von Zuständen definieren. Dabei kann es jedoch leicht passieren, daß man die Richtung der Zeit unbemerkt in die Definition mit einbezieht: Gewöhnlicherweise betrachten wir einen zum Zeitpunkt $t = 0$ vorliegenden Zustand als *instabil*, wenn die Gewißheit seines Vorliegens zu *späteren* Zeiten $t > 0$ nicht mehr gegeben ist. Die Vokabel "später" setzt aber eine Richtung der Zeit voraus. Um auf sie zu verzichten, müssen wir Instabilität zeitlich symmetrisch definieren. Zustände mit oszillierender Wahrscheinlichkeit wollen wir nicht als instabil betrachten, sondern der Zustand darf vielmehr ab einem bestimmten Zeitpunkt in der Zukunft oder in der Vergangenheit nicht mehr mit Sicherheit vorliegen:

Definition 4 (instabiler Zustand) Wir sagen von einem zum Zeitpunkt $t = 0$ vorliegenden Zustand A , daß er **instabil** ist, wenn es einen Zeitpunkt t_1 gibt, ab welchem er nicht mehr mit Gewißheit vorliegt, d.h. es gibt ein t_1 und Wahrscheinlichkeiten P_t , so daß

$$P_0(A) = 1 \quad \text{aber} \quad P_t(A) < 1 \quad \text{für alle} \quad \begin{cases} t \leq t_1 & \text{falls } t_1 < 0 \\ t \geq t_1 & \text{falls } t_1 > 0 \end{cases} \quad (1.3)$$

Ein solcher Zustand kann somit in beide Zeitrichtungen zerfallen. Dieses Prinzip läßt sich leicht in die Quantenmechanik übertragen. Stellen wir uns ein Atom im angeregten Zustand $|A\rangle$ vor (siehe Abbildung 1.2). Durch eine Wechselwirkung mit einem niedrigeren Energieniveau über ein elektromagnetisches Feld wird es früher oder später in den energetisch günstigeren Zustand $|B\rangle$ übergehen. lautet die obige Definition folgendermaßen:

Definition 5 (instabiler Quantenzustand) Der Quantenzustand $|A\rangle$ ist **instabil**, wenn $|\psi(t)\rangle$ der Zustand des Systems zur Zeit t ist und

$$|\psi(0)\rangle = |A\rangle \quad \text{aber} \quad |\langle A|\psi(t)\rangle|^2 < 1 \quad \text{für alle} \quad \begin{cases} t \leq t_1 & \text{falls } t_1 < 0 \\ t \geq t_1 & \text{falls } t_1 > 0 \end{cases} \quad (1.4)$$

Aus dieser Definition folgt sofort, daß im Falle abgeschlossener Systeme der instabile Zustand $|A\rangle$ kein Eigenzustand des Hamiltonoperators H sein kann. Denn mit $H|A\rangle = E_A|A\rangle$ und dem Zeitpropagator $U(t) = e^{-iHt}$ folgt

$$|\langle A|U(t)|A\rangle|^2 = |e^{-iE_A t}\langle A|A\rangle|^2 = 1 \quad \text{für alle } t \quad . \quad (1.5)$$

Damit erfüllt $|A\rangle$ nicht die Eigenschaften von Definition 5. In der Spektralzerlegung von H tauchen also nur *stabile* Zustände auf! Legen wir nun eine störungstheoretische Zerlegung von H zugrunde, d.h. führen wir einen Störparameter $\lambda \geq 0$, einen ungestörten Hamiltonoperator H_0 und eine Störung W ein und definieren den gestörten Hamiltonoperator H_λ des Systems durch

$$H_\lambda := H_0 + \lambda W \quad . \quad (1.6)$$

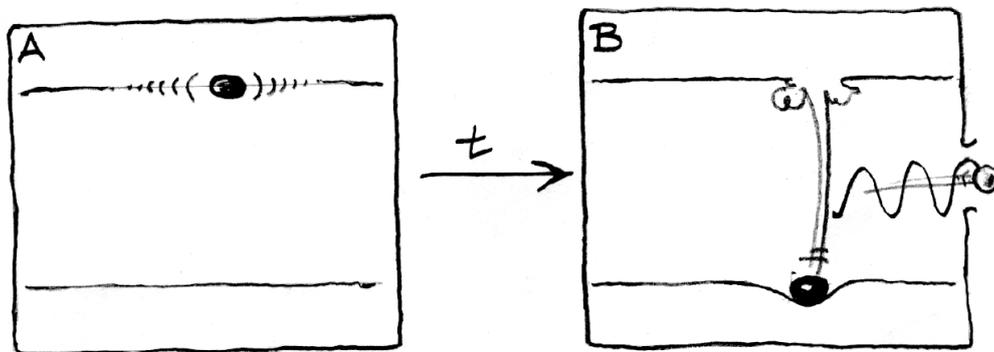


Abbildung 1.2: Ein irreversibler Prozeß?

Für $\lambda = 0$ ist die Spektralzerlegung von H identisch mit derjenigen von H_0 . Sorgt die Störung nun für eine Instabilität von Zuständen aus der ungestörten Spektralzerlegung, dann verschwinden für beliebig kleine Werte von λ diese instabilen Zustände komplett aus der Spektralzerlegung von H . Dies bedeutet, daß die Spektralzerlegung nicht analytisch in λ ist! In diesem Fall lassen sich keine Störreihen in Potenzen von λ entwickeln. Genau diese Eigenschaft zeichnet ein System als **nicht integrabel** aus. Von *Poincaré* wurde gezeigt [19], daß die Nichtintegrabilität eine Folge von Resonanzen ist. Im Falle diskreter Energieniveaus liegt eine Resonanz vor, wenn die Energieniveaus ω_k rational voneinander abhängig sind, d.h. ganze Zahlen n_k existieren, so daß

$$\sum_k n_k \omega_k = 0 \quad .$$

Bei diskret vielen Energieniveaus, ist die Wahrscheinlichkeit des Vorliegens einer Resonanz sehr gering (im Grunde genommen sogar unendlich klein). Ist dagegen das System ein **Large Poincaré System (LPS)**, liegen kontinuierlich viele ω_k vor und Resonanzen sind der Normalfall. Das einfachste System dieser Art ist das *Friedrichsmodell*, in welchem ein diskreter Zustand über eine Wechselwirkung an ein Kontinuum von Zuständen gekoppelt wird, dadurch instabil wird und zerfällt. Ein großer Teil meiner Abhandlung ist der Diskussion des Friedrichsmodells gewidmet, weil anhand dieses einfachen Modells alle zentralen Begriffe, die zur Neuformulierung der Quantenmechanik durch die Brüsseler Schule gehören, beleuchtet werden können.

Kapitel 2

Das Friedrichsmodell und das Wigner-Weisskopf-Modell

In diesem Teil werden zwei Modelle vorgestellt: Das *Friedrichsmodell* und das *Wigner-Weisskopf-Modell*. Das Friedrichsmodell wurde 1948 von *K. Friedrichs* formuliert [8] und stellt eigentlich ein rein mathematisches Modell dar. Um die Verbindung zur Physik herzustellen, und damit das Friedrichsmodell physikalisch interpretierbar zu machen, wird im Anschluß das Wigner-Weisskopf-Modell vorgestellt, welches von *E. Wigner* und *V. Weisskopf* 1930 formuliert wurde [26]. Es zeigt sich, daß unter bestimmten vereinfachenden Annahmen das zugrundeliegende mikroskopische Modell, welches ein N -Niveau-System im quantisierten Strahlungsfeld beschreibt, in das Wigner-Weisskopf-Modell und schließlich in das Friedrichsmodell überführbar ist.

Zuerst werden wir das Friedrichsmodell vorstellen, in das wir das physikalische Ausgangsmodell überführen wollen. Wir werden dann das mikroskopische Modell entwickeln, anschließend durch einige vereinfachende Annahmen, die im wesentlichen in der *rotating wave approximation* bestehen, in das Wigner-Weisskopf-Modell überführen und schließlich, unter weiteren vereinfachenden Annahmen und der Beschränkung auf ein Zwei-Niveau-System in das Friedrichsmodell transformieren, welches als Ausgangsmodell für die anschließende mathematische Diskussion dienen wird. Schematisch gehen wir also folgendermaßen vor:



2.1 Definition des Friedrichsmodells

Das Friedrichsmodell bildet das Zentrum unserer Diskussionen. Es ist das einfachste Modell der Kopplung von diskreten an kontinuierliche Zustände. Hier wird ein einzelner diskreter Zustand über eine Wechselwirkung an ein Kontinuum von Zuständen gekoppelt. Die qualitativen Ergebnisse der genaueren Untersuchung dieses Modells sind von fundamentaler Bedeutung für die Dynamik instabiler Zustände und haben sogar die Diskussion um eine mögliche Erklärung der Richtung des Zeitpfeils neu entfacht. Die Vertreter der Brüssel-Schule sehen in der Existenz bestimmter verallgemeinerter Eigenvektoren des Gesamt-Hamiltonoperators zu komplexen Eigenwerten die Manifestation intrinsisch irreversibler Prozesse auf mikroskopischer Ebene. In

welchem Rahmen diese Eigenvektoren überhaupt formulierbar sind, wird uns dann im nächsten Teil dieser Abhandlung interessieren. Im Anschluß werden wir das vorliegende mikroskopische Modell in das Wigner-Weisskopf-Modell und danach in das Friedrichsmodell überführen, um dann die Aussagen, die auf der Basis dieser Modelle formulierbar sind, miteinander vergleichen zu können.

Der Zustandsraum \mathcal{H} des Friedrichsmodells ist gegeben durch

$$\mathcal{H} = \mathbb{C} \oplus L^2(\mathbb{R}_+) \quad . \quad (2.1)$$

Dabei ist $L^2(\mathbb{R}_+)$ der Raum der quadratintegriblen Funktionen über der positiven Halbachse. Die vollständige und orthonormale Basis lautet

$$B = \{|1\rangle, |\omega\rangle\}_{\omega \in \mathbb{R}_+} \quad , \quad (2.2)$$

mit den Orthonormalitätsrelationen

$$\mathbb{1} = |1\rangle\langle 1| + \int_0^\infty d\omega |\omega\rangle\langle \omega| \quad , \quad (2.3)$$

$$\langle 1|1\rangle = 1, \quad \langle 1|\omega\rangle = 0 \quad , \quad (2.4)$$

$$\langle \omega|\omega'\rangle = \delta(\omega - \omega') \quad . \quad (2.5)$$

In der Basiszerlegung von B lauten die Hamiltonoperatoren des Systems

$$H = H_0 + W \quad , \quad (2.6)$$

$$H_0 = \omega_1 |1\rangle\langle 1| + \int_0^\infty d\omega \omega |\omega\rangle\langle \omega| \quad , \quad (2.7)$$

$$W = \int_0^\infty d\omega \left\{ W(\omega) |\omega\rangle\langle 1| + W^*(\omega) |1\rangle\langle \omega| \right\} \quad . \quad (2.8)$$

Das Friedrichsmodell birgt gewisse Überraschungen bezüglich der Spektralzerlegung des Gesamt-Hamiltonoperators. Wir werden später ausführlich darauf eingehen.

2.2 Mikroskopisches Modell

Ein Atom befinde sich in einem Zustand A und habe die Möglichkeit, in verschiedene Zustände B, C, \dots überzugehen. Das Atom ist umgeben vom Vakuum eines Strahlungsfeldes, mit dem es über eine elektromagnetische Wechselwirkung gekoppelt ist.

Falls der Endzustand energetisch niedriger liegt als der Ausgangszustand, erwarten wir die Emission eines Photons der entsprechenden Differenzenergie (siehe Abbildung 2.1), im umgekehrten Falle die Absorption eines solchen Photons. Dabei ergibt sich allerdings eine gewisse Verschmierung der Emissions- bzw. Absorptionsenergie, welche experimentell als Linienbreite ΔE nachweisbar sind. Diese Linienbreite hängt eng zusammen mit der mittleren Lebensdauer τ des angeregten Zustands A und ist proportional zur Zerfallskonstante γ , die den annähernd exponentiellen Abfall der Aufenthaltswahrscheinlichkeit von A , der Überlebensamplitude, regelt.

Zustandsraum der Teilsysteme Ein Atom mit einem Elektron in der äußeren Schale habe die Möglichkeit, sich in N diskret voneinander getrennten Zuständen $|n\rangle$ zu befinden. Sein Zustandsraum sei die komplexe lineare Hülle (Lin) dieser Zustandsvektoren

$$\mathcal{H}_A = \text{Lin}\{|n\rangle\}_n \quad , \quad (2.9)$$

$$\text{mit} \quad H_A |n\rangle = \omega_n |n\rangle \quad . \quad (2.10)$$

Die ω_n müssen nicht verschieden voneinander sein, womit wir also den Fall entarteter Energieniveaus miteinschließen.

Der Zustand des elektromagnetischen Feldes wird durch die Fockzustände beschrieben. Dazu genügt es, eine eindeutige Abbildung N zu kennen, die jeder Mode des Feldes eine natürliche Zahl, die Besetzungszahl dieser Mode, zuordnet. Eine Mode des Feldes ist durch den Wellenvektor \mathbf{k} , welcher Ausbreitungsrichtung und Wellenlänge des ausgesandten Lichtes beschreibt, und den Polarisationsvektor ϵ festgelegt, welcher die Orientierung der Schwingungsebene im Raume kennzeichnet. Da aus den Maxwell'schen Gleichungen die Beziehung $\mathbf{k} \cdot \epsilon = 0$ folgt, liegt die Schwingungsebene immer senkrecht zur Ausbreitungsrichtung. Wir haben damit nur 2 linear unabhängige Komponenten des Polarisationsvektors. Die Quantisierung erfolgt entlang dieser (orthogonalisierten) Komponenten. Damit läßt sich eine Mode des Feldes durch das Paar (\mathbf{k}, ϵ) charakterisieren, wobei \mathbf{k} Element des kartesischen Raumes und ϵ eine von zwei Zahlen (z.B. $\epsilon \in \{1, 2\}$) ist. Der Polarisationsindex ϵ dient als Index für die in den physikalischen Formeln zu verwendenden Einheitsvektoren e_ϵ , die die beiden Komponenten des Polarisationsvektors angeben. Sei also N eine solche Quantisierungsabbildung:

$$N : \mathbb{R}^3 \times \{1, 2\} \rightarrow \mathbb{N} \quad , \\ (\mathbf{k}, \epsilon) \mapsto N_{\mathbf{k}, \epsilon} \quad . \quad (2.11)$$

Zur weiteren Vereinfachung definieren wir eine Variable λ , welche als Repräsentant für das Paar (\mathbf{k}, ϵ) steht:

$$\lambda := (\mathbf{k}, \epsilon) \quad . \quad (2.12)$$

Jede der Abbildungen $N_{\mathbf{k}, \epsilon} \equiv N_\lambda$ repräsentiert einen möglichen Zustand des Feldes. Die Null-Abbildung $N_\lambda \equiv 0$ nennen wir den *Vakuuzustand*. Wir ordnen nun noch diesen Abbildungen jeweils einen Basisvektor der orthogonalen Basis eines (unendlichdimensionalen) Vektorraumes zu,

$$N_\lambda \mapsto |N_\lambda\rangle \quad , \quad (2.13)$$

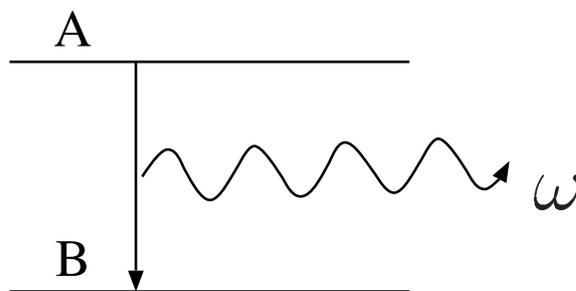


Abbildung 2.1: Ein Atom springt von einem Zustand A in einen niedrigeren Zustand B und emittiert dabei ein Photon mit der Differenzenergie beider Niveaus.

und indem wir die Familie aller so konstruierten Abbildungen mit dem Index α parametrisieren, erhalten wir mit der Menge der zugeordneten Vektoren die Basis B_F des Fockraumes \mathcal{H}_F , welcher die Gesamtheit der möglichen Feldzustände darstellt:

$$B_F = \{|N^\alpha\rangle\}_\alpha \quad \mathcal{H}_F = \text{Lin } B_F \equiv \text{Lin}\{|N^\alpha\rangle\}_\alpha \quad . \quad (2.14)$$

Solange wir den Wellenvektor \mathbf{k} als *diskrete* Größe behandeln, gelingt uns die Darstellung

$$|N^\alpha\rangle = |\dots, N_\lambda^\alpha, \dots\rangle \quad , \quad (2.15)$$

mit N_λ^α an der λ -ten Stelle. Im *kontinuierlichen* Fall ist eine solche Veranschaulichung nicht möglich (es gibt dann keine "λ-te Stelle"), wengleich der Zustand auch dann auf eindeutige Weise durch die Abbildung N^α gekennzeichnet wird.

Zustandsraum des Gesamtsystems Der Zustandsraum des Gesamtsystems Atom+Feld ist wie üblich durch das Tensorprodukt der beiden einzelnen Zustandsräume gegeben:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_F \quad . \quad (2.16)$$

Operatoren der Teilsysteme Der Hamiltonoperator des Atoms setzt sich aus den Projektoren auf seine Eigenvektoren zusammen, gewichtet mit den jeweiligen Eigenenergien:

$$H_A = \sum_n \omega_n |n\rangle\langle n| \quad . \quad (2.17)$$

Wir haben hier, im Hinblick auf spätere Renormierung, von Anfang an die Nullpunktenergie $\frac{1}{2}\nu_\lambda$ jeder Mode fortgelassen. Außerdem wählen wir die physikalischen Einheiten so, daß $\hbar = 1$ gilt. Der Hamiltonoperator des Feldes besteht ganz analog aus ebensolchen Projektoren auf seine Eigenvektoren, gewichtet mit den Eigenenergien, die hier nur vom Wellenvektor \mathbf{k} , nicht aber von der Polarisation ϵ abhängen:

$$H_F = \sum_\alpha \Omega^\alpha |N^\alpha\rangle\langle N^\alpha| \quad , \quad (2.18)$$

$$\Omega^\alpha = \sum_\lambda N_\lambda^\alpha \nu_\lambda \quad , \quad (2.19)$$

wobei

$$\nu_\lambda = \nu_{\mathbf{k}} \quad . \quad (2.20)$$

Nun schreiben wir obige Formel unter Verwendung des Vernichters b_λ der Mode λ

$$b_\lambda |\dots, N_\lambda^\alpha, \dots\rangle = \sqrt{N_\lambda^\alpha} |\dots, N_\lambda^\alpha - 1, \dots\rangle \quad , \quad (2.21)$$

sowie seines Adjungierten, dem Erzeuger b_λ^\dagger

$$b_\lambda^\dagger |\dots, N_\lambda^\alpha, \dots\rangle = \sqrt{N_\lambda^\alpha + 1} |\dots, N_\lambda^\alpha + 1, \dots\rangle \quad . \quad (2.22)$$

So bringen wir den Hamiltonoperator des Feldes in die Form

$$H_F = \sum_\lambda \nu_\lambda b_\lambda^\dagger b_\lambda \quad . \quad (2.23)$$

Der Operator $n_\lambda \equiv b_\lambda^\dagger b_\lambda$ ist der Besetzungszahloperator der Mode λ , so daß wir wegen

$$b_\lambda^\dagger b_\lambda |N^\alpha\rangle = N_\lambda^\alpha |N^\alpha\rangle \quad (2.24)$$

gerade die erwünschte Beziehung

$$H_F |N^\alpha\rangle = \sum_\lambda \nu_\lambda b_\lambda^\dagger b_\lambda |N^\alpha\rangle = \sum_\lambda N_\lambda^\alpha \nu_\lambda |N^\alpha\rangle = \Omega^\alpha |N^\alpha\rangle \quad (2.25)$$

erhalten.

Operatoren des Gesamtsystems Nachdem wir die beiden Teilsysteme isoliert voneinander beschreiben können, bleibt zu klären, wie das Potential der Wechselwirkung zwischen Atom und Feld im Gesamtsystem beschaffen ist. Der ursprüngliche Ausdruck

$$W = -\frac{e}{c} \int d^3x \mathbf{j}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}) \quad , \quad (2.26)$$

wobei \mathbf{j} die Stromdichte, \mathbf{A} das Vektorpotential, e die Elementarladung und c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum kennzeichnet, läßt sich im Falle der Coulomb-Eichung, in welcher das Skalarfeld ϕ sowie die Divergenz des Vektorpotentials \mathbf{A} auf Null geeicht wird ($\phi = 0, \nabla \cdot \mathbf{A} = 0$), durch die Formel

$$W = -\frac{e}{m} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2 \quad (2.27)$$

ersetzen, wobei m die Elektronenmasse ist. Noch etwas einfacher läßt sich die Wechselwirkung in der Dipolnäherung formulieren, in welcher man nur das Dipolmoment \mathbf{D} des Atoms betrachtet und alle höheren Momente (Quadrupolmoment etc.) vernachlässigt, sowie das elektrische Feld $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ alleine im Schwerpunkt \mathbf{r}_0 des Atoms auswertet, den wir hier zur weiteren Vereinfachung im Ursprung plazieren ($\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{0})$). Damit gelingt die Formulierung

$$W = -\mathbf{D} \cdot \mathbf{E} \quad . \quad (2.28)$$

Das Atom hat ein einziges Elektron in der relativen Position $\mathbf{r}_{rel} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_0 = \mathbf{r} - \mathbf{0}$ zum Schwerpunkt des Atoms, damit ist der Dipoloperator gegeben durch

$$\mathbf{D} = e \mathbf{r} \quad . \quad (2.29)$$

Das am Ursprung quantisierte elektrische Feld lautet

$$\mathbf{E} = \sum_{\mathbf{k}, \epsilon} \sqrt{\frac{\nu_{\mathbf{k}}}{\epsilon_0 V}} \mathbf{e}_\epsilon (b_{\mathbf{k}, \epsilon} + b_{\mathbf{k}, \epsilon}^\dagger) \quad , \quad (2.30)$$

wobei V das Quantisierungsvolumen ist. Insgesamt finden wir in der Dipolnäherung für den Operator der Wechselwirkung

$$W = -\sum_{\mathbf{k}, \epsilon} \sqrt{\frac{\nu_{\mathbf{k}}}{\epsilon_0 V}} (\mathbf{D} \cdot \mathbf{e}_\epsilon) (b_{\mathbf{k}, \epsilon} + b_{\mathbf{k}, \epsilon}^\dagger) \quad . \quad (2.31)$$

2.3 Überführung in das Wigner-Weisskopf-Modell

Nun werden wir aus dem vorliegenden physikalischen Ausgangsmodell auf zwei Wegen zum Wigner-Weisskopf-Modell gelangen. Dieses Modell ist von zentraler Bedeutung in der Quantenoptik und förderte ein weiteres Mal die eigentümliche Natur von Quantenphänomenen zutage. Als Konsequenz dieses Modells hängt nämlich (anders als bei klassischen Oszillatoren) die natürliche Linienbreite emittierten Lichtes nicht bloß von Ausgangs- und Endzustand ab, sondern die reine *Anwesenheit* anderer Energieniveaus trägt zu einer "Verbreiterung" der Energieniveaus und damit der Linienbreite bei. Ebenso interessant in der Veröffentlichung von 1930 ist die explizite Berechnung der Zerfallskonstanten γ , welche mit der mittleren Lebensdauer τ des angeregten Zustands über

$$\gamma\tau = 1 \quad (2.32)$$

zusammenhängt und proportional zur Linienbreite ist. Wir wollen uns allerdings nur mit der 2-Niveau-Variante des Modells befassen, weil dann eine Überführung ins Friedrichsmodell möglich wird. Die Berechnung der Zerfallskonstanten kann dann am Friedrichsmodell durchgeführt und in das Wigner-Weisskopf-Modell eines 2-Niveau-Atoms übersetzt werden, so daß die mathematischen Sachverhalte des abstrakten Friedrichsmodells physikalisch interpretierbar werden.

Wigner-Weisskopf-Näherung Sehen wir einmal von der expliziten Form der Wechselwirkung ab und betrachten W als irgendeinen Operator, der Feld- und Atomzuständen aneinander koppelt. Die Wigner-Weisskopf-Näherung besteht nun in folgenden Annahmen:

- 1) Zum Zeitpunkt $t = 0$ befindet sich das Atom in einem angeregten Zustand $|A\rangle$ und im Feld herrscht das Vakuum $|0\rangle$.
- 2) Folgende Vorgänge zu einem späteren Zeitpunkt t , die alle extrem unwahrscheinlich sind, werden vernachlässigt:
 - Das System hat seinen Zustand nicht gewechselt, im Feld ist aber dennoch ein Photon der Mode λ zu finden (abnormes Licht).
 - Das System geht in einen Zustand $|B\rangle$ über, jedoch ohne ein Photon dabei zu emittieren.
 - Ein im Feld vorhandenes Photon ändert spontan seine Mode, ohne daß sich der Zustand des Atoms dabei ändert.
 - Das Atom wechselt in einen Zustand $|B\rangle$, im Feld entstehen aber mehrere Photonen, deren Energiesumme der energetischen Differenz der Niveaus A und B entspricht (ebenfalls abnormes Licht).
- 3) Sprünge in niedrigere Zustände sind stets von Emissionen, solche in höhere von Absorptionen begleitet.

Die obigen Annahmen entsprechen der Einschränkung an die Wechselwirkung, nur Einphotonenzustände an das Vakuum (und nicht aneinander) zu koppeln, und zwar in der Weise, daß energetisch niedrigere Atomzustände plus Photon an energetisch höhere plus Vakuum koppeln. Damit können wir den Operator der Wechselwirkung mittels

$$W = \sum_{n < m} \sum_{\lambda} w_{\lambda}^{nm} |n; 1_{\lambda}\rangle \langle m; 0| + (w_{\lambda}^{nm})^* |n; 1_{\lambda}\rangle \langle m; 0| \quad (2.33)$$

ausdrücken. Die Summe erstreckt sich über alle Paare (n, m) bei denen $n > m$ ist. Die Kopplungskonstanten sind definiert durch

$$w_\lambda^{nm} = \langle n; 1_\lambda | W | m; 0 \rangle \quad (2.34)$$

und wir notieren die Einphotonenzustände durch

$$|1_\lambda\rangle \equiv |0, \dots, 1, 0, \dots\rangle \quad (1 \text{ an der } \lambda\text{-ten Stelle, sonst } 0) \quad . \quad (2.35)$$

Einen Operator, der sich in der obigen Form schreiben läßt, wollen wir als **Wigner-Weisskopf-Operator** bezeichnen. Er sorgt dafür, daß bei dem gegebenen Anfangszustand die oben ausgeschlossenen Zustände tatsächlich für alle Zeiten ausgeschlossen sind. Damit läßt sich eine Verkleinerung des Zustandsraums erreichen, um dem Friedrichsmodell näherzukommen.

Dipol- und RWA-Näherung Wir werden nun aus dem Wechselwirkungsoperator W einen Wigner-Weisskopf-Operator machen, indem wir die Dipol- und RWA-Näherung verwenden.

Sei der Wechselwirkungsoperator in der Dipolnäherung durch

$$W = -\mathbf{D} \cdot \mathbf{E} \quad (2.36)$$

gegeben. Nun zerlegen wir den Dipoloperator in der Energiebasis des Atoms

$$\mathbf{D} = \sum_{n,m} \mathbf{D}_{nm} |n\rangle \langle m| \quad , \quad (2.37)$$

$$\text{mit} \quad \mathbf{D}_{nm} = \langle n | \mathbf{D} | m \rangle \quad . \quad (2.38)$$

Dies verkomplizieren wir vorübergehend durch Einführung von Sprungoperatoren

$$a_{nm} = |n\rangle \langle m| \quad , \quad (2.39)$$

und schreiben damit

$$\mathbf{D} = \sum_{n \leq m} [\mathbf{D}_{nm} a_{nm} + \mathbf{D}_{nm}^* a_{nm}^\dagger - \delta_{nm} \mathbf{D}_{nm} a_{nm}] \quad . \quad (2.40)$$

Die Summe wird über alle Paare (n, m) erstreckt, bei denen $n \leq m$ ist. Im Falle $n = m$ kommt ein Summand doppelt vor, was durch das Kronecker- δ korrigiert wird. Indem wir nun die Kopplungskonstanten

$$g_\lambda^{nm} = -\sqrt{\frac{\nu \mathbf{k}}{V \epsilon_0}} (\mathbf{D}_{nm} \cdot \mathbf{e}_\epsilon) \quad \lambda = (\mathbf{k}, \epsilon) \quad (2.41)$$

definieren, erhalten wir mit (2.31) die Formel

$$W = \sum_{n \leq m} \sum_{\lambda} (g_\lambda^{nm} a_{nm} + g_\lambda^{nm*} a_{nm}^\dagger - \delta_{nm} g_\lambda^{nm} a_{nn}) (b_\lambda + b_\lambda^\dagger) \quad . \quad (2.42)$$

Wenn wir die Faktoren in der Summe ausmultiplizieren, finden wir Ausdrücke $a_{nm} b_\lambda^\dagger$, die den Atomübergang $m \rightarrow n$ bei gleichzeitiger Erzeugung eines Photons der Mode λ beschreiben. Die Ausdrücke $a_{nm}^\dagger b_\lambda$ repräsentieren den umgekehrten Prozeß. Weil stets $n \leq m$, ist damit die

Energie (bei geeigneter Wahl der Mode des emittierten bzw. absorbierten Photons) innerhalb der erlaubten Unschärfe erhalten. Die Ausdrücke $a_{nm}b_\lambda$ und $a_{nm}^\dagger b_\lambda^\dagger$ hingegen verletzen den Energiesatz in extremer Weise, da in diesen Fällen in beiden Subsystemen Energie verlorengeht bzw. gewonnen wird. Diese Vorgänge sind extrem unwahrscheinlich und werden in der *rotating wave approximation (RWA)* vernachlässigt, ebenso die Vorgänge, bei denen Licht emittiert bzw. absorbiert wird, ohne daß das Atom seinen Zustand wechselt (dies sind die Fälle $n = m$). Die Vernachlässigung solchen "abnormen Lichtes" wird auch bei Wigner und Weisskopf gemacht. Wir gelangen damit zu folgendem Ausdruck

$$W = \sum_{n < m} \sum_{\lambda} \left\{ g_{\lambda}^{nm} a_{nm} b_{\mathbf{k}, \epsilon}^\dagger + g_{\lambda}^{nm*} a_{nm}^\dagger b_{\lambda} \right\} . \quad (2.43)$$

Dies ist, wie wir uns durch einen kurzen Blick auf den vorangehenden Abschnitt überzeugen, ein Wigner-Weisskopf-Operator. Die plausiblen Annahmen von Wigner und Weisskopf entsprechen also der RWA-Näherung, welche im optischen Bereich eine sehr gute Approximation darstellt.

2.4 Überführung in das Friedrichsmodell

Der Wigner-Weisskopf-Operator, den wir im letzten Abschnitt aus dem Wechselwirkungsoperator in Dipol- und RWA-Näherung gewonnen haben, ist von besonderem Interesse, weil er sich bei Beschränkung auf ein 2-Niveau-Atom in den Wechselwirkungsoperator des Friedrichsmodells überführen läßt.

Beschränkung auf 2-Niveau-Atom Wir wollen die Dynamik eines Atoms bestimmen, welches sich in zwei Energieniveaus A und B aufhalten kann, von welchen A das höhere der beiden sei. Die Summe über die Paare ($n < m$) entfällt, weil es nur ein Paar ($B < A$) gibt. Mit den Vereinfachungen

$$g_{\lambda} = g_{\lambda}^{BA} , \quad a = a_{BA} , \quad (2.44)$$

$$g_{\lambda} = -\sqrt{\frac{\nu_{\mathbf{k}}}{V \epsilon_0}} (\mathbf{D}_{AB} \cdot \mathbf{e}_{\epsilon}) , \quad (2.45)$$

$$\mathbf{D}_{AB} = \langle B | \mathbf{D} | A \rangle , \quad (2.46)$$

nimmt der Wechselwirkungsoperator die Form

$$W = \sum_{\lambda} \left\{ g_{\lambda} a b_{\lambda}^\dagger + g_{\lambda}^* a^\dagger b_{\lambda} \right\} \quad (2.47)$$

an.

Verkleinerung des Zustandsraums In gewissem Sinne ist der Zustandsraum des Gesamtsystems noch zu groß. Nehmen wir wie Wigner und Weisskopf an, zum Zeitpunkt $t = 0$ sei das Atom im angeregten Zustand A von einem Vakuum umgeben, d.h. der Anfangszustand des Systems laute

$$|\psi(0)\rangle = |A\rangle \otimes |0\rangle \equiv |A; 0\rangle . \quad (2.48)$$

Die in der RWA einzig erlaubten Übergänge sind solche, bei denen das Atom in den Zustand B wechselt und dabei ein Photon der Mode λ emittiert. Anschließend ist nur der umgekehrte Vorgang erlaubt: Ein Photon wird vernichtet und das Atom dafür von B in den Zustand A gehoben. Alles in allem sind die Zustände, die das Gesamtsystem überhaupt annehmen darf, jene, bei denen entweder das Atom angeregt ist und ansonsten Vakuum herrscht, oder bei denen das Atom im Grundzustand verweilt, während sich dafür ein Photon im Feld befindet. Das Feld kann nur den Vakuumzustand oder Ein-Photonen-Zustände annehmen. Der effektive Zustandsraum des Gesamtsystems läßt sich auf

$$\mathcal{H} = \text{Lin}\{|A; 0\rangle, |B; 1_\lambda\rangle\}_\lambda \quad (2.49)$$

reduzieren. Wir erlauben uns jetzt eine weitere Vereinfachung der Notation. Wir erklären die Entsprechungen

$$|1\rangle := |A; 0\rangle \quad , \quad (2.50)$$

$$|\lambda\rangle := |B; 1_\lambda\rangle \quad . \quad (2.51)$$

Damit sind die Sprungoperatoren

$$ab_\lambda^\dagger = |\lambda\rangle\langle 1| \quad , \quad (2.52)$$

$$a^\dagger b_\lambda = |1\rangle\langle \lambda| \quad , \quad (2.53)$$

und der Zustandsraum des Gesamtsystems ist gegeben durch

$$\mathcal{H} = \text{Lin}\{|1\rangle, |\lambda\rangle\}_\lambda = \mathbb{C} \oplus (L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2) \quad . \quad (2.54)$$

Der Raum \mathbb{C} enthält nur einen einzigen Zustand, nämlich $|1\rangle \equiv |A; 0\rangle$, der Raum L^2 umfaßt die Einphotonenzustände des Feldes, bei denen jeweils die Mode λ einfach besetzt ist. Der Wechselwirkungsoperator lautet in dieser Darstellung

$$W = \sum_\lambda \left\{ g_\lambda |\lambda\rangle\langle 1| + g_\lambda^* |1\rangle\langle \lambda| \right\} \quad . \quad (2.55)$$

Die Matrixelemente von W fallen zusammen mit den Kopplungskonstanten des Atoms im Grundzustand an die Moden im Einphotonenzustand. Ein Übergang $|1\rangle \rightarrow |\lambda\rangle$ entspricht dem Sprung des Atoms in den Grundzustand bei Emission eines Photons der Mode λ .

Übergang zum Kontinuum Nun wenden wir uns der Tatsache zu, daß statt einer diskreten Anzahl von Moden eigentlich ein Kontinuum vorliegt. Der Übergang der Summation in eine Integration im Quantisierungsvolumen V wird geregelt durch die Ersetzung

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \quad . \quad (2.56)$$

Außerdem wollen wir eine Transformation der kartesischen in Polarkoordinaten durchführen

$$\mathbf{k} \rightarrow \left(\frac{\nu}{c}, \varphi, \vartheta \right) \quad , \quad (2.57)$$

unter Ausnutzung von $|\mathbf{k}| = \frac{\nu}{c}$. Das Volumenelement transformiert sich gemäß

$$\int d^3k \rightarrow \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^\infty d\nu \frac{\nu^2}{c^3} \quad . \quad (2.58)$$

In der Kopplungskonstanten $g_{\mathbf{k},\epsilon}$ steckt das Skalarprodukt zwischen Dipolmoment und Polarisationsachse. Legen wir nun das Koordinatensystem so, daß das Dipolmoment \mathbf{D} parallel zur z -Achse verläuft, und wählen wir ein Paar orthogonaler Polarisationsachsen ($\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$), bei denen \mathbf{e}_1 parallel zur y -Achse liegt, dann sehen wir, daß dieser Anteil auch senkrecht zum Dipolmoment steht und somit auf das Skalarprodukt keinerlei Einfluß hat. Übrig bleibt \mathbf{e}_2 und wir sehen, daß der eingeschlossene Winkel zur z -Achse gerade der um 90° verminderte Winkel ϑ zwischen z -Achse und Wellenvektor \mathbf{k} ist (Abb. 2.2). Wegen $\cos(\vartheta - 90^\circ) = \sin \vartheta$ gilt demnach die Beziehung

$$g_{\mathbf{k},\epsilon} = -\sqrt{\frac{\nu_{\mathbf{k}}}{V\epsilon_0}} \sin \vartheta D_{AB} \quad , \quad (2.59)$$

$$\text{wobei} \quad D_{AB} := \langle B | \sqrt{\mathbf{D}^2} | A \rangle \quad . \quad (2.60)$$

Durch diese Überlegungen gelangen wir zu

$$W = \int_0^\pi d\vartheta \int_0^\infty \rho(\nu, \vartheta) \left\{ W(\nu, \vartheta) |\nu, \vartheta\rangle \langle 1| + W^*(\nu, \vartheta) |1\rangle \langle \nu, \vartheta| \right\} \quad . \quad (2.61)$$

Dabei ist die Zustandsdichte der Moden bezüglich Frequenz ν und Winkel ϑ zur z -Achse durch

$$\rho(\nu, \vartheta) = \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{\nu^2}{c^3} \sin \vartheta \quad , \quad (2.62)$$

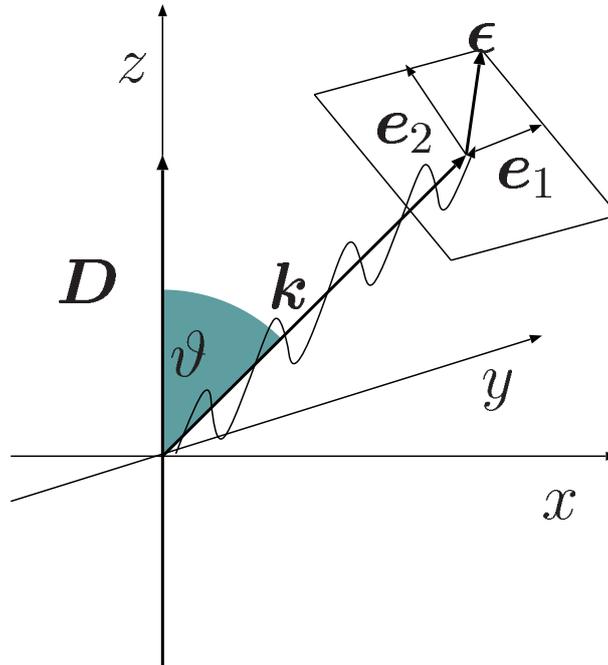


Abbildung 2.2: Dipolnäherung: Ein punktförmiges Atom im Ursprung emittiert ein Photon. Das Dipolmoment des Atoms ist parallel zur z -Achse, der Wellenvektor \mathbf{k} zeigt in die Ausbreitungsrichtung, der dazu senkrechte Polarisationsvektor ϵ wird in die Anteile \mathbf{e}_1 und \mathbf{e}_2 aufgespalten, von denen \mathbf{e}_1 parallel zur y -Achse, \mathbf{e}_2 parallel zur z -Achse verläuft. \mathbf{e}_1 steht senkrecht zum Dipolmoment und hat daher auf das Skalarprodukt $\mathbf{D} \cdot \epsilon$ in der Wechselwirkung keinen Einfluß.

die Matrixelemente der Wechselwirkung durch

$$W(\nu, \vartheta) = \langle \nu, \vartheta | W | 1 \rangle = -\sqrt{\frac{\nu}{V\epsilon_0}} \sin \vartheta D_{AB} \quad , \quad (2.63)$$

und die Systemzustandsvektoren durch

$$|1\rangle = |A; 0\rangle \quad (2.64)$$

$$|\nu, \vartheta\rangle = |B; 1_{\nu, \vartheta}\rangle \quad (2.65)$$

gegeben. Wir erhalten ein Modell, welches dem Friedrichsmodell besonders nahe kommt:

1. Die spezielle Form der Wechselwirkung zusammen mit dem speziellen Anfangszustand haben eine Verkleinerung des Zustandsraumes auf

$$\mathcal{H} = \text{Lin}\{|1\rangle\} \oplus \text{Lin}\{|\nu, \vartheta\rangle\}_{\nu, \vartheta} \quad \nu \in \mathbb{R}_+, \vartheta \in [0, \pi] \quad (2.66)$$

ermöglicht. Dieser Zustandsraum ist normisomorph zu

$$\mathcal{H} = \mathbb{C} \oplus L^2(\mathbb{R}_+ \times [0, \pi]) \quad , \quad (2.67)$$

so daß sich jeder Zustand aus \mathcal{H} als

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi(\nu, \vartheta) \end{pmatrix} = \psi_1 |1\rangle + \int_0^\pi d\vartheta \int_0^\infty d\nu \psi(\nu, \vartheta) |\nu, \vartheta\rangle \quad (2.68)$$

schreiben läßt.

2. Der Winkelabhängigkeit der Wechselwirkung entnehmen wir, daß Emissionen und Absorptionen entlang der Dipolachse ($\vartheta = 0$) unmöglich und solche unter gleichem Winkel von gleicher Wahrscheinlichkeit sind.
3. Die Struktur des Hilbertraums ist jedoch nicht flach. Stattdessen gilt die Vollständigkeitsrelation

$$\mathbb{1} = |1\rangle\langle 1| + \int_0^\pi d\vartheta \int_0^\infty d\nu \rho(\nu, \vartheta) |\nu, \vartheta\rangle\langle \nu, \vartheta| \quad , \quad (2.69)$$

mit den Orthogonalitäten

$$\begin{aligned} \langle 1|1\rangle &= 1, & \langle 1|\nu, \vartheta\rangle &= 0, \\ \langle \nu, \vartheta|\nu', \vartheta'\rangle &= \frac{1}{\rho(\nu, \vartheta)} \delta(\nu - \nu') \delta(\vartheta - \vartheta') \quad . \end{aligned} \quad (2.70)$$

Dem entspricht die Definition des Skalarprodukts

$$\langle \psi|\varphi\rangle := \int_0^\pi d\vartheta \int_0^\infty d\nu \rho(\nu, \vartheta) \psi^*(\nu, \vartheta) \varphi(\nu, \vartheta) \quad (2.71)$$

auf \mathcal{H} .

4. Wenn wir die Hamiltonoperatoren an die neue Darstellung anpassen, erhalten wir den Hamiltonoperator des Gesamtsystems

$$H = H_0 + W \quad (2.72)$$

mit dem ungestörten Operator

$$H_0 = H_A + H_F = \omega_A |1\rangle\langle 1| + \int_0^\pi d\vartheta \int_0^\infty d\nu \rho(\nu, \vartheta) (\nu + \omega_B) |\nu, \vartheta\rangle\langle \nu, \vartheta| \quad (2.73)$$

und dem Wechselwirkungsoperator

$$W = \int_0^\pi d\vartheta \int_0^\infty \rho(\nu, \vartheta) \left\{ W(\nu, \vartheta) |\nu, \vartheta\rangle\langle 1| + W^*(\nu, \vartheta) |1\rangle\langle \nu, \vartheta| \right\} . \quad (2.74)$$

Die Übersetzungsvorschrift

Der Hamiltonoperator des Gesamtsystems ist im wesentlichen, nämlich bis auf die Zustandsdichte und die Winkelabhängigkeit, identisch mit dem Hamiltonoperator des **Friedrichsmodells**. Wir können durch entsprechende Ersetzungen beide Modelle ineinander überführen:

Wigner-Weisskopf Modell	Friedrichsmodell
$\int_0^\pi d\vartheta \int_0^\infty d\nu \rho(\nu, \vartheta)$	$\int_0^\infty d\omega$
$(\nu + \omega_B)$	ω
ω_A	ω_1
$ \nu, \vartheta\rangle$	$ \omega\rangle$
$W(\nu, \vartheta)$	$W(\omega)$

Der Operator der Wechselwirkung im Friedrichsmodell ist äquivalent zum dipolgenäherten Wigner-Weisskopf-Operator eines 2-Niveau-Systems unter Vernachlässigung der Winkelabhängigkeit. In der anschließenden Diskussion des Friedrichsmodell wird die Winkelabhängigkeit nicht explizit benötigt. Daher ist sie aus den Ergebnissen der Diskussion wieder durch die umgekehrte Ersetzung rekonstruierbar. Mit anderen Worten: Wir könnten die Winkelabhängigkeit auch in das Friedrichsmodell übertragen und dort an jeder Stelle mitführen. Dies verkompliziert jedoch die Ausdrücke und lenkt vom wesentlichen ab. Um zu zeigen, daß dadurch kein Schaden entsteht, werden anschließend die Ergebnisse der Diskussion des Friedrichsmodells unter Beachtung der Winkelabhängigkeit zurück auf das Wigner-Weisskopf-Modell übertragen.

In diesem Kapitel haben wir für beide Modelle vergleichbare Bedingungen geschaffen, indem wir eine Transformation gefunden haben, die beide Modelle ineinander überführt. Wir werden nun das Friedrichsmodell als Grundlage nehmen und auf verschiedene Weise versuchen, die Schrödingergleichung zu lösen. Die qualitativen Ergebnisse sind mittels der Übersetzungsvorschrift direkt in quantitative physikalische Aussagen übertragbar.

2.5 Bestimmungsgleichung für die Überlebensamplitude

Das Friedrichsmodell kann auf unterschiedliche Weise diskutiert werden. Aus physikalischer Sicht steht die *Dynamik* im Mittelpunkt. Wenn wir zu jedem Zustand $|\psi\rangle$ seine zeitliche Entwicklung $|\psi(t)\rangle$ kennen, so kennen wir auch diejenige aller physikalischen Erwartungswerte. Damit ist die Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \quad . \quad (2.75)$$

mit der Anfangsbedingung

$$|\psi(0)\rangle = |1\rangle \quad (2.76)$$

das Ziel unserer Bemühungen. Da H zeitunabhängig ist, lassen sich Gleichungen (2.75) und (2.76) umformen zu

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}|1\rangle \quad , \quad (2.77)$$

und die Lösung verlagert sich auf die explizite Darstellung des Zeitpropagators

$$U(t) = e^{-iHt} \quad . \quad (2.78)$$

Wir können den Zeitpropagator explizit hinschreiben, wenn wir die Spektraldarstellung des Hamiltonoperators

$$H = \sum_{E_k \in \sigma_d(H)} E_k |E_k\rangle\langle E_k| + \int_{\sigma_c(H)} dE E |E\rangle\langle E| \quad (2.79)$$

mit dem diskreten Spektrum $\sigma_d(H)$, dem kontinuierlichen Spektrum $\sigma_c(H)$, den diskreten Eigenvektoren $|E_k\rangle$ und den kontinuierlichen Eigenvektoren $|E\rangle$ kennen. Er lautet dann

$$U(t) = \sum_{E_k \in \sigma_d(H)} e^{-iE_k t} |E_k\rangle\langle E_k| + \int_{\sigma_c(H)} dE e^{-iEt} |E\rangle\langle E| \quad . \quad (2.80)$$

Also ist die zeitabhängige Schrödingergleichung gelöst, wenn die zeitunabhängige Schrödingergleichung, d.h. die Eigenwertgleichung des Hamiltonoperators,

$$H|E\rangle = E|E\rangle \quad , \quad (2.81)$$

gelöst ist, wenn wir also die verallgemeinerten Eigenwerte und Eigenvektoren kennen, aus denen sich H zusammensetzt. In der Publikation von Friedrichs [8] wird diese Eigenwertgleichung gelöst, ebenso in den Publikationen der Brüssel-Schule [18, 2, 15, 24, 4, 3]. Der Hamiltonoperator $H = H_0 + W$ läßt sich allerdings, wie wir sehen werden, auf verschiedenerlei Weise (im verallgemeinerten Sinne) spektral darstellen.

Wir extrahieren nun aus der zeitabhängigen Schrödingergleichung eine einzige Bestimmungsgleichung für die Amplitude des diskreten Zustands.

Wir transformieren ins Wechselwirkungsbild vermittels des unitären Operators

$$U_0(t) = e^{-iH_0 t} \quad , \quad (2.82)$$

so daß transformierte Zustände $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ und Operatoren $\tilde{A}(t)$ über

$$|\psi(t)\rangle = U_0(t)|\tilde{\psi}(t)\rangle \quad (2.83)$$

$$\tilde{A}(t) = U_0^\dagger(t) A U_0(t) \quad (2.84)$$

festgelegt sind. Die Komponenten des transformierten Zustands erhalten wir über

$$\tilde{c}_1(t) = \langle 1|\tilde{\psi}(t)\rangle \quad (2.85)$$

$$\tilde{c}_\omega(t) = \langle \omega|\tilde{\psi}(t)\rangle \quad (2.86)$$

Die Dynamik der transformierten Zustände wird geregelt von der Schrödingergleichung im Wechselwirkungsbild

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle = \tilde{W}(t)|\tilde{\psi}(t)\rangle \quad (2.87)$$

Die Zeitabhängigkeit der 1. Komponente berechnet sich durch

$$i\dot{\tilde{c}}_1(t) = \langle 1|i\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle = \langle 1|\tilde{W}|\tilde{\psi}(t)\rangle = \langle 1|U_0^\dagger(t)WU_0(t)\mathbb{1}|\tilde{\psi}(t)\rangle \quad (2.88)$$

$$= \langle 1|W|1\rangle\langle 1|\tilde{\psi}(t)\rangle + \int_0^\infty d\omega e^{i(\omega_1-\omega)t} \underbrace{\langle 1|W|\omega\rangle}_{W^*(\omega)} \underbrace{\langle \omega|\tilde{\psi}(t)\rangle}_{\tilde{c}_\omega(t)} \quad (2.89)$$

diejenige der übrigen Komponenten durch

$$i\dot{\tilde{c}}_\omega(t) = \langle \omega|i\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle = \langle 1|U_0^\dagger(t)WU_0(t)\mathbb{1}|\tilde{\psi}(t)\rangle \quad (2.90)$$

$$= e^{i(\omega-\omega_1)t} \langle \omega|W|1\rangle\langle 1|\tilde{\psi}(t)\rangle + \int_0^\infty d\omega' e^{i(\omega-\omega')t} \underbrace{\langle \omega|W|\omega'\rangle}_0 \underbrace{\langle \omega'|\tilde{\psi}(t)\rangle}_{\tilde{c}_{\omega'}(t)} \quad (2.91)$$

Daraus gewinnt man das Gleichungssystem

$$1) \quad \dot{\tilde{c}}_1(t) = -i \int_0^\infty d\omega e^{i(\omega_1-\omega)t} W^*(\omega)\tilde{c}_\omega(t) \quad (2.92)$$

$$2) \quad \dot{\tilde{c}}_\omega(t) = -ie^{i(\omega-\omega_1)t} W(\omega)\tilde{c}_1(t) \quad (2.93)$$

Indem man die 2. Gleichung integriert

$$\tilde{c}_\omega(t) = -i \int_0^t dt' e^{i(\omega-\omega_1)t'} W(\omega)\tilde{c}_1(t') \quad (2.94)$$

und in die 1. einsetzt, erhält man

$$\dot{\tilde{c}}_1(t) = - \int_0^\infty d\omega \int_0^t dt' e^{i(\omega_1-\omega)(t-t')} |W(\omega)|^2 \tilde{c}_1(t') \quad (2.95)$$

Nun transformieren wir zurück ins Schrödingerbild. Durch Ausnutzen von

$$c_1(t) = e^{-i\omega_1 t} \tilde{c}_1(t) \quad (2.96)$$

erhalten wir die Bestimmungsgleichung

$$\dot{c}_1(t) = -i\omega_1 c_1(t) - \int_0^\infty d\omega \int_0^t dt' e^{i\omega(t'-t)} |W(\omega)|^2 c_1(t') \quad . \quad (2.97)$$

Diese Gleichung bestimmt die exakte Lösung des Problems. Sie ist der Angelpunkt unserer Untersuchungen, und wir werden im folgenden verschiedene Methoden und Wege finden, wie diese Gleichung exakt oder näherungsweise gelöst werden kann.

2.6 Nakajima-Zwanzig-Projektionen

Gleichung (2.97) hat die Form einer *Nakajima-Zwanzig-Gleichung*. Dieser Gleichungstyp resultiert aus der Nakajima-Zwanzig-Projektion des Dichteoperators eines kombinierten Systems auf eine reduzierte Dichtematrix, in der alle Informationen über die "Umgebung" (hier das elektromagnetische Feld) durch Integration bzw. Summation über die Freiheitsgrade der Umgebung eliminiert werden (siehe dazu Zwanzig 1960 [28], aber auch [10]). Eine mit der Nakajima-Zwanzig-Projektion identische Projektion wurde unabhängig auch von der Brüsseler Schule entdeckt und untersucht (siehe dazu Résibois 1963 [20]). Dieser Projektionstyp ist von zentraler Bedeutung für den auf den Raum der Dichtematrizen erweiterten Formalismus der Brüsseler Schule. Die Nakajima-Zwanzig-Projektion ist auf dem Raum $S(\mathcal{H})$ der Hilbert-Schmidt-Operatoren über \mathcal{H} definiert, von welchem die Menge $\mathcal{D}(\mathcal{H})$ der Dichtematrizen eine Teilmenge ist:

Sei P ein Operator mit folgenden Eigenschaften:

- 1) $P : S(\mathcal{H}) \rightarrow S(\mathcal{H})$ ist linear-beschränkt,
- 2) $P^2 = P$,
- 3) $PD(\mathcal{H}) \subset \mathcal{D}(\mathcal{H})$.

Man nennt P einen **Nakajima-Zwanzig-Projektor**. Er projiziert Dichtematrizen auf einen Teilraum von $S(\mathcal{H})$. Das Ergebnis einer solchen Projektion ist wieder eine Dichtematrix, die jedoch im allgemeinen nicht die gesamte Information des ursprünglichen Zustands enthält.

Wendet man die Nakajima-Zwanzig-Projektionen P und $Q = \mathbb{1} - P$ auf die Liouville-von Neumann-Gleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} \rho = L\rho \quad (2.98)$$

mit dem **Liouville-Operator**

$$L\rho = [H, \rho] \quad (2.99)$$

an, so ergibt sich

$$\begin{aligned} 1) \quad i \frac{\partial}{\partial t} P\rho &= PL\rho = PLP\rho + PLQ\rho \quad , \\ 2) \quad i \frac{\partial}{\partial t} Q\rho &= QL\rho = QLP\rho + QLQ\rho \quad . \end{aligned} \quad (2.100)$$

Unter der Annahme

$$Q\rho(0) = 0 \quad , \quad (2.101)$$

erhält man nach Integration der Gleichung (2.100,2) und Einsetzen des Resultates in (2.100,1) die **Nakajima-Zwanzig-Gleichung**

$$\frac{\partial}{\partial t} P\rho(t) = -iPLP\rho(t) - \int_0^t dt' K(t-t')P\rho(t') \quad , \quad (2.102)$$

mit dem **Erinnerungskern**

$$K(t-t') = PLQe^{-iQLQ(t-t')}QLP \quad . \quad (2.103)$$

Man kann das Konzept der Nakajima-Zwanzig-Projektionen aber auch auf den Hilbertraum \mathcal{H} übertragen. Im Falle des Friedrichsmodells wählt man die Projektoren

$$P = |1\rangle\langle 1| \quad , \quad (2.104)$$

$$Q = \int_0^\infty d\omega |\omega\rangle\langle \omega| \quad . \quad (2.105)$$

Dies führt zu der Nakajima-Zwanzig-Gleichung

$$\dot{c}_1|1\rangle = -ic_1\omega_1|1\rangle - \int_0^t dt' K(t-t')c_1(t')|1\rangle \quad . \quad (2.106)$$

Für den **Erinnerungskern** ergibt sich

$$K(t-t') = \int d\omega W^*(\omega)|1\rangle\langle \omega| \int d\omega' e^{-i\omega'(t-t')}|\omega'\rangle\langle \omega'| \int d\omega'' W(\omega'')|\omega''\rangle\langle 1| \quad (2.107)$$

$$= \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} |W(\omega)|^2 |1\rangle\langle 1| \quad , \quad (2.108)$$

in Übereinstimmung mit den bereits erhaltenen Ergebnissen.

Kapitel 3

Die quantenoptische Methode

Das Wigner-Weisskopf-Modell ist ein quantenoptisches Modell. Es beschreibt die Wechselwirkung zwischen den Energieniveaus eines Atoms durch Kopplung an ein Strahlungsfeld. Wir haben unter vereinfachenden Annahmen dieses physikalische Modell auf ein mathematisches Modell, das Friedrichsmodell, übertragen. Wir werden das Friedrichsmodell nun mit den Methoden der Quantenoptik behandeln. Alle wesentlichen Effekte, die bei der Untersuchung komplexerer physikalischer Modelle dieser Art zutage treten, spielen auch im Friedrichsmodell eine wichtige Rolle. Wir werden zunächst die Methoden anwenden, die Wigner und Weisskopf auf ihr Modell angewandt haben. Anschließend werden wir störungstheoretische Methoden benutzen. Am Ende des Kapitels werden wir die erhaltenen Resultate wieder in das physikalische Ausgangsmodell zurückübersetzen und dadurch zeigen, daß die Aussagen, die aus dem Friedrichsmodell gewonnen werden können, von physikalischer Relevanz sind und nicht nur qualitativ, sondern auch quantitativ zu den richtigen Ergebnissen führen.

3.1 Alternative Wege

3.1.1 Der Wigner-Weisskopf-Ansatz

Zuerst werden wir Methoden anwenden, die in groben Zügen denen von Wigner und Weisskopf entsprechen. In der 1930 erschienenen Veröffentlichung von *Wigner* und *Weisskopf* [26] wird nur die Zerfallskonstante durch Näherungen berechnet. Im Laufe der Zeit ist diese Berechnung variiert und erweitert worden [16, 22, 12]). Bei Louisell [16] und Holstein [12] findet man eine zusätzliche Berechnung der Linienverschiebung (Lambshift), welche allerdings die Renormierungstheorie benötigt, um physikalisch interpretierbar zu sein.

Wigner und Weisskopf hatten einen exponentiellen Abfall der Norm des diskreten Zustands erwartet, wie es das Experiment auch bereits vorlegt, und machten daher den Ansatz

$$c_1(t) = e^{-izt} \quad , \quad (3.1)$$

wobei z komplexe Zahl sein darf mit positivem Realteil ¹, d.h.

$$z = \Omega - i\gamma \in \mathbb{C} ; \quad \gamma > 0 \quad . \quad (3.2)$$

¹In der Publikation gingen die beiden Autoren nur von einem rein negativ reellen Exponenten aus, nämlich $c_1(t) = e^{-2\pi\Gamma t}$. Wir sind hier etwas allgemeiner und erhalten zusätzlich zur Abklingrate noch die Energiekorrektur. Der mathematische Weg ist ebenfalls verschieden und richtet sich hier im wesentlichen nach dem von Holstein [12] vorgeschlagenen.

Geht man mit diesem Ansatz in die Bestimmungsgleichung (2.97), so erhält man

$$z = \omega_1 - \int_0^\infty d\omega \int_0^t dt' e^{i(\omega-z)(t'-t)} |W(\omega)|^2, \quad (3.3)$$

und nach Integration über t' ergibt sich

$$z = \omega_1 + \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega - z} [e^{-i(\omega-z)t} - 1]. \quad (3.4)$$

Dies ist eine implizite Bestimmungsgleichung für z , und man muß bemerken, daß sie nichtlinear ist. Überdies läßt sie erkennen, daß der Ansatz von Wigner und Weisskopf eigentlich unzulässig ist, weil hier bereits eine Zeitabhängigkeit von z zu erkennen ist, insbesondere gilt

$$z(t=0) = \omega_1. \quad (3.5)$$

Wenn wir jedoch bestimmte Approximationen in der Integration machen, so wird diese Zeitabhängigkeit verschwinden, und unser Ansatz ist approximativ gerechtfertigt.

Betrachten wir die beiden Teilintegrale in (3.4):

$$z = \omega_1 + I_1 - I_2, \quad (3.6)$$

$$\text{mit} \quad I_1 = \int_0^\infty d\omega e^{-i(\omega-z)t} \frac{|W(\omega)|^2}{\omega - z}, \quad (3.7)$$

$$I_2 = \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega - z}. \quad (3.8)$$

Das erste Teilintegral über ω lösen wir, indem wir die positiv-reelle Achse entlangintegrieren und dann einen Bogen in der komplexen Ebene schlagen (siehe Abb. 3.1). Wegen der Exponentialfunktion verschwindet der Anteil dieses Bogens. Anschließend integrieren wir entlang der negativen imaginären Achse zurück zum Ursprung. Diesen Beitrag vernachlässigen wir, so daß nur das Residuum des Integranden an seinem Pol in der unteren Halbebene auszurechnen bleibt. Der Pol liegt bei

$$\omega_p = z. \quad (3.9)$$

Der Realteil von z ist positiv, denn die durch die Wechselwirkung verursachte Energieverschiebung (von ω_1 aus) kann nicht zu negativen Frequenzen führen. Der Imaginärteil ist nach Voraussetzung negativ, daher liegt der Pol insgesamt auf der unteren komplexen Halbebene von ω . Nach dem Residuensatz berechnet sich der Wert des Integrals über den geschlossenen Weg C , den wir mit dem Integral über die positiv-reelle Achse gleichsetzen, durch

$$I_1 = \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega - z} e^{-i(\omega-z)t} \approx 2\pi i \operatorname{Res}_z \left(\frac{|W(\omega)|^2}{\omega - z} e^{-i(\omega-z)t} \right) \quad (3.10)$$

$$= -2\pi i |W(z)|^2. \quad (3.11)$$

Nun machen wir eine weitere Approximation und nehmen an, daß die Störung so klein ist, daß sich weder die Energieverschiebung noch die Abklingrate wesentlich von Null unterscheiden. Damit liegt z in der direkten Umgebung von ω_1 , und wir erhalten

$$I_1 \approx -2\pi i |W(\omega_1)|^2. \quad (3.12)$$

Das zweite Teilintegral können wir nicht mehr mit dem Residuensatz lösen, denn es ist nicht gesagt, daß der Integrand genügend schnell abfällt. Wir benutzen stattdessen den in der Streutheorie häufig gebrauchten Zusammenhang

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x) \quad . \quad (3.13)$$

Dabei bedeutet \mathcal{P} der Cauchy-Hauptwert eines Integrals, definiert durch

$$\mathcal{P} \int_{-a}^b dx f(x) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left\{ \int_{-a}^{-\epsilon} + \int_{+\epsilon}^b \right\} dx f(x) \quad . \quad (3.14)$$

Falls wir erneut annehmen, daß die Störung klein ist, so ergibt das zweite Teilintegral

$$I_2 = \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega - z} \approx \mathcal{P} \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega - z} - i\pi |W(\omega_1)|^2 \quad . \quad (3.15)$$

Insgesamt fügt sich das Gesamtintegral zusammen zu

$$I = \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega - z} [e^{-i(\omega-z)t} - 1] = I_1 - I_2 \quad (3.16)$$

$$= -\mathcal{P} \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega - z} - i\pi |W(\omega_1)|^2 \quad . \quad (3.17)$$

Damit resultiert schließlich der Exponent z zu

$$z = \omega_1 - \mathcal{P} \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega - z} - i\pi |W(\omega_1)|^2 \quad . \quad (3.18)$$

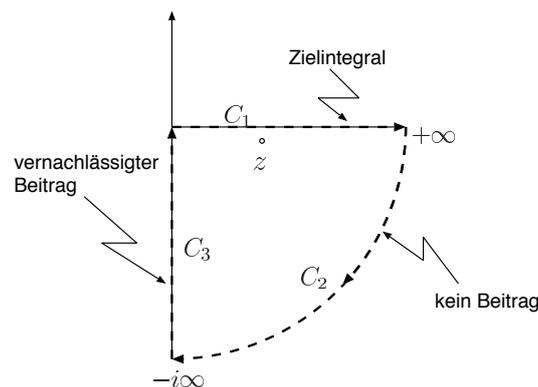


Abbildung 3.1: Ergänzung des Integrationsweges über die positive Halbachse durch einen Viertelkreis in die untere Halbebene. Der Bogen liefert keinen Beitrag, wohl aber die Integration über die negativ imaginäre Achse. Dieser Beitrag kann für genügend große Zeiten in guter Näherung vernachlässigt werden.

Physikalische Interpretation

Der Realteil von z repräsentiert die durch die Störung verschobene Gesamtenergie des diskreten Zustands, während der Imaginärteil die Zerfallsrate des Zustands darstellt:

$$\operatorname{Re} z = \omega_1 + \Delta\omega = \omega_1 - \mathcal{P} \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega - z} , \quad (3.19)$$

$$\operatorname{Im} z = -\frac{\Gamma}{2} = -\pi |W(\omega_1)|^2 , \quad (3.20)$$

Wir erhalten somit die zeitliche Entwicklung des diskreten Zustands als einen phasenverschobenen exponentiellen Abfall:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i(\omega_1 + \Delta\omega)t} e^{-\frac{\Gamma}{2}t} |1\rangle + \dots . \quad (3.21)$$

Die Zerfallsrate Γ stellt zugleich die natürliche Linienbreite der Spektrallinie des diskreten Zustands dar, denn ihr Reziprokes ist die mittlere Lebensdauer:

$$\tau = \frac{1}{\Gamma} . \quad (3.22)$$

3.1.2 Störungstheorie

Wir gehen wieder von der Schrödingergleichung im Wechselwirkungsbild aus,

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}(t)\rangle = \tilde{W}(t) |\tilde{\psi}(t)\rangle , \quad (3.23)$$

und werten sie für die $|1\rangle$ -Komponente aus:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \langle 1 | \tilde{\psi}(t) \rangle = \langle 1 | \tilde{W}(t) | \tilde{\psi}(t) \rangle . \quad (3.24)$$

Wir benutzen die Spektralzerlegung der Einheit,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \langle 1 | \tilde{\psi}(t) \rangle = \langle 1 | \tilde{W}(t) | 1 \rangle \langle 1 | \tilde{\psi}(t) \rangle + \int_0^\infty d\omega \langle 1 | \tilde{W}(t) | \omega \rangle \langle \omega | \tilde{\psi}(t) \rangle , \quad (3.25)$$

und teilen beide Seiten durch $\langle 1 | \tilde{\psi}(t) \rangle$:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \ln \langle 1 | \tilde{\psi}(t) \rangle = \langle 1 | \tilde{W}(t) | 1 \rangle + \int_0^\infty d\omega \langle 1 | \tilde{W}(t) | \omega \rangle \frac{\langle \omega | \tilde{\psi}(t) \rangle}{\langle 1 | \tilde{\psi}(t) \rangle} . \quad (3.26)$$

In 1. Ordnung Störungstheorie ist mit $|\tilde{\psi}(0)\rangle = |1\rangle$

$$|\tilde{\psi}^{(1)}(t)\rangle = |1\rangle + \frac{1}{i} \int_0^t dt' \tilde{W}(t') |1\rangle , \quad (3.27)$$

$$\text{und} \quad \langle 1 | \tilde{\psi}^{(1)}(t) \rangle = \langle 1 | 1 \rangle = 1 . \quad (3.28)$$

Letztere Gleichung muß wegen der Normierungsbedingung für jedes \tilde{W} gelten. Wenn wir Gleichung (3.26) in zweiter Ordnung behandeln, stehen links Terme der Ordnung 2, rechts Terme der Ordnung 1 und daher

$$i \frac{\partial}{\partial t} \ln \langle 1 | \tilde{\psi}^{(2)}(t) \rangle = \langle 1 | \tilde{W}(t) | 1 \rangle \langle 1 | \tilde{\psi}^{(1)}(t) \rangle + \int_0^\infty d\omega \int_0^t dt' \langle 1 | \tilde{W}(t) | \omega \rangle \langle \omega | \tilde{W}(t') | 1 \rangle . \quad (3.29)$$

Mit $\tilde{W} = e^{iH_0 t} W e^{-iH_0 t}$ erhält man

$$i \frac{\partial}{\partial t} \ln \langle 1 | \tilde{\psi}^{(2)}(t) \rangle = \langle 1 | W | 1 \rangle + \int_0^\infty d\omega \int_0^t dt' e^{i(\omega_1 - \omega)(t-t')} |\langle \omega | W(t) | 1 \rangle|^2 . \quad (3.30)$$

Nun nutzen wir die spezielle Form der Wechselwirkung aus und setzen

$$c_1(t) := \langle 1 | \tilde{\psi}^{(1)}(t) \rangle , \quad (3.31)$$

wodurch wir auf die Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \ln c_1(t) = -i \int_0^\infty d\omega \int_0^t dt' e^{i(\omega_1 - \omega)(t-t')} |\langle \omega | W(t) | 1 \rangle|^2 \quad (3.32)$$

kommen. Wenn wir den Logarithmus auflösen, erhalten wir

$$\dot{c}_1(t) = -i \int_0^\infty d\omega \int_0^t dt' e^{i(\omega_1 - \omega)(t-t')} |\langle \omega | W(t) | 1 \rangle|^2 c_1(t) . \quad (3.33)$$

Diese Gleichung ähnelt Gleichung (2.97). Im Vergleich sieht man jedoch, daß rechts die Komponente c_1 nicht von t' sondern von t abhängt und daher aus dem Integral gezogen werden kann. Hier ist daher kein Ansatz für $c_1(t)$ nötig. Um das Integral zu lösen, führen wir eine in der Störungstheorie typische exponentiell eingeschaltete Störung

$$W \rightarrow e^{\eta t} W \quad (3.34)$$

ein, wobei wir am Ende $\eta \rightarrow 0$ gehen lassen. Dann ist

$$\langle 1 | \tilde{W}(t) | \omega \rangle \langle \omega | \tilde{W}(t') | 1 \rangle = e^{i(\omega_1 - \omega)(t-t')} e^{\eta(t+t')} |W(\omega)|^2 . \quad (3.35)$$

Zweitens ersetzt man die untere Grenze des Zeitintegrals durch $-\infty$ mit der Begründung, daß die exponentiell eingeschaltete Störung schnell genug gegen $t = -\infty$ abfällt, um den Beitrag zum Integral vernachlässigen zu können. So kommt man also zu

$$\frac{\partial}{\partial t} \ln c_1(t) \approx -e^{\eta t} \int_0^\infty d\omega e^{i(\omega_1 - \omega)t} \int_0^t dt' e^{-i(\omega_1 - \omega + i\eta)t'} |W(\omega)|^2 \quad (3.36)$$

$$= -ie^{2\eta t} \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega_1 - \omega + i\eta} . \quad (3.37)$$

Nun läßt man $\eta \rightarrow 0$ gehen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \ln c_1(t) = i\mathcal{P} \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega - \omega_1} - \pi |W(\omega)|^2 . \quad (3.38)$$

Diese Differentialgleichung ist sofort lösbar durch

$$c_1(t) = e^{-i\Delta\omega t} e^{-\frac{\Gamma}{2}t} , \quad (3.39)$$

mit den bereits definierten Größen $\Delta\omega$ und Γ . Wir erhalten also auf störungstheoretischem Wege in 2. Ordnung die gleichen Ergebnisse wie in der Wigner-Weisskopf-Näherung.

3.1.3 Direkte Störungstheorie

Wir kommen ohne Umwege zum gewünschten Ergebnis, wenn wir die bereits vorhandenen Ergebnisse der Störungstheorie direkt auf das vorliegende Problem anwenden.

Die Energieverschiebung Die durch die Störung W verursachte Verschiebung der Energieniveaus beträgt in der

$$1. \text{ Ordnung} \quad \Delta^1 E = \langle 1|W|1\rangle = 0 \quad , \quad (3.40)$$

$$2. \text{ Ordnung} \quad \Delta^2 E = - \sum_{E_n \neq E_1} \frac{|\langle n|W|1\rangle|^2}{E_n - E_1} \rightarrow -\mathcal{P} \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega - \omega_1} \quad . \quad (3.41)$$

Der Übergang der Summe in ein Integral erfordert eine besondere Behandlung von Zuständen, deren Energien nahe der aus der Summe ausgeschlossenen Energie E_1 liegen. Durch die Hauptwert-Vorschrift ist der Wert des Integrals eindeutig festgelegt. Insgesamt ergibt sich demnach die Verschiebung

$$\Delta\omega = \Delta^1 E + \Delta^2 E = -\mathcal{P} \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega - \omega_1} \quad . \quad (3.42)$$

Die Zerfallsrate Die Übergangsrates vom Anfangszustand $|1\rangle$ in den kontinuierlichen Zustand $|\omega\rangle$ ist gemäß *Fermis Goldener Regel*:

$$\Gamma_\omega = 2\pi |\langle \omega|W|1\rangle|^2 \delta(\omega - \omega_1) = 2\pi |W(\omega)|^2 \delta(\omega - \omega_1) \quad . \quad (3.43)$$

Somit wird die totale Rate aller Übergänge, die aus dem Zustand $|1\rangle$ führen, gegeben durch

$$\Gamma = \int_0^\infty d\omega \Gamma_\omega = 2\pi \int_0^\infty d\omega |W(\omega)|^2 \delta(\omega - \omega_1) = 2\pi |W(\omega_1)|^2 \quad . \quad (3.44)$$

In Übereinstimmung mit den vorangegangenen Ergebnissen

3.2 Konkrete Berechnung

Um die bisherigen Ergebnisse in das konkret gegebene physikalische Problem zu übertragen, muß man die Ersetzungen, die ins Friedrichsmodell geführt haben, wieder rückgängig machen:

$$|1\rangle \rightarrow |A; 0\rangle \quad , \quad (3.45)$$

$$|\omega\rangle \rightarrow |B; \nu, \vartheta\rangle \quad , \quad (3.46)$$

$$\omega_1, \omega \rightarrow \omega_A, \nu + \omega_B \quad , \quad (3.47)$$

$$W(\omega) \rightarrow W(\nu, \vartheta) = -\sqrt{\frac{\nu}{V\epsilon_0}} \sin \vartheta \langle B|\sqrt{\mathbf{D}^2}|A\rangle \quad , \quad (3.48)$$

$$\int_0^\infty d\omega \rightarrow \int_0^\pi d\vartheta \int_0^\infty d\nu \rho(\nu, \vartheta) = \int_0^\infty d\nu \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{\nu^2}{c^3} \sin \vartheta \quad . \quad (3.49)$$

Dies führt zu dem Ausdruck:

$$\Delta\omega = -\mathcal{P} \int_0^\infty d\nu \rho(\nu, \vartheta) \frac{W(\nu, \vartheta)}{\nu + \omega_A - \omega_B} \quad (3.50)$$

$$= \frac{|D_{AB}|^2}{3\pi^2 \epsilon_0 c^3} \mathcal{P} \int_0^\infty d\nu \frac{\nu^3}{\nu - \omega_{AB}} \quad (3.51)$$

Dimensionsbetrachtungen liefern das Wirkungsquantum \hbar , das wir für die Berechnungen mit Eins gleichgesetzt hatten:

$$\Delta\omega = \frac{|D_{AB}|^2}{3\hbar\pi^2 \epsilon_0 c^3} \mathcal{P} \int_0^\infty d\nu \frac{\nu^3}{\nu - \omega_{AB}} \quad (3.52)$$

Diese Energieverschiebung (Lamb-Shift), nimmt einen unendlichen Wert an und ist nur als formaler Ausdruck zu verstehen, der erst nach Renormierung den korrekten Wert ergibt (siehe dazu [16] oder [12]).

Die Zerfallskonstante berechnet sich zu

$$\Gamma = 2\pi |W(\omega_1)|^2 = 2\pi \int_0^\infty d\omega |W(\omega)|^2 \delta(\omega - \omega_1) \quad (3.53)$$

$$= 2\pi \int_0^\pi d\vartheta \int_0^\infty d\nu \rho(\nu, \vartheta) |W(\nu, \vartheta)|^2 \delta(\nu - \omega_{AB}) \quad (3.54)$$

$$= 2\pi \int_0^\pi d\vartheta \int_0^\infty d\nu \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{\nu^2}{c^3} \sin\vartheta \frac{\nu}{V\epsilon_0} \sin\vartheta |D_{AB}|^2 \delta(\nu - \omega_{AB}) \quad (3.55)$$

$$= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8}{3c^3} |D_{AB}|^2 \omega_{AB}^3 \quad (3.56)$$

Dimensionsbetrachtungen liefern wieder \hbar :

$$\Gamma = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8}{3\hbar c^3} |D_{AB}|^2 \omega_{AB}^3 \quad (3.57)$$

Es bedeuten dabei

$$\text{Differenzenergie:} \quad \omega_{AB} = \omega_A - \omega_B \quad , \quad (3.58)$$

$$\text{Dipoloperator:} \quad \mathbf{D} = e \mathbf{r} \quad , \quad (3.59)$$

$$\text{Dipolmatrixelement:} \quad |D_{AB}|^2 = |\langle B | \mathbf{D} | A \rangle|^2 \quad . \quad (3.60)$$

Diese Aussagen stimmen mit den Ergebnissen überein, die bei der Untersuchung äquivalenter physikalischer Modelle erhalten werden (siehe u.a. [22], [12]). Wir haben damit gezeigt, daß Aussagen, die aus dem Friedrichsmodell gewonnen werden können, auf physikalische Modelle übertragbar sind. Damit sind auch alle folgenden Untersuchungen des Friedrichsmodells von physikalischer Relevanz.

Kapitel 4

Transformationen

Transformationen sind ein wichtiges physikalisches Werkzeug. In diesem Kapitel werden zwei der wichtigsten Transformationen, die *Fourier-* und die *Laplace-Transformation* vorgestellt und ihre Beziehung zueinander untersucht. Ferner werden wir eine Transformation formulieren, die eine Kombination von Laplace- und Fourier-Transformation darstellt und einer besonders bequemen Einsicht in bestimmte Verhältnisse verhilft. Ferner wird auch der für die Methode der Brüsseler Schule grundlegende Begriff der *Hardyklassen* vorgestellt. Die Zusammenhänge mit der von der Brüsseler Schule veranschlagten *intrinsic Irreversibilität* sowie mit Methoden der Streutheorie werden später durch die neu eingeführte Transformation klarer erkennbar sein.

4.1 Fourier- und Laplace-Transformation

Die inverse Fourier-Transformation von Funktionen, die auf der negativen Halbachse verschwinden, entspricht ihrer Laplace-Transformation. Dies ist leicht einzusehen:

Fourier-Transformation

Die Funktion $f(t)$ und ihre **invers Fourier-Transformierte** $\tilde{f}(\omega) \equiv F^{-1}\{f(t)\}$ sind verbunden durch

$$\begin{aligned}\tilde{f}(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} f(t) \quad , \\ f(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \tilde{f}(\omega) \quad .\end{aligned}$$

Eine Funktion ist genau dann Fourier-transformierbar, wenn sie quadratintegabel ist. Verschwinde nun $f(t)$ auf $(-\infty, 0]$ und sei $\omega = is$, dann folgt

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} f(t) = \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} f(t) = \int_0^{\infty} dt e^{-st} f(t) \quad . \quad (4.1)$$

Damit ist $\hat{f}(s) := 2\pi \tilde{f}(\omega)|_{\omega=is}$ die *Laplace-Transformierte* von $f(t)$.

Laplace-Transformation

Die Funktion $f(t)$ und ihre **Laplace-Transformierte** $\hat{f}(s) \equiv \mathcal{L}\{f(t)\}$ sind verbunden durch

$$\hat{f}(s) = \int_0^{\infty} dt e^{-st} f(t) \quad ,$$

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_S ds e^{st} \hat{f}(s) \quad .$$

Falls $f(t)$ quadratintegrabel ist und auf $(-\infty, 0]$ verschwindet, ist sie nicht nur Laplace-transformierbar, sondern hat außerdem auf der imaginären Achse keine Irregularitäten, so daß in diesem Fall die Kurve S entlang der imaginären Achse verlaufen kann. Dies ergibt sich sofort, wenn man in den Fourier-Transformationsregeln die Substitution $\omega \rightarrow is$ durchführt. Es gibt jedoch wesentlich mehr Laplace-transformierbare als Fourier-transformierbare Funktionen. Der Zeitpropagator in der Energiedarstellung $U_E(t) = e^{-iEt}$ ist eine davon. Er ist jedoch nur für $t > 0$ Laplace-transformierbar. Seine Laplace-Transformierte lautet

$$\hat{U}_E(s) = \int_0^{\infty} dt e^{-(s+iE)t} = \frac{1}{s+iE} \quad \text{für } t > 0 \quad . \quad (4.2)$$

Dieser Ausdruck ist fast identisch mit der Resolvente $R(z) = \frac{1}{z-E}$ des Hamiltonoperators in der Energiedarstellung. Die Resolvente wird später ausführlich diskutiert. Für $t < 0$ kann man eine **komplementäre Laplace-Transformation** durchführen, bei der die Integration von $-\infty$ bis 0 geht. Hier ergibt sich der gleiche Ausdruck mit anderem Vorzeichen:

$$\int_{-\infty}^0 dt e^{-(s+iE)t} = -\frac{1}{s+iE} \quad . \quad (4.3)$$

Die Laplace-Transformierte und die komplementär Laplace-Transformierte von $U_E(t)$ haben auf der imaginären Achse einen Pol bei $s = -iE$. Daher läßt sich der Integrationsweg S der Rücktransformation nicht auf die imaginäre Achse legen. Legt man ihn aber so, daß er *rechts* der Achse verläuft, läßt sich die Rücktransformation nur für $t > 0$ durchführen. Für $t < 0$ muß man ihn *links* der imaginären Achse legen. Dies ist Ausdruck der Tatsache, daß es immer ein reelles x_0 gibt, so daß Laplace-Transformierte in der Halbebene $\text{Re } s > x_0$ mit Sicherheit analytisch sind. Dann muß der Integrationsweg bei der Rücktransformation durch dieses Gebiet gelegt werden. Analog gibt es ein x_0 , so daß komplementär Laplace-Transformierte in der Halbebene $\text{Re } s < x_0$ mit Sicherheit analytisch sind. Für $x_0 = 0$ und quadratintegrable Funktionen läßt sich dies in allgemeiner Form zusammenfassen zum

Paley-Wiener-Theorem

Die inverse Fourier-Transformation des Raumes $L^2(\mathbb{R}_+)$ bzw. $L^2(\mathbb{R}_-)$ ist die Hardyklasse H_+^2 bzw. H_-^2 .

Die **Hardyklasse** H_+^2 bzw. H_-^2 ist der Raum aller Funktionen ψ , die auf der oberen bzw. unteren komplexen Halbebene analytisch sind, so daß

$$M_y^\pm[\psi] := \left[\int dx |\psi(x \pm iy)|^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad y > 0 \quad (4.4)$$

beschränkt in y ist, d.h.

$$\sup_{y>0} M_y^\pm[\psi] < K < \infty \quad . \quad (4.5)$$

Die Fortsetzungen von Hardy-Funktionen auf die reelle Achse existieren, sind eindeutig und dort quadratintegrabel, d.h. für $\psi \in H_\pm^2$ gilt

$$\lim_{y \rightarrow 0} \psi(x \pm iy) \in L^2(\mathbb{R}) \quad . \quad (4.6)$$

Hardyklassen spielen im physikalischen Modell der Brüsseler Schule eine entscheidende Rolle, wie wir später noch sehen werden.

4.2 LF-Transformation

Um alle Zusammenhänge möglichst einfach darstellen zu können, werden wir an dieser Stelle eine Kombination von Fourier- und Laplace-Transformation einführen, die wir *LF-Transformation* nennen wollen:

LF-Transformation

Die Funktion $f(t)$ und ihre **positiv LF-Transformierte** $g_+(z) \equiv \text{LF}_+\{f(t)\}$ sind verbunden durch

$$g_+(z) = -i \int_0^\infty dt e^{izt} f(t)$$

$$f(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{Z_+} dz e^{-izt} g_+(z) \quad .$$

Die Funktion $f(t)$ und ihre **negativ LF-Transformierte** $g_-(z) \equiv \text{LF}_-\{f(t)\}$ sind verbunden durch

$$g_-(z) = -i \int_{-\infty}^0 dt e^{izt} f(t) \quad ,$$

$$f(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{Z_-} dz e^{-izt} g_-(z) \quad .$$

Dabei ist $z \in \mathbb{C}$ als komplexe Variable zu verstehen. Die Integrationskurven Z_\pm verlaufen durch das Holomorphiegebiet des Integranden von $-\infty$ bis $+\infty$. Es gibt immer reelle x_0^\pm , so daß $g_+(z)$ bzw. $g_-(z)$ analytisch in $\text{Im } z > x_0^+$ bzw. $\text{Im } z < x_0^-$ ist.

Falls die zu transformierende Zeitfunktion $f(t)$ die Bedingung

$$f(-t) = f^*(t) \quad (4.7)$$

erfüllt, gilt, wie man leicht nachprüft, für ihre LF-Transformierten:

$$g_-(z) = -g_+(z) \quad . \quad (4.8)$$

Bedingung (4.7) ist von besonderem Interesse für die Quantenmechanik: Sie wird von Wellenfunktionen erfüllt, die Lösungen der Schrödingergleichung sind, und ist ein Ausdruck für ihre *Zeitsymmetrie*. Die Ursache für die Zeitsymmetrie physikalischer Zustände liegt in der Zeitsymmetrie des Zeitpropagators e^{-iHt} . Wir wollen Bedingung (4.7) die **Zeitsymmetrie-Bedingung** nennen.

Im folgenden führen wir einige wichtige Transformationsregeln für die *positive* LF-Transformation an:

Phasenverschiebung:

$$e^{at} f(t) \xrightarrow{\text{LF}_+} g_+(z - ia) \quad (4.9)$$

Faltung:

$$(f_1 * f_2)(t) \xrightarrow{\text{LF}_+} i g_1^+(z) g_2^+(z) \quad (4.10)$$

Ableitung:

$$f'(t) \xrightarrow{\text{LF}_+} i f(+0) - iz g_+(z) \quad (4.11)$$

Vielfaches im Argument:

$$f(at) \xrightarrow{\text{LF}_+} \frac{1}{a} g_+\left(\frac{z}{a}\right) \quad (4.12)$$

Delta-Funktion:

$$\delta(t - a) \xrightarrow{\text{LF}_+} e^{iza} \quad (4.13)$$

Exponentialfunktion:

$$e^{-iat} \xrightarrow{\text{LF}_+} \frac{1}{z - a} \quad (4.14)$$

$$(4.15)$$

Für unsere Zwecke genügt die Betrachtung der positiven LF-Transformation, denn die von uns behandelten Funktionen werden stets zeitsymmetrisch sein.

Mittels der LF-Transformation läßt sich das Paley-Wiener-Theorem auch so formulieren:

Paley-Wiener-Theorem (LF-Version)

Die LF_+ - bzw. LF_- -Transformation des L^2 ist die Hardyklasse H_+^2 bzw. H_-^2 :

$$\text{LF}_\pm\{L^2\} = H_\pm^2 \quad .$$

Bei der LF-Transformation geht im allgemeinen Information verloren, nämlich die über das Verhalten der Funktion auf der negativen bzw. positiven Halbachse. Diese Information ist auch bei Rückintegration nicht mehr vorhanden: Die rücktransformierte Funktion verschwindet auf besagter Halbachse. Dies folgt aus folgender Tatsache: Der Integralkern e^{-izt} läßt für negative Zeiten $t < 0$ einen Halbkreis in der oberen Halbebene zu, der zum Integrationsweg hinzuaddiert werden kann, ohne den Wert des Integrals zu ändern. Damit liegt er vollständig im Holomorphiegebiet des Integranden und kann geschlossen werden. Nach dem Cauchyschen Integralsatz verschwindet das Integral und damit die rücktransformierte Funktion für negative Zeiten. Entsprechend verschwindet die Funktion für positive Zeiten bei der Rücktransformation von LF₋-transformierten Funktionen. Wenn die Ausgangsfunktion $f(t)$ als Funktion eines komplexen Arguments in der komplexen Ebene meromorph, d.h. bis auf Polstellen analytisch ist, dann läßt sie sich aus der Rücktransformierten Funktion durch analytische Fortsetzung verlustfrei rekonstruieren. Insbesondere geht bei zeitsymmetrischen Funktionen keine Information verloren, wie man an (4.7) und (4.8) erkennt, und eine Rekonstruktion ist möglich.

Falls $f(t)$ eine L^2 -Funktion ist, so existieren beide LF-Transformierte und ihre Summe ist gerade die Fourier-Transformierte. Falls $f(t)$ jedoch keine L^2 -Funktion ist, so können die LF-Transformierten trotzdem existieren, aber ihre Summe ist dann nicht mehr die (nicht existierende) Fourier-Transformierte (die Summe der beiden LF-Transformierten des Zeitpropagators ergibt z.B. die Nullfunktion). Der Zusammenhang zwischen LF- und Fouriertransformation lautet:

$$f(t) \in L^2 \Rightarrow \quad \text{LF}_+\{f(t)\} + \text{LF}_-\{f(t)\} = -2\pi i F^{-1}\{f(t)\} \quad . \quad (4.16)$$

Die inverse LF-Transformation läßt sich mit Hilfe des Residuensatzes wesentlich erleichtern. Der Integralkern e^{-izt} läßt für positive Zeiten $t > 0$ einen Halbkreis in der unteren Halbebene zu, der zum Integrationsweg hinzuaddiert werden kann, ohne den Wert des Integrals zu ändern. Dort ist die transformierte Funktion jedoch nicht mit Sicherheit analytisch. Also muß eine analytische Fortsetzung in die untere Halbebene gefunden werden (siehe Abbildung 4.1). Wenn sie dort meromorph ist, läßt sie sich mit Hilfe des Residuensatzes leicht invers LF-transformieren. Zusammengefaßt ergibt sich:

Residuensatz für inverse LF-Transformationen

Seien Z_{\pm} Kurven in der komplexen Ebene, die von $-\infty$ bis $+\infty$ reichen. Sind die Funktionen $f_{\pm}(z)$ im oberhalb/unterhalb von Z_{\pm} liegenden Gebiet analytisch und in das unterhalb/oberhalb liegende Gebiet fortsetzbar, so daß sie dort mit Ausnahme der Punkte z_1, \dots, z_N analytisch sind, dann existiert die invers LF-Transformierte $\text{LF}_{\pm}\{f_{\pm}(z)\}$ und lautet

$$g_{\pm}(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{Z_{\pm}} dz e^{-izt} f_{\pm}(z) = \pm \theta(\pm t) \sum_{z_k} e^{-iz_k t} \text{Res}_{z_k} f_{\pm}(z) \quad .$$

Dabei ist $\theta(t)$ die Heaviside-Stufenfunktion.

Bei einem einfachen Pol z_1 berechnet sich das Residuum durch

$$\text{Res}_{z_1} f(z) = \lim_{z \rightarrow z_1} (z - z_1) f(z) \quad (4.17)$$

4.3 LF-Transformation der Bestimmungsgleichung

Nun werden wir die bisherigen Ergebnisse dieses Kapitels auf das Friedrichsmodell anwenden. Dazu werden wir die Bestimmungsgleichung für die Überlebensamplitude LF-transformieren, was zu einer algebraischen Gleichung führt, die direkt lösbar ist. Die Rücktransformation dieser Lösung ergibt die Lösung der ursprünglichen Differentialgleichung. Die Wahl der LF-Transformation erlaubt dabei einen direkten Vergleich des erhaltenen Ausdrucks mit später auf anderen Wegen erhaltenen Ausdrücken.

Wir führen einen Integralkern

$$K(t, t') := \int_0^\infty d\omega |W(\omega)|^2 e^{-i\omega(t-t')} \quad (4.18)$$

ein, so daß die Bestimmungsgleichung in die Form

$$\dot{c}_1(t) = -i\omega_1 c_1(t) - \int_0^t dt' K(t, t') c_1(t') \quad (4.19)$$

gebracht werden kann. Der Kern $K(t, t')$ entspricht dem "Erinnerungsvermögen" des Systems. Er hängt in diesem Fall nur von Zeitdifferenzen ab,

$$K(t, t') = K(t - t') \quad , \quad (4.20)$$

ist also ein Faltungskern. Wenn wir die Bestimmungsgleichung LF_+ -transformieren, erhalten wir

$$ic_1(+0) - iz\check{c}_1(z) = -i\omega_1\check{c}_1(z) - i\check{K}(z)\check{c}_1(z) \quad (4.21)$$

$$= \frac{c_1(+0)}{z - \omega_1 - \check{K}(z)} \quad . \quad (4.22)$$

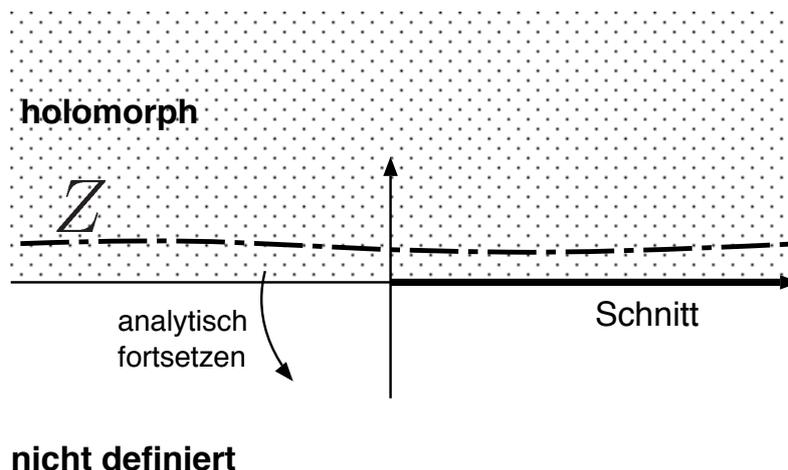


Abbildung 4.1: Bei der inversen LF-Transformation wird die Integrationskurve Z in das Gebiet gelegt, welches mit Sicherheit holomorph ist. Dieses Gebiet existiert für LF_+ -transformierbare Funktionen immer. Sie lassen sich anschließend auf die verbliebene komplexe Ebene fortsetzen, aber nicht überall. Im Falle des Friedrichsmodells ist ein Kern $\check{K}(z)$ involviert, welcher einen Schnitt entlang der positiven Halbachse aufweist. Die Kurve Z muß also in das Holomorphiegebiet oberhalb der reellen Achse gelegt werden.

Der LF₊-transformierte Kern lautet:

$$\check{K}(z) = -i \int_0^\infty dt \int_0^\infty d\omega e^{i(z-\omega)t} |W(\omega)|^2 \quad (4.23)$$

$$= \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{z - \omega} \quad (\text{Im}(z) > 0) \quad . \quad (4.24)$$

Die Transformation von K gelingt nur, wenn der Imaginärteil des komplexen Arguments z größer als Null ist. Also legen wir die Integrationskurve Z durch die obere Halbebene. Wir können die transformierte Funktion $\check{K}(z)$ auch für $\text{Im}(z) < 0$ analytisch fortsetzen, allerdings nicht in eindeutiger Weise entlang der positiv reellen Halbachse, wo wir $\check{K}(z)$ daher undefiniert lassen (siehe Abbildung 4.1).

Der Anfangswert ist gegeben durch

$$c_1(+0) = 1 \quad , \quad (4.25)$$

da sich das System zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand $|1\rangle$ befindet. Definieren wir eine Funktion

$$\eta(z) := z - \omega_1 - \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{z - \omega} \quad , \quad (4.26)$$

dann erhalten wir als Lösung der transformierten Bestimmungsgleichung

$$\check{c}_1(z) = \frac{1}{\eta(z)} \quad . \quad (4.27)$$

Die Rücktransformation liefert die Lösung des Problems:

Exakte Lösung der Dynamik des Friedrichsmodells

Die Dynamik des Friedrichsmodells wird vollständig bestimmt durch die Amplitude für den diskreten Zustand. Diese entwickelt sich gemäß

$$c_1(t) = \frac{i}{2\pi} \int_Z dz \frac{e^{-izt}}{\eta(z)} \quad . \quad (4.28)$$

Schwierigkeiten Diese Funktion löst zwar die Bestimmungsgleichung in exakter Weise und liefert außerdem die Amplituden $c_\omega(t)$, womit wir die Dynamik des Friedrichsmodells im Prinzip geklärt haben. Aber der Kern $\check{K}(z)$ und damit die Funktion $\eta(z)$ haben eine Eigenschaft, die die direkte Auflösung des Integrals, etwa mittels des Residuensatzes, vereitelt: Sie besitzen einen Schnitt entlang der positiven Halbachse. Der Residuensatz ist nicht anwendbar, denn er funktioniert nur bei diskreten Nullstellen von $\eta(z)$. Analytische Fortsetzungen von oben und unten auf die positive Halbachse liefern jeweils eine andere Funktion:

$$\eta_\pm(x) := \lim_{z \rightarrow x \pm i\epsilon} \eta(z) \quad , \quad (4.29)$$

$$\eta_+(x) \neq \eta_-(x) \quad \text{für } x > 0 \quad . \quad (4.30)$$

Man kann sagen, daß die größten Schwierigkeiten, die im Friedrichsmodell stecken, auf diese Eigenschaft des Kerns bzw. der Funktion $\eta(z)$ zurückzuführen sind. Hieraus folgt die Existenz verschiedener vollständiger Sätze von verallgemeinerten Eigenvektoren, inklusive denjenigen, die von den Vertretern der Brüsseler Schule konstruiert werden.

Wir werden auf diese wichtige Funktion $\eta(z)$ an späterer Stelle genau eingehen.

Kapitel 5

Die Resolvente

Die Resolvente spielt eine zentrale Rolle in vielen der folgenden Untersuchungen. Wir werden zeigen, daß Resolvente und Zeitpropagator durch eine LF-Transformation miteinander verbunden sind. Damit entspricht die in der Resolvente enthaltene Information genau der Information, die im Zeitpropagator steckt, d.h. die Information über die Dynamik des Systems.

Die Eigenschaften der Resolvente des Friedrichsmodells geben Einsicht in die Dynamik des Zerfalls und die Herkunft der von der Brüsseler Schule verwendeten verallgemeinerten Eigenvektoren des Hamiltonoperators. Um den Umgang mit der Resolvente zu ermöglichen, werden in diesem Kapitel einige wichtige Methoden bereitgestellt, die später zur Anwendung kommen. Wir werden die Begriffe des Spektrums und der Eigenvektoren klären und ihren direkten Zusammenhang mit der Resolvente aufzeigen. Auch einige Methoden der Streutheorie werden vorgestellt und mit der Resolvente in Verbindung gebracht.

5.1 Resolvente und Spektrum

Die Resolvente eines Operators A ist definiert durch die operatorwertige Funktion

$$R_A(z) := \frac{1}{z - A} \quad . \quad (5.1)$$

Von besonderem Interesse wird für uns die Resolvente des Hamiltonoperators H sein, daher vereinbaren wir die verkürzte Notation

$$R(z) = \frac{1}{z - H} \quad . \quad (5.2)$$

Das Spektrum eines Operators wird bestimmt durch die Singularitäten und Unstetigkeiten seiner Resolvente:

Definition 6 (Spektrum) *Alle Punkte $z \in \mathbb{C}$, für die die Resolvente $R_A(z)$ eines linearen Operators A existiert, überall definiert und beschränkt ist, heißen **reguläre Punkte** von A . Sie bilden die **Resolventenmenge** $r(A)$ von A . Alle anderen Punkte heißen **Spektralwerte** und bilden das **Spektrum** $\sigma(A)$ von A , d.h.*

$$r \dot{\cup} \sigma = \mathbb{C} \quad . \quad (5.3)$$

Dabei bezeichnet $\dot{\cup}$ die disjunkte Vereinigung. Ferner unterscheidet man:

- Die Menge aller Punkte, für die $R_A(z)$ nicht existiert, bildet das **diskrete Spektrum** $\sigma_d(A)$.
- Alle übrigen Spektralwerte bilden das **kontinuierliche Spektrum** $\sigma_c(A)$, d.h.

$$\sigma_c \dot{\cup} \sigma_d = \sigma \quad . \quad (5.4)$$

Die diskreten Spektralwerte sind es, die man mathematisch als "Eigenwerte" bezeichnet. In der Physik heißen Spektralwerte generell Eigenwerte und man unterscheidet zwischen *diskreten* und *kontinuierlichen* Eigenwerten. Zu diskreten Eigenwerten a existieren Vektoren $|a\rangle$, so daß gilt

$$(a - A)|a\rangle = |0\rangle \quad , \quad (5.5)$$

$$\Leftrightarrow A|a\rangle = a|a\rangle \quad . \quad (5.6)$$

Diese Vektoren sind die **Eigenvektoren** von A . Man findet jedoch Vektoren außerhalb des Hilbertraums, die die Eigenwertgleichung zu kontinuierlichen Eigenwerten erfüllen und die man in der Physik folglich ebenfalls Eigenvektoren nennt. Es kann diskrete Eigenwerte geben, die ins kontinuierliche Spektrum eingebettet sind. Beim Friedrichsmodell liegt genau dieser Fall vor.

Das diskrete Spektrum besteht aus den *Singularitäten* der Resolvente (dort existiert sie nicht), während das kontinuierliche Spektrum aus kontinuierlichen *Schnitten* besteht (dort ist sie nicht beschränkt, d.h. unstetig). Etwas handlicher läßt sich dies so formulieren:

Diskrete Eigenwerte

Gilt für eine Zahl a und einen Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$

$$\langle \varphi | R(z) | \psi \rangle \rightarrow \infty \quad (z \rightarrow a) \quad (5.7)$$

für einen Vektor $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$, dann liegt bei a ein *diskreter Eigenwert* vor.

Mit Hilfe uneigentlicher Vektoren läßt sich eine ähnliche Definition für kontinuierliche Eigenwerte finden:

Kontinuierliche Eigenwerte

Gilt für eine Zahl a und einen uneigentlichen Vektor $|\psi\rangle \in \Phi^\dagger$

$$\langle \varphi | R(z) | \psi \rangle \rightarrow \infty \quad (z \rightarrow a) \quad (5.8)$$

für einen Testvektor $|\varphi\rangle \in \Phi$, dann liegt bei a ein *kontinuierlicher Eigenwert* vor.

Die Bedeutung der Räume Φ und Φ^\dagger wird später im Rahmen der Diskussion von Gel'fand-Tripeln ausführlich besprochen.

Wir werden nun zeigen, daß das Spektrum physikalischer Observablen auf der reellen Achse liegt. Dazu einige Definitionen:

Definition 7 (Adjungierter Operator) Der zu einem Operator A adjungierte Operator A^\dagger ist definiert durch

$$\langle A^\dagger \varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | A \psi \rangle \quad \text{für alle } |\psi\rangle \in D_A, |\varphi\rangle \in D_{A^\dagger} \quad , \quad (5.9)$$

dabei bezeichnet D_A, D_{A^\dagger} den Definitionsbereich von A bzw. A^\dagger .

Definition 8 (Symmetrischer Operator) Der Operator A heißt **symmetrisch**, falls

$$1) \quad A = A^\dagger \quad \text{auf } D_A \quad (5.10)$$

$$2) \quad D_A \subseteq D_{A^\dagger} \quad . \quad (5.11)$$

Man schreibt zusammenfassend $A \subseteq A^\dagger$.

Definition 9 (Selbstadjungierter Operator) Ein symmetrischer Operator A heißt **selbstadjungiert**, falls $D_A = D_{A^\dagger}$ oder zusammenfassend $A = A^\dagger$.

Definition 10 (Hermitescher Operator) Ein selbstadjungierter Operator heißt **hermitesch**, falls er beschränkt ist, d.h. seine Norm existiert:

$$\|A\| \equiv \sup \frac{\|A|\psi\rangle\|}{\|\psi\|} < \infty \quad . \quad (5.12)$$

Da viele wichtige Operatoren der Quantenmechanik unbeschränkt sind, z.B. Orts- und Impulsoperator, identifizieren wir mit physikalischen Observablen selbstadjungierte Operatoren. Man kann zeigen, daß folgendes Kriterium gilt:

Satz 1 (Kriterium für reguläre Punkte) Für einen selbstadjungierten Operator A ist z genau dann ein regulärer Punkt, d.h. $z \in r(A)$, wenn

$$\exists(\delta > 0) : \quad \|(z - A)|\psi\rangle\| \geq \delta \|\psi\| \quad \text{für alle } |\psi\rangle \in D_A \quad . \quad (5.13)$$

Dies bedeutet, daß die Resolvente von A bei z existiert und beschränkt ist.

Nun beweisen wir den folgenden wichtigen

Satz 2 (Spektrum selbstadjungierter Operatoren) Das Spektrum selbstadjungierter Operatoren liegt auf der reellen Achse.

Beweis: Sei $z = x + iy$ mit $y \neq 0$, dann folgt

$$\|(z - A)|\psi\rangle\|^2 = \|(x + iy - A)|\psi\rangle\|^2 \quad (5.14)$$

$$= \|(x - A)|\psi\rangle\|^2 + y^2 \|\psi\|^2 + iy \langle \psi | (x - A) \psi \rangle - iy \langle (x - A) \psi | \psi \rangle \quad (5.15)$$

$$= \|(x - A)|\psi\rangle\|^2 + y^2 \|\psi\|^2 \quad (5.16)$$

$$\Rightarrow \|(z - A)|\psi\rangle\|^2 \geq y^2 \|\psi\|^2 \quad (5.17)$$

Damit ist nach Satz 1 (Seite 45) wegen $y \neq 0$ z ein regulärer Punkt, gehört also nicht zum Spektrum. Also muß für Spektralwerte $y = 0$ sein, d.h. sie liegen auf der reellen Achse.

5.2 Green-Operatoren

Die Green-Operatoren sind ein wichtiges Werkzeug im Formalismus der Streutheorie. Sie sind direkt mit der Resolvente verwandt, denn es handelt sich um die analytischen Fortsetzungen der Resolvente auf die reelle Achse, wo sich das kontinuierliche Spektrum des Hamiltonoperators befindet. Die Green-Operatoren werden für die Bestimmung der verallgemeinerten Eigenvektoren der Brüsseler Schule von zentraler Bedeutung sein.

5.2.1 Green-Operatoren im Energiebild

Wenn H zeitunabhängig ist (und wir gehen im folgenden stets davon aus), löst bekanntlich der Zeitentwicklungsoperator

$$U(t) = e^{-iHt} \quad (5.18)$$

das Schrödinger-Anfangswertproblem durch

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi_0\rangle \quad , \quad (5.19)$$

wenn zum Zeitpunkt $t = 0$ der Anfangszustand $|\psi_0\rangle$ vorliegt. Unterziehen wir den Operator $U(t)$ einer positiven LF-Transformation, erhalten wir die Resolvente von H :

$$\text{LF}_+\{U(t)\} = -i \int_0^\infty dt e^{i(z-H)t} = \frac{1}{z-H} = R_+(z) \quad (\text{Im } z > 0) \quad . \quad (5.20)$$

Vollziehen wir stattdessen eine negative LF-Transformation, so erhalten wir die negative Resolvente:

$$\text{LF}_-\{U(t)\} = -i \int_{-\infty}^0 dt e^{i(z-H)t} = \frac{1}{H-z} = -R_-(z) \quad (\text{Im } z < 0) \quad . \quad (5.21)$$

Dieses Ergebnis hätten wir auch durch Benutzung von (4.8) erhalten können, da der Zeitpropagator zeitsymmetrisch im Sinne von (4.7) ist. Zusammengefaßt ergibt sich:

$$R(z) = \begin{cases} R_+(z) & ; \text{Im } z > 0 \\ -R_-(z) & ; \text{Im } z < 0 \end{cases} \quad . \quad (5.22)$$

Wir haben bei der Transformation jeweils Informationen über negative bzw. positive Zeiten verloren. Infolgedessen existiert das Integral und damit der Operator $\pm R(z)$ nur für $\text{Im } z > 0$ bzw. $\text{Im } z < 0$, ist dort aber holomorph. Man kann ihn aber auf die reelle Achse von oben/unten fortsetzen. Dabei erhält man den retardierten/avancierten Green-Operator im Energiebild:

Definition 11 (Green-Operator im Energiebild) Für $E \in \mathbb{R}$ sind die **Green-Operatoren** $G^\pm(E)$ des Hamiltonoperators H definiert durch

$$G^\pm(E) := R(E \pm i\epsilon) \quad (5.23)$$

$$= \frac{1}{E \pm i\epsilon - H} \quad . \quad (5.24)$$

Dabei wollen wir hier, wie im folgenden auch, stets ϵ als infinitesimale positive Größe betrachten, d.h. $\epsilon \rightarrow +0$ lesen. Auf dem Teil der reellen Achse, wo kein Spektrum liegt, stimmen die Fortsetzungen überein, da die Resolvente dort holomorph ist:

$$\text{auf } \mathbb{R} \setminus \sigma : \quad G^+(E) = G^-(E) \quad . \quad (5.25)$$

Wenn wir die Beziehung

$$\frac{1}{E \pm i\epsilon - E_0} = \frac{\mathcal{P}_{E_0}}{E - E_0} \mp i\pi\delta(E - E_0) \quad (5.26)$$

ausnutzen, können wir die Green-Operatoren schreiben als

$$G^\pm(E) = \frac{\mathcal{P}_E}{E - H} \mp i\pi\delta(E - H) \quad . \quad (5.27)$$

Dabei ist \mathcal{P}_E die Cauchy-Hauptwert-Distribution, definiert durch

$$\int_a^b dE' \mathcal{P}_E f(E') := \mathcal{P}_E \int_a^b dE' f(E') = \left\{ \int_a^{E-\epsilon} + \int_{E+\epsilon}^b \right\} dE' f(E') \quad , \quad (5.28)$$

und $\delta(E - H)$ eine operatorwertige δ -Distribution mit der Erklärung

$$\delta(E - H)|\psi(E')\rangle = \delta(E - E')|\psi(E')\rangle \quad . \quad (5.29)$$

Wir wenden diese Distribution auf die Einheit an:

$$\delta(E - H)\mathbb{1} = \int dE' \delta(E - H)|\psi(E')\rangle\langle\psi(E')| \quad (5.30)$$

$$= \int dE' \delta(E - E')|\psi(E')\rangle\langle\psi(E')| = |\psi(E)\rangle\langle\psi(E)| \quad . \quad (5.31)$$

Man erhält also die Identität

$$\delta(E - H) = |\psi(E)\rangle\langle\psi(E)| \quad . \quad (5.32)$$

Es ergibt sich sofort für eine Funktion $f(E)$:

$$\int dE \delta(E - H)f(E) := f(H) \quad . \quad (5.33)$$

Die beiden Green-Operatoren sind zueinander adjungiert,

$$(G^\pm)^\dagger = G^\mp \quad , \quad (5.34)$$

und ihre Differenz ergibt

$$G^+(E) - G^-(E) = -2\pi i\delta(E - H) = -2\pi i|\psi(E)\rangle\langle\psi(E)| \quad . \quad (5.35)$$

5.2.2 Green-Operatoren im Zeitbild

Die Resolvente $R(z)$ läßt sich invers LF-transformieren. Die Kurve Z muß durch die Resolventenmenge von $R(z)$ gelegt werden und von $-\infty$ bis $+\infty$ verlaufen. Da das Spektrum auf der reellen Achse liegt, ergeben sich zwei Möglichkeiten: Entweder, man legt Z über die reelle Achse (Z_+) oder darunter (Z_-). Damit ergeben sich zwei verschiedene inverse Transformationen:

$$U_{\pm}(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{Z_{\pm}} dz \frac{e^{-izt}}{z - H} \quad . \quad (5.36)$$

Die Anwendung der obigen Gleichung auf $|\psi(E)\rangle$ bewirkt:

$$U_{\pm}(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{Z_{\pm}} dz \frac{e^{-izt}}{z - E} |\psi(E)\rangle \quad . \quad (5.37)$$

Nehmen wir das über der reellen Achse gelegene Z_+ an. Der Integralkern e^{-izt} läßt für negative Zeiten $t < 0$ einen Halbkreis in der oberen Halbebene zu. Da die Resolvente hier holomorph ist, ergibt die Integration Null. Für positive Zeiten $t > 0$ läßt sich ein Halbkreis in der unteren Halbebene konstruieren. Jeder Punkt E liegt unterhalb von Z_+ und oberhalb von Z_- . So erhält man mit Hilfe des Residuensatzes für LF-Transformationen (siehe Seite 39):

$$U_{\pm}(t)|E\rangle = \pm\theta(\pm t)e^{-iEt}|\psi(E)\rangle \quad . \quad (5.38)$$

Mit der Spektralzerlegung des Hamiltonoperators

$$H = \int dE E |\psi(E)\rangle \langle \psi(E)| \quad (5.39)$$

ergibt sich

$$U_{\pm}(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{Z_+} dz \int dE \frac{e^{-izt}}{z - E} |\psi(E)\rangle \langle \psi(E)| \quad (5.40)$$

$$= \pm\theta(\pm t) \int dE e^{-iEt} |\psi(E)\rangle \langle \psi(E)| = \pm\theta(t) e^{-iHt} \quad . \quad (5.41)$$

Zusammengefaßt:

$$U(t) = \begin{cases} U_+(t) & ; t > 0 \\ -U_-(t) & ; t < 0 \end{cases} \quad . \quad (5.42)$$

Die beiden erhaltenen Operatoren sind bis auf den imaginären Vorfaktor der in der Streutheorie verwendete **avancierte** bzw. **retardierte Green-Operator**:

Definition 12 (Green-Operator im Zeitbild) Für $E \in \mathbb{R}$ sind die **Green-Operatoren** $\mathcal{G}^{\pm}(t)$ des Hamiltonoperators H definiert durch

$$\mathcal{G}_{\pm}(t) = \pm i\theta(\pm t) e^{-iHt} \quad . \quad (5.43)$$

5.2.3 Zusammenhänge

Nun werden wir den Zusammenhang zwischen den Green-Operatoren $G_{\pm}(E)$ und $\mathcal{G}_{\pm}(t)$ untersuchen. Im folgenden habe der Hamiltonoperator wieder ein beliebiges gemischtes Spektrum. Die inverse LF-Transformation der Resolvente $R(z)$ lautet gemäß (5.36):

$$U_{\pm}(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{Z_{\pm}} dz e^{-izt} R(z) \quad . \quad (5.44)$$

Da die Resolvente nur auf der positiven Halbachse nicht analytisch ist, kann man die Kurve Z_+ für positive Zeiten ($t > 0$) so verformen, daß sie aus dem positiv Unendlichen knapp unterhalb der reellen Achse kommt und im Uhrzeigersinn um das Spektrum von H herum zurück ins positiv Unendliche knapp oberhalb der reellen Achse führt (siehe Abbildung 5.1). Für negative Zeiten ($t < 0$) läßt sich dagegen die Kurve Z_- entsprechend verformen, so daß sie der Kurve C gleicht, jedoch die Umgekehrte Orientierung hat. Damit gilt:

$$U_{\pm}(t) = \pm \frac{i}{2\pi} \int_C dz e^{-izt} R(z) \quad . \quad (5.45)$$

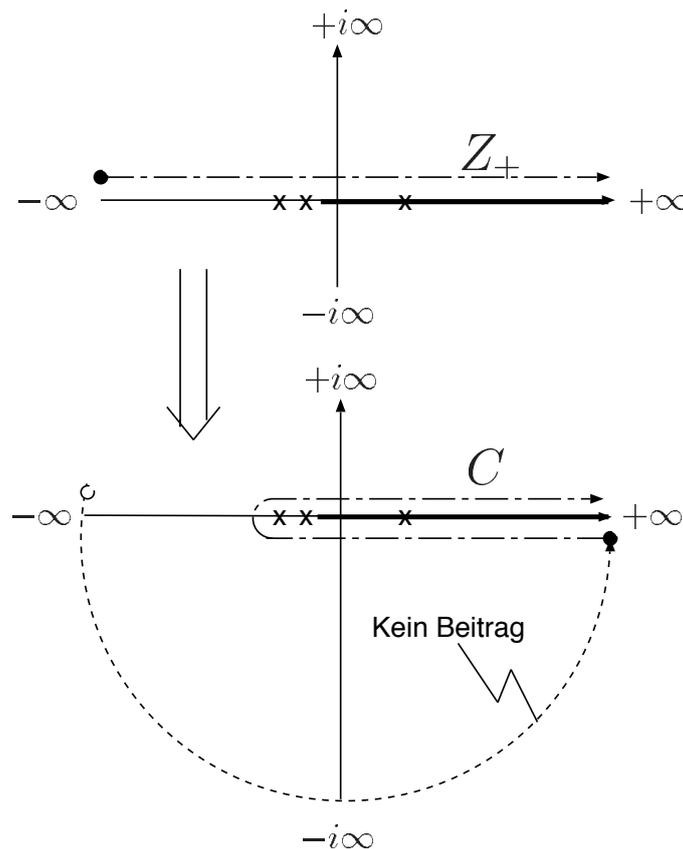


Abbildung 5.1: Verformung des Integrationsweges Z_+ oberhalb der reellen Achse in die Kurve C , die sich von oben und unten an das Spektrum anschmiegt. Dies gelingt nur für $t > 0$, da sonst der Halbkreis nicht in der unteren Halbebene geschlossen werden darf. Für $t < 0$ liegt die Kurve Z_- unterhalb der reellen Achse. Es ergibt sich dann durch Schließen in der oberen Halbebene die gleiche Kurve in umgekehrter Orientierung.

Der Operator $U_+(t)$ verschwindet auf der negativen Halbachse, läßt sich aber ohne Schwierigkeiten analytisch zu $U(t)$ fortsetzen. Analog läßt sich der Operator $-U_-(t)$ zu $-U(t)$ fortsetzen. Das wechselnde Vorzeichen ist uns bereits begegnet, als wir den Zeitpropagator positiv/negativ LF-transformiert hatten und sich die positive/negative Resolvente ergab. Die Transformationen sind also insofern konsistent, als eine positive/negative LF-Transformation durch eine positive/negative LF-Rücktransformation wieder rückgängig gemacht werden kann. Unter Verwendung von (5.42) erhalten wir:

$$U(t) = \frac{i}{2\pi} \int_C dz e^{-izt} R(z) \quad . \quad (5.46)$$

Die Resolvente besitzt bei den diskreten Eigenwerten E_k isolierte Singularitäten. Durch weitere Verformung der Integrationskurve spaltet man einzelne Kreisintegrale um die Singularitäten ab (siehe Abbildung 5.2). Darauf läßt sich der Cauchysche Integralsatz anwenden, der die Summe der Residuen an den umschlossenen Polen liefert. Untersuchen wir den kontinuierlichen Beitrag. Die Kurve C_c verläuft knapp unterhalb des kontinuierlichen Spektrums σ_c und in entgegengesetzter Richtung knapp oberhalb wieder zurück. Dem entspricht die Integration der Differenz der analytischen Fortsetzungen der Resolvente von oben bzw. unten, integriert über das kontinuierliche Spektrum. Dies sind gerade die Green-Operatoren. Insgesamt erhält man:

$$U(t) = \sum_k e^{-iE_k t} \text{Res}_{E_k} R(z) + \frac{i}{2\pi} \int_{\sigma_c} dE e^{-iEt} \{G^+(E) - G^-(E)\} \quad . \quad (5.47)$$

Da die isolierten Pole von einfacher Ordnung sind, wird das Residuum durch

$$\text{Res}_{E_k} R(z) = \lim_{z \rightarrow E_k} (z - E_k) R(z) \quad (5.48)$$

gebildet.

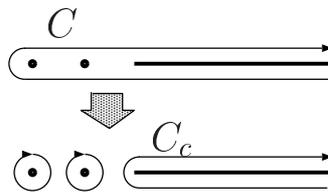


Abbildung 5.2: Die Integrationskurve umfaßt das kontinuierliche und das diskrete Spektrum. Dieses besteht aus den Singularitäten der Resolvente. Der Beitrag des diskreten Spektrums kann daher abgespalten werden. Übrig bleibt die Kurve C_c .

Fazit

- Zeitfunktionen der Zukunft/Vergangenheit ($t \geq 0/t \leq 0$) entsprechen Energiefunktionen, die analytisch von oben/unten auf die reelle Achse fortgesetzt werden.
- Zeitsymmetrische Funktionen enthalten auf jeder Halbachse die gesamte Information, d.h. Zukunft und Vergangenheit sind hier äquivalent. Der Zeitpropagator $U(t)$ ist zeitsymmetrisch.
- Zeitpropagator $U(t)$ und Resolvente $R(z)$ enthalten beide in gleichem Maße die gesamte Information über die Dynamik des Systems. Sie sind durch eine LF-Transformation miteinander verbunden. Die Green-Operatoren $G^\pm(E)$ entstehen durch analytische Fortsetzung der Resolvente von oben/unten auf die reelle Achse.

5.3 Eigenvektoren

In der Resolvente stecken nicht nur Informationen über das Spektrum, sondern auch über die Eigenvektoren von H .

Man definiert einen **Eingangszustand** $|\psi^+(E)\rangle$ und einen **Ausgangszustand** $|\psi^-(E)\rangle$ als Residualvektoren an den kritischen Stellen der Resolvente, d.h. den Spektralpunkten $E \in \sigma$ von H durch:

$$c_E |\psi^\pm(E)\rangle := \lim_{z \rightarrow E \pm i\epsilon} (z - E)R(z)|\psi\rangle \quad . \quad (5.49)$$

Die Faktoren $c_E = \langle \psi^\pm(E) | \psi \rangle$ müssen so gewählt werden, daß die Vektoren $|\psi^\pm(E)\rangle$ normiert sind. Die rechte Seite in (5.49) ist also nur dann ungleich dem Nullvektor, wenn

$$\lim_{z \rightarrow E \pm i\epsilon} \langle \varphi | R(z) | \psi \rangle \rightarrow \infty \quad . \quad (5.50)$$

für ein $|\varphi\rangle$. Wenn $|\psi\rangle$ ein Hilbertvektor ist, dann ist E gemäß (5.7) ein diskreter Eigenwert von H . Ist dagegen $|\psi\rangle$ ein uneigentlicher Vektor, dann gilt obige Gleichung nur für einen Testvektor $|\varphi\rangle$ und E ist gemäß (5.8) ein kontinuierlicher Eigenwert. Die Gleichung ist demnach nur sinnvoll, falls $|\psi^\pm(E)\rangle$ und $|\psi\rangle$ entweder beide Hilbertvektoren sind und E diskreter Eigenwert ist oder beide uneigentliche Vektoren sind und E kontinuierlicher Eigenwert ist. Außerdem darf $|\psi\rangle$ nicht der Nullvektor sein. Ansonsten ist aber die Wahl von $|\psi\rangle$ freigestellt. Die Ein- und Ausgangszustände sind Eigenvektoren des Gesamt-Hamiltonoperators H zum Eigenwert E :

$$H|\psi^\pm(E)\rangle = E|\psi^\pm(E)\rangle \quad . \quad (5.51)$$

Um dies zu sehen, läßt man den Operator $(E \pm i\epsilon - H)$ auf sie wirken:

$$(E \pm i\epsilon - H)|\psi^\pm(E)\rangle = (E \pm i\epsilon - H) \frac{i\epsilon}{(E \pm i\epsilon - H)} |\psi\rangle = i\epsilon |\psi\rangle = |o\rangle \quad (5.52)$$

$$\Rightarrow H|\psi^\pm(E)\rangle = E|\psi^\pm(E)\rangle \quad (5.53)$$

Falls E ein diskreter Eigenwert ist, liegt an dieser Stelle eine isolierte Singularität von $R(z)$ vor. Damit ist die Unterscheidung der Annäherung von oben oder unten an diese Stelle unnötig. Zusammengefaßt ergibt sich

Diskrete Eigenvektoren

Liegt bei E_k ein diskreter Eigenwert von H vor, so bestimmt sich ein zugeordneter Eigenvektor durch

$$|\psi_k\rangle := \frac{1}{c_k} \lim_{z \rightarrow E_k} (z - E_k) R(z) |\psi\rangle \quad (5.54)$$

für einen Hilbertvektor $|\psi\rangle$, der jedoch nicht der Nullvektor ist, und für eine zu bestimmende Normierungskonstante $c_k = \langle \psi_k | \psi \rangle$. Das Residuum der Resolvente an den diskreten Eigenwerten E_k ergibt

$$\text{Res}_{E_k} R(z) = \lim_{z \rightarrow E_k} (z - E_k) R(z) = |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \quad . \quad (5.55)$$

Kontinuierliche Eigenvektoren

Liegt bei E ein kontinuierlicher Eigenwert von H vor, so bestimmt sich ein zugeordneter Eigenvektor durch

$$|\psi^\pm(E)\rangle := \frac{1}{c(E)} \lim_{z \rightarrow E \pm i\epsilon} (z - E) R(z) |\chi\rangle \quad (5.56)$$

für einen uneigentlichen Vektor $|\chi\rangle$ und für eine zu bestimmende Normierungskonstante $c^\pm(E) = \langle \psi^\pm(E) | \psi \rangle$. Das (verallgemeinerte) Residuum der Resolvente an den kontinuierlichen Eigenwerten E ergibt

$$\text{Res}_E R(z) := \lim_{z \rightarrow E \pm i\epsilon} (z - E) R(z) = |\psi^\pm(E)\rangle \langle \psi^\pm(E)| \quad . \quad (5.57)$$

Betrachten wir noch einmal Gleichung (5.47):

$$U(t) |\psi\rangle = \sum_k e^{-iE_k t} \text{Res}_{E_k} R(z) + \frac{i}{2\pi} \int_{\sigma_c} dE e^{-iEt} \{G^+(E) - G^-(E)\} \quad . \quad (5.58)$$

Mit (5.55) enthält der erste Beitrag die diskreten Eigenvektoren. Wenn wir nun noch die Relation (5.35) nutzen, erhalten wir insgesamt

$$U(t) = \sum_k e^{-iE_k t} |\psi_k\rangle \langle \psi_k| + \int_{\sigma_c} dE e^{-iEt} |\psi^\pm(E)\rangle \langle \psi^\pm(E)| \quad . \quad (5.59)$$

Wir haben hiermit die Konsistenz aller Resultate gezeigt und dabei einige wichtige Zusammenhänge beleuchtet. Die Ergebnisse dieses Kapitels werden zum Verständnis der Konzepte der Brüsseler Schule wesentlich beitragen.

Kapitel 6

Lösung im Rahmen der Standard-Quantenmechanik

In diesem Kapitel werden wir mit den Methoden, die wir bisher bereitgestellt haben, an das Friedrichsmodell herangehen. Wir bleiben dabei ausschließlich im Rahmen der Standard-Quantenmechanik, d.h. wir verwenden nur Objekte und Rechenvorschriften, die in diesem Rahmen definierbar sind. Wir werden sehen, daß das Friedrichsmodell in diesem Rahmen vollständig lösbar ist.

6.1 Konstruktion der Resolvente

Die Ergebnisse des letzten Kapitels lassen sich konkret auf das Friedrichsmodell anwenden. Offenbar spielt die Resolvente eine sehr zentrale Rolle, daher wollen wir untersuchen, wie sie im Friedrichsmodell tatsächlich aussieht. Gehen wir vom Hamiltonoperator $H = H_0 + W$ des Friedrichsmodells aus und definieren die Resolvente R_0 des ungestörten Hamiltonoperators H_0 durch

$$R_0(z) = \frac{1}{z - H_0} \quad . \quad (6.1)$$

Wir benutzen nun die **zweite Resolventenidentität**

$$R = R_0 + RW R_0 \quad (6.2)$$

und lassen sie auf den Anfangszustand $|1\rangle$ wirken:

$$R(z)|1\rangle = R_0(z)|1\rangle + R(z)WR_0(z)|1\rangle \quad (6.3)$$

$$= \frac{1}{z - \omega_1}|1\rangle + \int_0^\infty d\omega \frac{W(\omega)}{z - \omega_1} R(z)|\omega\rangle \quad . \quad (6.4)$$

Danach wenden wir sie auf den freien Zustand $|\omega\rangle$ an:

$$R(z)|\omega\rangle = R_0(z)|\omega\rangle + R(z)WR_0(z)|\omega\rangle \quad (6.5)$$

$$= \frac{1}{z - \omega}|\omega\rangle + \frac{W^*(\omega)}{z - \omega} R(z)|1\rangle \quad . \quad (6.6)$$

Wir setzen (6.6) in (6.4) ein

$$R(z)|1\rangle = \frac{1}{z - \omega_1}|1\rangle + \int_0^\infty d\omega \frac{W(\omega)}{z - \omega} \left[\frac{1}{z - \omega}|\omega\rangle + \frac{W^*(\omega)}{z - \omega}R(z)|1\rangle \right] , \quad (6.7)$$

und erhalten nach einigen algebraischen Umformungen

$$R(z)|1\rangle = \frac{1}{\eta(z)} \left[|1\rangle + \int_0^\infty d\omega \frac{W(\omega)}{z - \omega}|\omega\rangle \right] , \quad (6.8)$$

mit der bereits definierten Funktion

$$\eta(z) = z - \omega_1 - \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{z - \omega} . \quad (6.9)$$

Gleichung (6.8) läßt sich in (6.6) einsetzen, mit dem Ergebnis

$$R(z)|\omega\rangle = \frac{1}{z - \omega}|\omega\rangle + \frac{W^*(\omega)}{(z - \omega)\eta(z)} \left[|1\rangle + \int_0^\infty d\omega' \frac{W(\omega')}{z - \omega'}|\omega'\rangle \right] . \quad (6.10)$$

Insgesamt erhält man für die Resolvente die Darstellung

$$\boxed{R(z) = \frac{1}{\eta(z)} \left[|1\rangle + \int_0^\infty d\omega \frac{W(\omega)}{z - \omega}|\omega\rangle \right] \left[\langle 1| + \int_0^\infty d\omega \frac{W^*(\omega)}{z - \omega}\langle\omega| \right] + \int_0^\infty d\omega \frac{1}{z - \omega}|\omega\rangle\langle\omega|} . \quad (6.11)$$

Der Zeitpropagator hat die Darstellung (5.46)

$$U(t) = \frac{i}{2\pi} \int_C dz e^{-izt} R(z) . \quad (6.12)$$

Damit läßt sich für die Überlebensamplitude

$$c_1(t) = \langle 1|U(t)|1\rangle \quad (6.13)$$

direkt hinschreiben:

$$c_1(t) = \frac{i}{2\pi} \int_C dz e^{-izt} \langle 1|R(z)|1\rangle . \quad (6.14)$$

Mit (6.11) ergibt dies die Lösung des dynamischen Problems:

$$\boxed{c_1(t) = \frac{i}{2\pi} \int_C dz \frac{e^{-izt}}{\eta(z)}} . \quad (6.15)$$

6.2 Konstruktion der Eigenvektoren

Obwohl man bereits die Kenntnis der Resolvente als ausreichend betrachten kann, um die Dynamik eines Modells eindeutig zu klären, lassen sich auch interessante Erkenntnisse gewinnen, wenn man die zeitunabhängige Schrödingergleichung, d.h. das Eigenwertproblem des Hamiltonoperators löst.

6.2.1 Diskrete Eigenvektoren

Gilt für einen Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ und eine Zahl $E_1 \in \mathbb{R}$

$$\langle \varphi | R(z) | \psi \rangle \rightarrow \infty \quad (z \rightarrow E_1) \quad (6.16)$$

für ein $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$, dann liegt gemäß (5.7) bei E_1 ein diskreter Eigenwert von H vor. Wir wählen für $|\psi\rangle$ den freien Zustand $|1\rangle$ und erhalten gemäß (6.8)

$$R(z)|1\rangle = \frac{1}{\eta(z)} \left[|1\rangle + \int_0^\infty d\omega \frac{W(\omega)}{z - \omega} |\omega\rangle \right] . \quad (6.17)$$

Offenbar sind die diskreten Eigenwerte von H die Nullstellen der Funktion $\eta(z)$. Also schauen wir uns die Funktion näher an. Da das Spektrum selbstadjungierter Operatoren auf der reellen Achse liegt, suchen wir dort nach den Nullstellen von $\eta(z)$. Die Funktion $\eta(z)$ besitzt einen Schnitt entlang der positiv-reellen Achse. Es gibt zwei Funktionen $\eta_\pm(E)$, die aus der analytischen Fortsetzung von $\eta(z)$ auf die reelle Achse von oben bzw. von unten hervorgehen:

$$E \in \mathbb{R} : \quad \eta_\pm(E) := \eta(E \pm i\epsilon) = \langle 1 | G^\pm(E) | 1 \rangle . \quad (6.18)$$

Man erhält

$$\eta_\pm(E) = E - \omega_1 - \int_0^\infty d\omega |W(\omega)|^2 \left[\frac{\mathcal{P}}{E - \omega} \mp \delta(E - \omega) \right] , \quad (6.19)$$

$$\Rightarrow \quad \eta_\pm(E) = E - \omega_1 - \mathcal{P} \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{z - \omega} \pm i\pi |W(E)|^2 \theta(E) . \quad (6.20)$$

Die Differenz der beiden Funktionen beträgt

$$\eta_+(E) - \eta_-(E) = 2\pi i |W(E)|^2 \theta(E) , \quad (6.21)$$

und nach einfacher algebraischer Umformung der obigen Formel erhält man

$$\frac{1}{\eta_-(E)} - \frac{1}{\eta_+(E)} = \frac{2\pi i |W(E)|^2}{\eta_+(E)\eta_-(E)} \theta(E) . \quad (6.22)$$

Nun sucht man die Nullstellen. Im Falle $E < 0$ sind die beiden Funktionen identisch:

$$E < 0 : \quad \eta_+(E) = \eta_-(E) = \eta(E) = E - \omega_1 - \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{E - \omega} . \quad (6.23)$$

Die Nullstellen bestimmen sich aus

$$\eta(E) \stackrel{!}{=} 0 \quad (6.24)$$

$$\Leftrightarrow E = \omega_1 + \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{E - \omega} . \quad (6.25)$$

Die Ungleichung $E < 0$ liefert

$$0 < \omega_1 + \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{E - \omega} , \quad (6.26)$$

$$\Leftrightarrow \omega_1 < \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega - E} < \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega} . \quad (6.27)$$

Wenn demnach die Störung W die Bedingung

$$\omega_1 < \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega} \quad (6.28)$$

erfüllt, dann gibt es einen negativen diskreten Eigenwert E_1 von H mit der impliziten Definition

$$E_1 = \omega_1 - \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega - E_1} . \quad (6.29)$$

Im Falle $E \geq 0$ gibt es keine reellen Nullstellen, denn nun gilt:

$$E \geq 0 : \quad \eta_\pm(E) \stackrel{!}{=} 0 \quad (6.30)$$

$$\Leftrightarrow E = \omega_1 + \mathcal{P} \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{E - \omega} \mp i\pi |W(E)|^2 . \quad (6.31)$$

Die ersten beiden Terme sind reell, der dritte rein imaginär, womit E keine reelle Zahl sein kann, außer wenn $W(\omega)$ verschwindet, also gar keine Störung vorliegt. In diesem Fall gibt es einen diskreten Eigenwert ω_1 mit dem dazugehörigen Eigenvektor $|1\rangle$.

Es gibt also entweder keinen oder einen negativen diskreten Eigenwert E_1 . Den Eigenvektor erhält man durch

$$|\psi_1\rangle = \lim_{z \rightarrow E_1} (z - E_1) R(z) |1\rangle \quad (6.32)$$

$$= \frac{1}{\eta'(E_1)} \left[|1\rangle + \int_0^\infty d\omega \frac{W(\omega)}{E_1 - \omega} |\omega\rangle \right] . \quad (6.33)$$

Seine Norm lautet

$$\|\psi_1\| = \frac{1}{\eta'(E_1)} \left[1 + \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{(E_1 - \omega)^2} \right] = \frac{1}{\eta'(E_1)} . \quad (6.34)$$

Damit lautet der normierte Eigenvektor

$$\boxed{|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{\eta'(E_1)}} \left[|1\rangle + \int_0^\infty d\omega \frac{W(\omega)}{E_1 - \omega} |\omega\rangle \right]} . \quad (6.35)$$

6.2.2 Kontinuierliche Eigenvektoren

Gilt für eine Zahl E und einen uneigentlichen Vektor $|\psi\rangle \in \Phi^\dagger$

$$\langle \varphi | R(z) | \psi \rangle \rightarrow \infty \quad (z \rightarrow E) \quad (6.36)$$

für einen Testvektor $|\varphi\rangle \in \Phi$, dann liegt gemäß (5.8) bei E ein kontinuierlicher Eigenwert vor. Wir wählen für $|\psi\rangle$ den freien Zustand $|\omega\rangle$ und erhalten gemäß (6.10)

$$R(z)|\omega\rangle = \frac{1}{z-\omega}|\omega\rangle + \frac{W^*(\omega)}{(z-\omega)\eta(z)} \left[|1\rangle + \int_0^\infty d\omega' \frac{W(\omega')}{z-\omega'} |\omega'\rangle \right] . \quad (6.37)$$

Wie man sieht, divergiert dieser Ausdruck für $z \rightarrow \omega$. Damit können wir die kontinuierlichen Eigenwerte von H mit denjenigen von H_0 identifizieren, d.h. $E \in [0, \infty)$. Die Ein- und Ausgangszustände berechnen sich durch die Fortsetzung von oben und von unten:

$$|\psi^\pm(\omega)\rangle = \lim_{z \rightarrow \omega \pm i\epsilon} (z-\omega)R(z)|\omega\rangle . \quad (6.38)$$

Man erhält

$$|\psi^\pm(\omega)\rangle = |\omega\rangle + \frac{W^*(\omega)}{\eta_\pm(\omega)} \left[|1\rangle + \int_0^\infty d\omega' \frac{W(\omega')}{\omega - \omega' \pm i\epsilon} |\omega'\rangle \right] , \quad (6.39)$$

bzw.

$$\langle \psi^\pm(\omega) | = \langle \omega | + \frac{W(\omega)}{\eta_\mp(\omega)} \left[\langle 1 | + \int_0^\infty d\omega' \frac{W^*(\omega')}{\omega - \omega' + \mp i\epsilon} \langle \omega' | \right] . \quad (6.40)$$

Eine längliche Rechnung bestätigt, daß

$$\langle \psi^\pm(\omega) | \psi^\pm(\omega') \rangle = \delta(\omega - \omega') , \quad (6.41)$$

womit das Problem der Normierung entfällt.

6.2.3 Resultierende Spektralzerlegungen

Kontinuierliches Spektrum

Falls die Wechselwirkung W so beschaffen ist, daß sie die Bedingung

$$\int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega} \leq \omega_1 \quad (6.42)$$

erfüllt, dann ist das Spektrum von H rein kontinuierlich. Es gibt dann keinen diskreten Eigenvektor von H und jedes der beiden Systeme $B_\pm = \{|\psi^\pm(\omega)\rangle\}_{\omega \in [0, \infty)}$ der kontinuierlichen Eigenvektoren bildet eine vollständige Basis des Hilbertraums:

$$\int_0^\infty d\omega |\psi^\pm(\omega)\rangle \langle \psi^\pm(\omega)| = \mathbb{1} , \quad (6.43)$$

$$\langle \psi^\pm(\omega) | \psi^\pm(\omega') \rangle = \delta(\omega - \omega') . \quad (6.44)$$

Damit läßt sich der Hamiltonoperator in seiner Eigenbasis zerlegen in

$$H = \int_0^\infty d\omega \omega |\psi^\pm(\omega)\rangle\langle\psi^\pm(\omega)| \quad , \quad (6.45)$$

und der Zeitentwicklungsoperator erhält die Darstellung

$$U(t) = \int_0^\infty d\omega e^{-i\omega t} |\psi^\pm(\omega)\rangle\langle\psi^\pm(\omega)| \quad . \quad (6.46)$$

Die Projektionsamplitude der Basisvektoren auf den Anfangszustand $|1\rangle$ ist

$$\langle 1|\psi^\pm(\omega)\rangle = \frac{W^*(\omega)}{\eta_\pm(\omega)} \quad , \quad (6.47)$$

$$\langle\psi^\pm(\omega)|1\rangle = \frac{W(\omega)}{\eta_\mp(\omega)} \quad , \quad (6.48)$$

und damit folgt für die Überlebensamplitude

$$c_1(t) = \langle 1|U(t)|1\rangle = \int_0^\infty d\omega e^{-i\omega t} \langle 1|\psi^\pm(\omega)\rangle\langle\psi^\pm(\omega)|1\rangle \quad (6.49)$$

$$= \int_0^\infty d\omega e^{-i\omega t} \frac{|W(\omega)|^2}{\eta_+(\omega)\eta_-(\omega)} \quad . \quad (6.50)$$

Mit der Formel (6.22) läßt sich dies umformen zu

$$c_1(t) = \int_0^\infty d\omega e^{-i\omega t} \frac{1}{2\pi i} \left[\frac{1}{\eta_-(\omega)} - \frac{1}{\eta_+(\omega)} \right] \quad . \quad (6.51)$$

Da $\eta_\pm(\omega)$ die Grenzfunktionen von $\eta(z)$ von oben bzw. unten auf die reelle Achse sind, entspricht das obige Integral der Integration über die Kurve C (siehe Abbildung 5.1), so daß wir insgesamt erhalten

$$c_1(t) = \frac{i}{2\pi} \int_C dz \frac{e^{-izt}}{\eta(z)} \quad , \quad (6.52)$$

in Übereinstimmung mit den vorangegangenen Resultaten.

Gemischtes Spektrum

Erfüllt die Wechselwirkung nicht die Bedingung (6.42), dann gibt es einen diskreten Eigenwert von H auf der negativen Halbachse bei E_1 . Es gibt nun wieder zwei verschiedene vollständige Basen $B_\pm = \{|\psi_1\rangle, |\psi^\pm(\omega)\rangle\}_{\omega \in [0, \infty)}$. Die entsprechende Vollständigkeit lautet:

$$|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \int_0^\infty d\omega |\psi^\pm(\omega)\rangle\langle\psi^\pm(\omega)| = \mathbb{1} \quad . \quad (6.53)$$

Als Konsequenz erhält der Zeitentwicklungsoperator die Darstellung

$$U(t) = e^{-iE_1 t} |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \int_0^\infty d\omega e^{-i\omega t} |\psi^\pm(\omega)\rangle\langle\psi^\pm(\omega)| \quad . \quad (6.54)$$

Die Projektionsamplitude des diskreten Basisvektors auf den Anfangszustand $|1\rangle$ ist

$$\langle 1|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{\eta'(E_1)}} \quad , \quad (6.55)$$

und damit folgt für die Überlebensamplitude

$$c_1(t) = \langle 1|U(t)|1\rangle = \frac{e^{-iE_1t}}{\eta'(E_1)} + \int_0^\infty d\omega e^{-i\omega t} \frac{|W(\omega)|^2}{\eta_+(\omega)\eta_-(\omega)} \quad (6.56)$$

$$= \frac{e^{-iE_1t}}{\eta'(E_1)} + \int_0^\infty d\omega e^{-i\omega t} \frac{1}{2\pi i} \left[\frac{1}{\eta_-(\omega)} - \frac{1}{\eta_+(\omega)} \right] \quad . \quad (6.57)$$

Wieder ergibt sich

$$c_1(t) = \frac{i}{2\pi} \int_C dz \frac{e^{-izt}}{\eta(z)} \quad , \quad (6.58)$$

da die Kurve C um das gesamte Spektrum von H , also auch um E_1 herumführt.

6.3 Versteckte Pole auf Riemann-Flächen

Die Eigenschaft der Instabilität ist eng verknüpft mit der Anwesenheit von komplexen Polen der Resolvente. Da die Pole der Resolvente die Eigenwerte des Hamiltonoperators sind, scheint dies im Widerspruch zu der Tatsache zu stehen, daß der Hamiltonoperator als selbstadjungierter Operator, ausschließlich reelle Eigenwerte besitzt. Tatsächlich sind die komplexen Pole der Resolvente auch nirgends auf der komplexen Ebene zu finden, sondern vielmehr auf ihrer *zweiten Riemann-Fläche*.

Wir werden den Begriff der Riemann-Flächen klären und dann zeigen, welche Konsequenzen die Anwesenheit von Polen auf der zweiten Riemann-Fläche hat.

Die Resolvente des Friedrichsmodells enthält eine Funktion, die für die isolierten Pole und damit das diskrete Spektrum verantwortlich ist, nämlich $1/\eta(z)$ mit

$$\eta(z) = z - \omega_1 - \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{z - \omega} \quad . \quad (6.59)$$

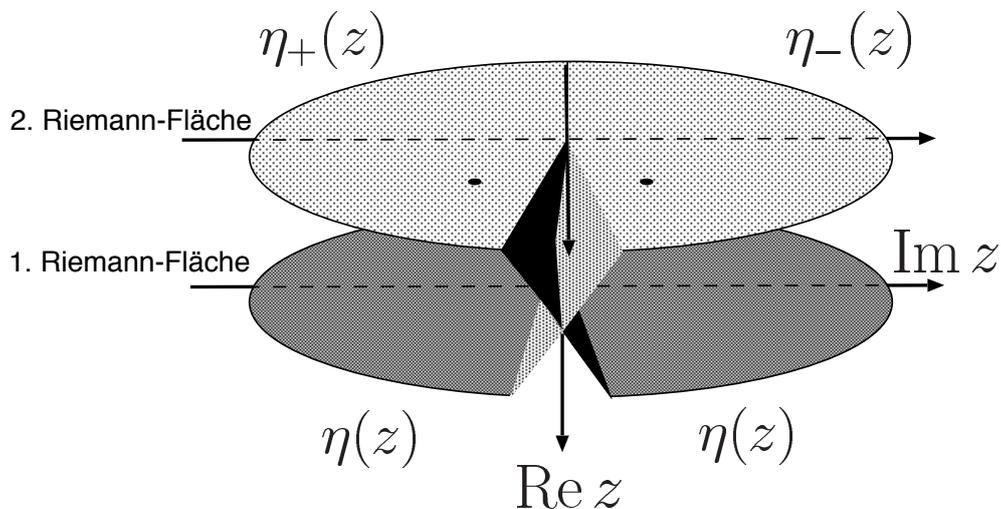


Abbildung 6.1: Die Riemann-Flächen der Funktion $\eta(z)$. Markiert sind die Nullstellen von $\eta(z)$, also die Pole von $1/\eta(z)$, auf der zweiten Riemann-Fläche. Hierauf ist die Abbildungsvorschrift durch $\eta_+(z)$ bzw. $\eta_-(z)$ gegeben.

Diese Funktion besitzt einen Schnitt entlang der positiven Halbachse $[0, \infty)$, denn der Integrand hat eine Definitionslücke bei $z = \omega$, und die Integration über alle positiven ω führt dazu, daß der Definitionsbereich aufgeschnitten wird. Diesem Schnitt kann man sich von oben und unten nähern und erhält jeweils zwei verschiedene Grenzfunktionen $\eta_{\pm}(x)$ als analytische Fortsetzungen auf die positive Halbachse:

$$\omega \in [0, \infty) : \quad \eta_{\pm}(\omega) = \eta(\omega \pm i\epsilon) \quad , \quad (6.60)$$

Anschließend lassen sich diese Grenzfunktionen darüberhinaus ganz auf die untere bzw. obere Halbebene weiter fortsetzen und man erhält:

$$\eta_{\pm}(z) = z - \omega_1 - \mathcal{P} \int_0^{\infty} d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{z - \omega} \pm i\pi |W(z)|^2 \quad . \quad (6.61)$$

Nun führen wir die **Riemann-Flächen** ein. Man kann sie sich vorstellen als übereinandergeschichtete geschlitzte komplexe Ebenen, die an den Schlitzen so miteinander verbunden sind, daß man von einer Seite kommend auf der darüberliegenden und von der anderen Seite kommend auf der darunterliegenden Ebene landet. Falls es eine unterste und oberste Fläche gibt, so sind sie dergestalt miteinander verbunden, daß man von der obersten anstatt höher zu gelangen wieder auf die unterste fällt. Für die Funktion $\eta(z)$ gibt es genau zwei Riemann-Flächen, die an der positiven reellen Achse miteinander verbunden sind. Auf der ersten Riemann-Fläche ist die Funktion $\eta(z)$ definiert. Begibt man sich von oberhalb der reellen Achse über den Schlitz, so landet man auf der zweiten Riemann-Fläche. Auf der unterhalb der reellen Achse liegenden Hälfte dieser Fläche ist die Funktion $\eta_+(z)$ definiert, auf der oberhalb liegenden dagegen $\eta_-(z)$ (siehe dazu Abb. 6.1). Es zeigt sich nun, daß $\eta(z)$ auf der zweiten Riemann-Fläche zwei Nullstellen hat: Einmal im unteren rechten Quadranten und an der konjugiert komplexen Stelle im oberen rechten Quadranten. Benennen wir den Punkt auf der unteren zweiten Riemann-Fläche mit z_1 , so ist er die Lösung der Gleichung

$$\eta_+(z) = 0 \quad (6.62)$$

$$\Leftrightarrow \quad z_1 = \omega_1 + \mathcal{P} \int_0^{\infty} d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{z_1 - \omega} - i\pi |W(z_1)|^2 \quad . \quad (6.63)$$

Bei $z = z_1^*$ liegt dann die Nullstelle von $\eta_-(z)$.

6.4 Die Überlebensamplitude

In diesem Abschnitt werden wir uns der analytischen Lösung (6.15) für die Überlebensamplitude $c_1(t)$ zuwenden. Wir haben diese Lösung auf mehreren Wegen erhalten, doch bisher waren wir nicht dazu gekommen, aus dieser Lösung Informationen über das zeitliche Verhalten zu bekommen. Wir werden die in den letzten Abschnitten bereitgestellten Methoden verwenden, um dies zu bewerkstelligen.

6.4.1 Verformung des Integrationsweges

Betrachten wir den kompakten Ausdruck (6.15) für die Überlebensamplitude. Die Kurve C führt um das Spektrum σ herum. Wir verformen nun den Integrationsweg, so daß er um eine Kurve Γ_+ herumführt, die in den unteren rechten Quadranten reicht und dabei den Pol z_1

freilegt (siehe Abbildung 6.2). Da im Verlaufe der Verformung der obere Teil von C_+ die zweite Riemann-Fläche betreten und den Pol überquert hat, steigt der Wert des Integrals um den Wert eines Kreisintegrals um den Pol. Um dies zu korrigieren, wird das Kreisintegral subtrahiert. In allgemeiner Form gilt für die Verformung eines reellen Integrationsweges X zu einer Kurve Γ , die mit X die Pole z_1, \dots, z_k einschließt:

$$\int_X dx = \int_\Gamma dz - \sum_k \oint_{|z-z_k|=\epsilon} dz = \int_\Gamma dz - 2\pi i \text{Res}_{z_k} \quad (6.64)$$

Die Integration über die verformte Kurve C_+ nennen wir *Hintergrund-Integral* I_{bg} . Insgesamt erhält man

$$c_1(t) = \frac{i}{2\pi} \int_C dz \frac{e^{-izt}}{\eta(z)} = \frac{e^{-iz_1t}}{\eta'_+(z_1)} + \underbrace{\frac{i}{2\pi} \int_{C_+} dz \frac{e^{-izt}}{\eta(z)}}_{I_{bg}} \quad (6.65)$$

Die Kurve C_+ schmiegt sich von unten aus der ersten und von oben aus der zweiten Riemann-Fläche an eine Kurve Γ_+ an. Im Grenzfall ergibt sich für das Hintergrund-Integral:

$$I_{bg} = \frac{i}{2\pi} \int_{C_+} dz \frac{e^{-izt}}{\eta(z)} = \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_+} dz e^{-izt} \left\{ \frac{1}{\eta_+(z)} - \frac{1}{\eta_-(z)} \right\} \quad (6.66)$$

$$= \int_{\Gamma_+} dz e^{-izt} \frac{|W(z)|^2}{\eta_+(z)\eta_-(z)} \quad (6.67)$$

Im ersten Schritt haben wir ausgenutzt, daß $\eta_-(z)$ die analytische Fortsetzung von $\eta(z)$ von unten an die positive Halbachse ist und unterhalb dieser mit $\eta(z)$ zusammenfällt. Im zweiten Schritt wurde die Beziehung (6.22) verwendet. So ergibt sich:

$$c_1(t) = \frac{i}{2\pi} \int_C dz \frac{e^{-izt}}{\eta(z)} = \frac{e^{-iz_1t}}{\eta'_+(z_1)} + \int_{\Gamma_+} dz e^{-izt} \frac{|W(z)|^2}{\eta_+(z)\eta_-(z)} \quad (6.68)$$

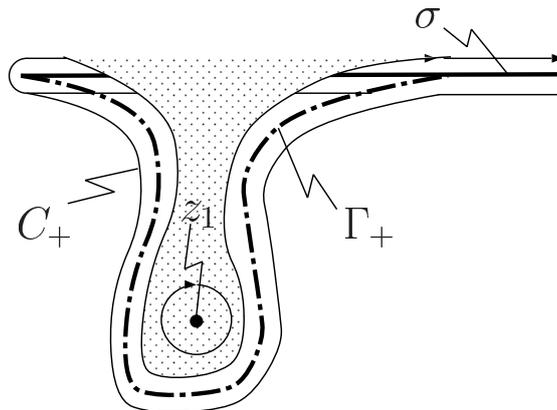


Abbildung 6.2: Verformung der Integrationskurve C , die um das Spektrum σ herum führt, zur Kurve C_+ , die um eine Kurve Γ_+ herumführt. Dabei wird der Pol der Funktion $\eta_+(z)$ bei z_1 freigelegt. Das kontinuierliche Spektrum σ des Hamiltonoperators ist identisch mit der positiven reellen Achse.

Obige Überlegungen gelten für jede Kurve Γ_+ , die von Null ausgehend unterhalb von z_1 verläuft und gegen $+\infty$ strebt. Nun müssen wir unterscheiden:

$t > 0$: Hier ist ein Viertelkreis in den unteren rechten Quadranten erlaubt. Dadurch fällt Γ_+ mit der negativ imaginären Achse zusammen (siehe Abbildung 6.3), womit das Hintergrund-Integral durch

$$i \int_0^\infty dx e^{-xt} \frac{|W(-ix)|^2}{\eta_+(-ix)\eta_-(-ix)} \quad (6.69)$$

berechnet werden kann. Hier wird explizit deutlich, daß der Beitrag des Hintergrund-Integrals für positive Zeiten immer kleiner wird. Denn für große $|z|$ ist

$$\eta_\pm(z) \sim z \quad , \quad (6.70)$$

und damit gilt für große $x = iz$:

$$\frac{1}{\eta_+(-ix)\eta_-(-ix)} \sim -\frac{1}{x^2} \quad . \quad (6.71)$$

Die Wechselwirkung verschwindet ebenfalls, und der Exponentialterm sorgt sogar für exponentiellen Abfall. Daher ist die Näherung

$$I_{bg} \approx 0 \quad (6.72)$$

für genügend großes t sinnvoll. Die Vertreter der Brüsselschule, deren Methoden wir im nächsten Kapitel darstellen, nennen diese Näherung "Pol-Approximation", weil nur der Beitrag des Pols auf der zweiten Riemann-Fläche in Betracht gezogen wird. In diesem Fall ist $\eta'_+(z_1) \approx 1$ und wir erhalten für die Überlebensamplitude den genäherten Ausdruck

$$c_1(t) \approx e^{-iz_1 t} \quad . \quad (6.73)$$

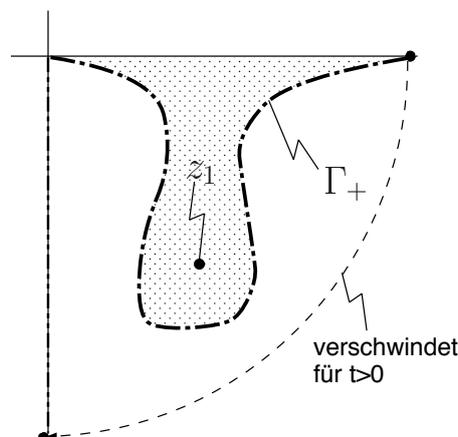


Abbildung 6.3: Verformung der Integrationskurve Γ_+ , so daß sie mit der negativen imaginären Achse zusammenfällt. Dazu muß ein Viertelkreis geschlossen werden, der nur für $t > 0$ keinen Beitrag liefert.

Wenn wir diese genäherte Lösung in das Gleichungssystem einsetzen, erhalten wir die Differentialgleichung für die Amplituden der Feldzustände:

$$\dot{\tilde{c}}_\omega(t) = -ie^{i(\omega-z_1)t}W(\omega) \quad . \quad (6.74)$$

Nach Lösung der Differentialgleichung unter Berücksichtigung der Anfangsbedingung $\tilde{c}_\omega(0) = 0$ und Rücktransformation ins Schrödingerbild ergibt sich

$$c_\omega(t) = \frac{W(\omega)}{\omega - z_1} \left[1 - e^{i(\omega-\omega_1-z_1)t} \right] \quad . \quad (6.75)$$

$t < 0$: Hier ist die Situation genau umgekehrt: Der Beitrag des Pols nimmt zwar für $t \rightarrow -\infty$ exponentiell zu, aber der Beitrag des Hintergrund-Integrals überwiegt ihn, da sich die Integrationskurve Γ_+ überall unterhalb des Pols in der unteren Halbebene befindet und daher mindestens den Beitrag des Pols enthält. Anders als für $t > 0$ kann jedoch die Kurve Γ_+ nun nicht mehr durch einen Viertelkreis auf die negative imaginäre Achse gelegt werden. Sie kann aber auch nicht auf die reelle Achse gelegt werden, da sie unterhalb des Pols bleiben muß, wo ihr Einfluß mit $t \rightarrow -\infty$ exponentiell zunimmt. Daher wird der Beitrag des Hintergrund-Integrals immer dominanter.

Spiegelbildliche Verformung der Integrationskurve

In Richtung Vergangenheit verschwindet der instabile Zustand ebenfalls. Um dies jedoch explizit deutlich zu machen, verformen wir die Kurve C nun zur Kurve C_- , die konjugiert komplex zur Kurve C_+ , d.h. an der reellen Achse gespiegelt ist. Sie führt um eine Kurve Γ_- herum (siehe Abbildung 6.4), die eine gespiegelte Version der Kurve Γ_+ ist. Dabei wird der Pol von $\eta_-(z)$ durch den unteren Teil von C_- freigelegt, was wiederum durch ein entsprechendes Kreisintegral korrigiert werden muß. Der Pol von $\eta_-(z)$ liegt bei z_1^* , und damit ist die Situation

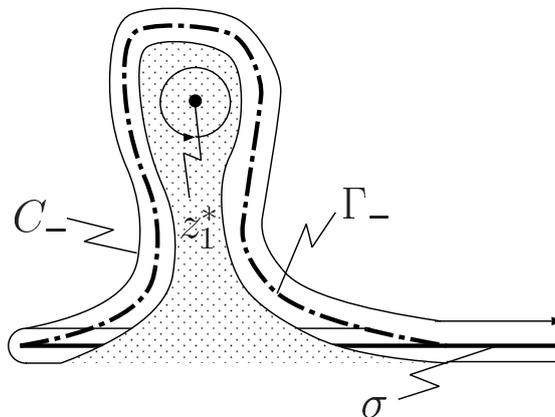


Abbildung 6.4: Verformung der Integrationskurve C zur Kurve C_- , spiegelbildlich zu C_+ . Dabei wird der Pol der Funktion $\eta_-(z)$ freigelegt.

in jeder Hinsicht vollkommen spiegelbildlich. Man erhält dieselben Aussagen für $t < 0$ wie für $t > 0$, jedoch in der zeitlich anderen Richtung. Der Beitrag des Hintergrund-Integrals wird für genügend kleine Zeiten vernachlässigbar, da Γ_- auf die positive imaginäre Achse gelegt werden kann. Dahingegen wird der Beitrag des Pols immer dominanter, der für $t \rightarrow -\infty$ ein exponentielles Abklingen in Richtung der Überlebensamplitude bewirkt.

Fazit

- Der Integrationsweg läßt sich auf zwei Weisen verformen. Jedesmal wird ein Pol der Resolvente auf der zweiten Riemann-Fläche freigelegt. Diese Pole sind spiegelbildlich zueinander, sowie auch die Integrationskurven.
- Die Verformung macht jeweils die Dynamik des Systems in einer Zeitrichtung besonders deutlich.
- Beide Verformungen des Integrationsweges sind zulässig und führen zu demselben Ergebnis: **Der instabile Zustand zerfällt symmetrisch in beide Zeitrichtungen!**

Wenn dies nicht der Fall wäre, könnte man einen Zeitpfeil in die bevorzugte Zeitrichtung legen. Die Wahrscheinlichkeit, den instabilen Zustand zu einem "früheren" oder "späteren" Zeitpunkt zu finden, wenn er in der Gegenwart gegeben ist, muß symmetrisch abnehmen: Es ist genauso unwahrscheinlich, daß das System vor $t = 0$ längere Zeit im instabilen Zustand *gewesen* ist.

6.4.2 Approximation des Pols

Nun werden wir einen genäherten Ausdruck für den Pol z_1 konstruieren. Dieser ist Lösung der Gleichung (6.63). Diese Gleichung läßt sich störungstheoretisch iterieren. Wir regulieren den Einfluß der Störung explizit durch den Störungsparameter λ :

$$H = H_0 + \lambda W \quad . \quad (6.76)$$

Bei der Iteration der Bestimmungsgleichung für den Pol (6.63) fallen die Terme ungerader Ordnung weg, und man erhält:

$$z_1^{(2n)} = \omega_1 + \lambda^2 \left[\mathcal{P} \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{z_1^{(2n-2)} - \omega} - i\pi |W(z_1^{(2n-2)})|^2 \right] \quad . \quad (6.77)$$

In nullter Ordnung ergibt sich:

$$z_1^{(0)} = \omega_1 \quad . \quad (6.78)$$

Die nächste Iteration liefert die zweite Ordnung:

$$z_1^{(2)} = \omega_1 + \lambda^2 \left[\mathcal{P} \int_0^\infty d\omega \frac{|W(\omega)|^2}{\omega_1 - \omega} - i\pi |W(\omega_1)|^2 \right] \quad . \quad (6.79)$$

Wenn wir $z_1^{(2)}$ in (6.73) einsetzen, ergibt sich exakt die Lösung, die wir auf verschiedenen Wegen in der Wigner-Weisskopf-Näherung bereits erhalten haben. Real- und Imaginärteil von $z_1^{(2)}$ liefern die Energieverschiebung, bzw. die Zerfallsrate des diskreten Zustands:

$$c_1(t) \approx e^{-z_1^{(2)}t} = e^{-\gamma t} e^{-i(\omega_1 - \Delta\omega)t} . \quad (6.80)$$

Wir haben auf verschiedensten Wegen dieselbe Näherungslösung für die Dynamik der Überlebensamplitude c_1 erhalten. Die in diesem Abschnitt verwendeten Methoden sind besonders wichtig im Zusammenhang mit den Methoden der Brüsseler Schule. Die Verformung des Integrationsweges, die Umkreisung und Abspaltung des isolierten Pols auf der zweiten Riemannfläche der Resolvente, die Korrekturterme, das Hintergrund-Integral: alle diese Begriffe werden uns im nächsten Kapitel wiederbegegnen, wo sie allerdings mit einem Formalismus verknüpft werden, der den Rahmen der Standard-Quantenmechanik verläßt.

Kapitel 7

Konzepte der Brüsseler Schule

In diesem Kapitel werden wir die Methoden der Brüsseler Schule vorstellen und einen allgemeinen Formalismus entwickeln, mit dem die verallgemeinerten Eigenvektoren für jedes beliebige Modell konstruierbar sind. Die bisher bereitgestellten Werkzeuge werden dabei sehr nützlich sein. Man wird in der von uns dargelegten Form die Gemeinsamkeiten und Unterschiede zwischen der Methodik der Brüsseler Schule und der Standard-Quantenmechanik besonders gut erkennen können. Ferner werden wir die Äquivalenz des Formalismus der Brüsseler Schule mit dem Formalismus der Standard-Quantenmechanik zeigen.

7.1 Komplexe Eigenwerte

Die Brüsseler Schule hat einen Weg gefunden, die *Poincaré*-Divergenzen in den Reihenentwicklungen der Störungstheorie zu eliminieren und damit eine Analytizität im Störparameter zu gewährleisten. Dazu sind jedoch Änderungen am mathematischen Fundament der Quantenmechanik erforderlich. An erster Stelle steht:

Postulat 1 *Observablen dürfen komplexe Eigenwerte besitzen.*

Neben physikalischen Schwierigkeiten bezüglich der Interpretation komplexer Eigenwerte, die ja üblicherweise Meßwerte darstellen, ergeben sich handfeste mathematische Probleme: Observablen werden durch selbstadjungierte Operatoren auf einem Hilbertraum repräsentiert, und es läßt sich leicht zeigen, daß es zu Eigenvektoren eines Hilbertraums ausschließlich reelle Eigenwerte gibt: Sei $|f_1\rangle$ Eigenvektor der Observablen A zum komplexen Eigenwert z_1 . Dann folgt:

$$\langle f_1|A|f_1\rangle = \langle f_1|Af_1\rangle = z_1\langle f_1|f_1\rangle \quad (7.1)$$

$$= \langle A^\dagger f_1|f_1\rangle = z_1^*\langle f_1|f_1\rangle \quad (7.2)$$

Wegen $A^\dagger = A$ folgt somit $z_1 = z_1^*$ oder $\|f_1\| = 0$ oder $\|f_1\| = \infty$. Im Hilbertraum ist jeder Vektor normierbar, und alle Vektoren mit verschwindender Norm sind identisch mit dem Nullvektor, der als Eigenvektor nicht in Frage kommt. Daher folgt im Hilbertraum, daß alle selbstadjungierten Operatoren reelle Eigenwerte haben.

Als Konsequenz von Postulat 1 ergibt sich also, daß der Hilbertraum als Zustandsraum nicht in Frage kommt. Alternativen dazu klären wir in Kapitel 8. Außerdem gibt es nun eine Unterscheidung in **rechte Eigenvektoren**

$$A|f_1\rangle = z_1|f_1\rangle \quad (7.3)$$

und **linke** Eigenvektoren

$$\langle \tilde{f}_1 | A = \langle \tilde{f}_1 | z_1 \quad . \quad (7.4)$$

Wir lassen nun gemäß Postulat 1 für den gestörten Hamiltonoperator H_λ komplexe Eigenwerte zu. Die Eigenwertgleichung für den rechten Eigenvektor lautet

$$(H_0 + \lambda W) |f_\alpha\rangle = z_\alpha |f_\alpha\rangle \quad . \quad (7.5)$$

Eine Entwicklung im Störparameter λ liefert

$$|f_\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n |f_\alpha^{(n)}\rangle \quad (7.6)$$

$$z_\alpha = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n z_\alpha^{(n)} \quad , \quad (7.7)$$

wobei $|f_\alpha^{(0)}\rangle = |\alpha\rangle$ das ungestörte Energieniveau mit dem Eigenwert $z_\alpha^{(0)} = \omega_\alpha$ ist. Obige Gleichungen liefern zusammen mit der Eigenwertgleichung

$$\langle \beta | f_\alpha^{(n)} \rangle = \frac{1}{\omega_\alpha - \omega_\beta} \left(\langle \beta | W | f_\alpha^{(n-1)} \rangle - \sum_{m=1}^n z_\alpha^{(m)} \langle \beta | f_\alpha^{(n-m)} \rangle \right) \quad , \quad (7.8)$$

$$z_\alpha^{(n)} = \langle \alpha | W | f_\alpha^{(n-1)} \rangle - \sum_{m=1}^{n-1} z_\alpha^{(m)} \langle \alpha | f_\alpha^{(n-m)} \rangle \quad . \quad (7.9)$$

Für den linken Eigenvektor erhält man entsprechend

$$\langle \tilde{f}_\alpha^{(n)} | \beta \rangle = \frac{1}{\omega_\alpha - \omega_\beta} \left(\langle \tilde{f}_\alpha^{(n-1)} | W | \beta \rangle - \sum_{m=1}^n z_\alpha^{(m)} \langle \tilde{f}_\alpha^{(n-m)} | \beta \rangle \right) \quad , \quad (7.10)$$

$$z_\alpha^{(n)} = \langle \tilde{f}_\alpha^{(n-1)} | W | \alpha \rangle - \sum_{m=1}^{n-1} z_\alpha^{(m)} \langle \tilde{f}_\alpha^{(n-m)} | \alpha \rangle \quad . \quad (7.11)$$

7.2 Analytische Fortsetzung und Zeitordnungsregel

Die Poincaré-Divergenzen in den Gleichungen (7.8) und (7.10) entsprechen den Ausdrücken

$$\frac{1}{\omega_\alpha - \omega_\beta} \quad .$$

Für diskrete Energieniveaus ergeben sich keine Schwierigkeiten, wobei der entartete Fall gesondert behandelt werden muß. Bei kontinuierlichen Niveaus ergeben sich Divergenzen, die eine störungstheoretische Entwicklung unmöglich machen. Um diese Divergenzen zu eliminieren, bietet sich eine infinitesimale komplexe Verschiebung im Nenner an, die einer analytischen Fortsetzung von oben bzw. unten auf die reelle Achse entspricht. Es zeigt sich jedoch, daß auch dadurch die Divergenzen nicht aufgehoben sind. Die Brüsseler Schule führt daher variable Fortsetzungen in Abhängigkeit der beteiligten Energieniveaus ein. Dies läßt sich wieder als ein Postulat verstehen:

Postulat 2 *Poincaré-Divergenzen in störungstheoretischen Entwicklungen sind zu eliminieren durch Einführung einer variablen analytischen Fortsetzung gemäß*

$$\frac{1}{\omega_\alpha - \omega_\beta} \rightarrow \frac{1}{\omega_\alpha - \omega_\beta + i\epsilon_{\alpha\beta}} \quad (7.12)$$

Fortsetzungen von **oben** führen zu **retardierten**, Fortsetzungen von **unten** zu **avancierten** Lösungen. Retardierte Lösungen sind in die Zukunft gerichtet ($t > 0$), avancierte Lösungen in die Vergangenheit ($t < 0$).

Es gibt mehrere Möglichkeiten, die Poincaré-Divergenzen im Friedrichsmodell durch analytische Fortsetzungen zu eliminieren:

$$1) \quad \epsilon_{\alpha\beta} = \begin{cases} +\epsilon & (\omega \rightarrow 1) \\ -\epsilon & (1 \rightarrow \omega) \\ -\epsilon & (\omega \rightarrow \omega') \end{cases}, \quad (7.13)$$

$$2) \quad \epsilon_{\alpha\beta} = \begin{cases} -\epsilon & (\omega \rightarrow 1) \\ +\epsilon & (1 \rightarrow \omega) \\ -\epsilon & (\omega \rightarrow \omega') \end{cases}, \quad (7.14)$$

$$3) \quad \epsilon_{\alpha\beta} = \begin{cases} -\epsilon & (\omega \rightarrow 1) \\ +\epsilon & (1 \rightarrow \omega) \\ +\epsilon & (\omega \rightarrow \omega') \end{cases}, \quad (7.15)$$

$$4) \quad \epsilon_{\alpha\beta} = \begin{cases} +\epsilon & (\omega \rightarrow 1) \\ -\epsilon & (1 \rightarrow \omega) \\ +\epsilon & (\omega \rightarrow \omega') \end{cases}. \quad (7.16)$$

Jede dieser variablen Verschiebungen eliminiert die Poincaré-Divergenzen und führt zu einem anderen vollständigen und orthogonalen Satz verallgemeinerter Eigenvektoren, die eine Analytizität im Störparameter gewährleisten. Diese Tatsache ist bereits bemerkenswert! Der Preis dafür ist jedoch ein nicht verschwindender Imaginäranteil der Eigenenergie diskreter verallgemeinerter Eigenvektoren, sogenannter *Gamow-Vektoren*, und damit ein Verlassen des Hilbertraums. Ebenso ist nun die Definition *komplexer Distributionen* erforderlich, welche den Rahmen der herkömmlichen Quantenmechanik überschreiten.

Jeder der vier vollständigen Sätze orthogonaler verallgemeinerter Eigenvektoren führt zu einer anderen zeitlichen Asymmetrie: Der Gamow-Vektor zerfällt entweder für $t \rightarrow +\infty$ oder für $t \rightarrow -\infty$ und die kontinuierlichen Eigenvektoren erscheinen und breiten sich für wachsende Zeiten aus oder konzentrieren sich und verschwinden. Um aus den gegebenen Möglichkeiten die "richtige" auszuwählen, formulieren die Vertreter der Brüsseler Schule ein weiteres Postulat, welches sie *Zeitordnungsregel* nennen:

Postulat 3 (Zeitordnungsregel) *Liegt eine Wechselwirkung vor, die zu Übergängen zwischen diskreten und kontinuierlichen Zuständen führt, wird folgende Regel angewandt:*

- 1) *Instabile diskrete Zustände zerfallen von der Vergangenheit in die Zukunft, d.h. für $t > 0$.*
- 2) *Emittierte Wellen entsprechen kontinuierlichen Ausgangszuständen.*

Im Falle des Friedrichsmodells selektiert dieses Postulat die Fortsetzung

$$1) \quad \epsilon_{\alpha\beta} = \begin{cases} +\epsilon & (\omega \rightarrow 1) \\ -\epsilon & (1 \rightarrow \omega) \\ -\epsilon & (\omega \rightarrow \omega') \end{cases} . \quad (7.17)$$

Damit ist natürlich eine *Herleitung* des Zeitpfeils nicht mehr möglich. Anstelle einer Herleitung nimmt die Brüsseler Schule die Richtung der Zeit in ihre Axiomatik auf. Das Friedrichsmodell, sogar unter Verwendung verallgemeinerter Eigenvektoren, beinhaltet Lösungen für *jede* Richtung der Zeit. Erst durch Postulat 3 wird eine Richtung bevorzugt und damit der Zeitpfeil im Modell *implementiert*. Dies ist den Vertretern der Brüsseler Schule offenbar klar, denn an selbiger Stelle wie die Zeitordnungsregel ([18], Seite 192) findet sich die Bemerkung:

“We emphasize that we do not *deduce* irreversibility but show that irreversibility can be incorporated into dynamics in the frame of an extended dynamical scheme when dealing with LPS.”

7.3 Verallgemeinerte Eigenvektoren

Wenn man die Friedrichs-Basissysteme betrachtet, die sich aus rein kontinuierlichen Eigenvektoren zusammensetzen, dann fällt die intuitive physikalische Interpretation schwer, da sich hier der diskrete Zustand als Superposition kontinuierlicher Feldzustände darstellt. Dem steht jedoch die eigentümliche Eigenschaft der in dem durch die Zeitordnungsregel ausgewählten Basissystem der Brüsseler Schule enthaltenen Gamow-Vektoren entgegen, in einer Zeitrichtung über alle Grenzen zu wachsen. Wir werden in diesem Abschnitt einen allgemeinen Formalismus entwickeln, mit dem die verallgemeinerten Eigenvektoren konstruierbar sind. Darunter befinden sich auch die Gamow-Vektoren, die diskrete verallgemeinerte Eigenzustände des Hamiltonoperators zu komplexen Eigenwerten sind. Diese Gamow-Vektoren, wenn man sie zeitlich entwickelt, zerfallen in einer Zeitrichtung exponentiell und wachsen in der anderen Zeitrichtung exponentiell über alle Grenzen. Wir werden jedoch im darauffolgenden Abschnitt zeigen, daß in der Spektralzerlegung nur eine Katastrophe für $t \rightarrow -\infty$ zu befürchten ist, die aber durch die Anwesenheit der kontinuierlichen Eigenvektoren verhindert wird. Außerdem werden wir die Äquivalenz der Spektralzerlegungen der Brüsseler Schule mit der Standard-Spektralzerlegung zeigen.

Die in den Veröffentlichungen der Brüsseler Schule durchgeführte Konstruktion der verallgemeinerten Eigenvektoren über analytische Fortsetzungen in den Störreihen sind relativ aufwendig und bleiben auf das jeweilige Modell beschränkt. Außerdem wird dort die Zeitordnungsregel angewandt. Wir werden mit den von uns bisher bereit gestellten Werkzeugen die Konstruktion der verallgemeinerten Eigenvektoren in kompakterer und allgemeinerer Form vornehmen und auf die Zeitordnungsregel verzichten.

Gehen wir von Gleichung (5.46) für einen allgemeinen Zeitpropagator aus, und nehmen der Einfachheit halber ein rein kontinuierliches Spektrum σ an:

$$U(t) = \frac{i}{2\pi} \int_C dz e^{-izt} R(z) , \quad (7.18)$$

und betrachten nur den kontinuierlichen Teil des Spektrums. Die Kurve C führt im Uhrzeigersinn um das (kontinuierliche) Spektrum σ herum. Nun verformen wir wie in Abschnitt 6.4

diese Kurve zu C_+ , die um eine Kurve Γ_+ herumführt, die unterhalb aller Singularitäten von $R_+(z)$ verläuft. Man kann Γ_+ in eine Form bringen, wie sie in Abbildung (7.1) zu sehen ist. Nun betritt der obere Teil von C_+ die zweite Riemann-Fläche der Resolvente und überquert dabei alle dort liegenden Pole. Gemäß Gleichung (6.64) ergibt sich

$$\frac{i}{2\pi} \int_C dz e^{-izt} R(z) = \frac{i}{2\pi} \int_{C_+} dz e^{-izt} R_{\Gamma_+}(z) - \frac{i}{2\pi} \sum_k e^{-iz_k t} \text{Res}_{z_k} R_+(z) \quad (7.19)$$

Dabei ist $R_{\Gamma_+}(z)$ die aus der kontinuierlichen Verformung des Schnittes σ zu Γ_+ hervorgegangene Resolvente, die nun bei Γ_+ ihren Schnitt besitzt. Oberhalb von Γ_+ stimmt sie mit $R_+(z)$ überein und unterhalb von Γ_+ mit $R_-(z)$. Da aber $R_-(z)$ in der unteren Halbebene mit $R(z)$ übereinstimmt, ist also insgesamt

$$R_{\Gamma_+}(z) = \begin{cases} R_-(z) = R(z) & \text{für } z \text{ unterhalb von } \Gamma_+ \\ R_+(z) & \text{für } z \text{ oberhalb von } \Gamma_+ \end{cases} \quad (7.20)$$

Wie aber sind die analytischen Fortsetzungen $R_{\pm}(z)$ zu verstehen? Die Green-Operatoren sind die analytischen Fortsetzungen der Resolvente von oben bzw. unten auf die reelle Achse. Mit ihrer Hilfe läßt sich formulieren:

$$R_{\pm}(z) := \begin{cases} \lim_{E \rightarrow z} G^{\pm}(E) & ; \text{für } z \text{ in der unteren/oberen Halbebene} \\ R(z) & ; \text{sonst} \end{cases} \quad (7.21)$$

Wenden wir uns der diskreten Summe zu. Bei z_k liegen die Polstellen der auf die zweite Riemann-Fläche fortgesetzten Resolvente $R_+(z)$. Ganz analog zum Standardfall (siehe Seite 44) definieren wir:

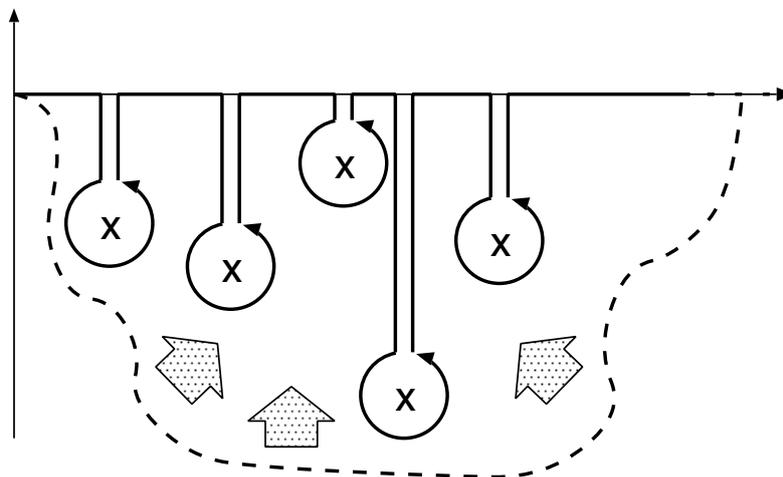


Abbildung 7.1: Die Kurve Γ_+ verläuft unterhalb aller Polstellen z_k von $R_+(z)$ durch die untere Halbebene. Da die Resolvente dort bis auf die Pole analytisch ist, läßt sich die Kurve so verformen, daß sie um die Pole herumführt und ansonsten auf dem reellen kontinuierlichen Spektrum von H liegt.

Verallgemeinerte diskrete Eigenvektoren

Die Polstellen z_k der analytisch fortgesetzten Resolvente $R_+(z)$ sind **verallgemeinerte diskrete Eigenwerte** des Hamiltonoperators. Es gilt die Relation

$$\text{Res}_{z_k} R_+(z) = \lim_{E \rightarrow z_k} (E - z_k) G^+(E) = |f_k\rangle \langle \tilde{f}_k| \quad , \quad (7.22)$$

mit den zu z_k gehörigen **rechten Eigenvektoren**

$$|f_k\rangle := \frac{1}{c_k} \lim_{E \rightarrow z_k} (E - z_k) G^+(E) |\psi\rangle \quad (7.23)$$

und den zu z_k zugehörigen **linken Eigenvektoren**

$$\langle \tilde{f}_k| := \frac{1}{\tilde{c}_k} \lim_{E \rightarrow z_k} (E - z_k) \langle \psi| G^+(E) \quad (7.24)$$

für einen Hilbertvektor $|\psi\rangle$ und Normierungskonstanten $c_k = \langle f_k | \psi \rangle$ bzw. $\tilde{c}_k = \langle \tilde{f}_k | \psi \rangle$. Diese Vektoren sind **Gamow-Vektoren**.

Indem wir (7.22) adjungieren, erhalten wir

$$\text{Res}_{z_k^*} R_-(z) = \lim_{E \rightarrow z_k^*} (E - z_k^*) G^-(E) =: |\tilde{f}_k\rangle \langle f_k| \quad , \quad (7.25)$$

Daraus ergeben sich die adjungierten Gamow-Vektoren

$$|\tilde{f}_k\rangle := \frac{1}{\tilde{c}_k^*} \lim_{E \rightarrow z_k^*} (E - z_k^*) G^-(E) |\psi\rangle \quad (7.26)$$

$$\langle f_k| := \frac{1}{c_k^*} \lim_{E \rightarrow z_k^*} (E - z_k^*) \langle \psi| G^-(E) \quad . \quad (7.27)$$

Nun betrachten wir den kontinuierlichen Anteil. Analog zur Argumentation in Abschnitt 6.4 ergibt sich für den ersten Term

$$\frac{i}{2\pi} \int_{C_+} dz e^{-izt} R_{\Gamma_+}(z) = \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_+} dz e^{-izt} \{R_+(z) - R_-(z)\} \quad . \quad (7.28)$$

Nun führen wir eine *komplexe Teildistribution* $D_+(E)$ ein, die erst in Verbindung mit einer Funktion $\xi(z)$ eine Distribution ergibt, die dann auf Testfunktionen $\varphi(E)$ wie folgt wirkt:

$$\int_{\sigma} dE D_+(E) \xi(E) \varphi(E) := \int_{\Gamma_+} dz \xi(z) \varphi(z) \quad . \quad (7.29)$$

Dabei ist σ das kontinuierliche Spektrum von H und Γ_+ eine Kurve, die mit σ die Pole von $\xi(z)$ in der unteren Halbebene umschließt. Gibt es keine solchen Pole dann hat die Anwendung der Distribution keine Auswirkungen. Die Testfunktion $\varphi(E)$ muß analytisch auf die untere Halbebene fortsetzbar sein. Auf diese Weise formulieren wir:

$$\frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_+} dz e^{-izt} \{R_+(z) - R_-(z)\} = \frac{i}{2\pi} \int_{\sigma} dE e^{-iEt} D_+(E) \{G^+(E) - G^-(E)\} \quad . \quad (7.30)$$

Nun sind wir imstande, den Zeitpropagator im verallgemeinerten Sinne durch die komplexen Distributionen und die Green-Operatoren darzustellen:

Der Zeitpropagator in der verallgemeinerten Quantenmechanik

Sei σ das rein kontinuierliche Spektrum des Hamiltonoperators H und z_k die Pole seiner Resolvente auf der unteren zweiten Riemann-Fläche. Dann erhält der Zeitpropagator die Darstellung

$$U(t) = \sum_k e^{-iz_k t} \lim_{E \rightarrow z_k} (E - z_k) G^+(E) + \int_{\sigma} dE e^{-iEt} D_+(E) \{G^+(E) - G^-(E)\} . \quad (7.31)$$

Mit der Relation (5.35) erhalten wir

$$\frac{i}{2\pi} \int_{\sigma} dE e^{-iEt} D_+(E) \{G^+(E) - G^-(E)\} = \int_{\sigma} dE e^{-iEt} D_+(E) |\psi^{\pm}(E)\rangle \langle \psi^{\pm}(E)| . \quad (7.32)$$

Nun definieren wir

Verallgemeinerte kontinuierliche Eigenvektoren

Es gilt die Relation

$$\frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_+} dz e^{-izt} \{R_+(z) - R_-(z)\} = \int_{\sigma} dE |f^{\pm}(E)\rangle \langle \tilde{f}^{\pm}(E)| , \quad (7.33)$$

mit den zu E gehörigen **rechten Eigenvektoren**

$$|f^{\pm}(E)\rangle := D_+(E) |\psi^{\pm}(E)\rangle \quad (7.34)$$

und den zu E gehörigen **linken Eigenvektoren**

$$\langle \tilde{f}^{\pm}(E)| := D_+(E) \langle \psi^{\pm}(E)| \quad (7.35)$$

Die Standard-Eigenvektoren sind dabei gegeben durch:

$$|\psi^{\pm}(E)\rangle = \frac{1}{c^{\pm}(E)} \lim_{z \rightarrow E \pm i\epsilon} (z - E) R(z) |\chi\rangle \quad (7.36)$$

für einen uneigentlichen Vektor $|\chi\rangle$ und Normierungskonstanten $c^{\pm}(E) = \langle \psi^{\pm}(E) | \chi \rangle$.

Da die Vektoren $|\psi^-(E)\rangle$ aus einer Fortsetzung von unten resultieren und daher auf der unteren Halbebene analytisch sind zeigt die Multiplikation von $|\psi^-(E)\rangle$ mit $D_+(E)$ keine Auswirkung. Dies bedeutet, daß sie mit den gewöhnlichen Friedrichs-Eigenvektoren zusammenfallen:

$$|f^-(E)\rangle = D_+(E) |\psi^-(E)\rangle = |\psi^-(E)\rangle . \quad (7.37)$$

Analog dazu findet man

$$\langle \tilde{f}^+(E) | = D_+(E) \langle \psi^+(E) | = \langle \psi^+(E) | \quad . \quad (7.38)$$

Zusammen mit den diskreten verallgemeinerten Eigenvektoren ergeben sich zwei verschiedene vollständige biorthonormale Basissysteme

$$B_1 := \{ |f_k\rangle, \langle \tilde{f}_k |, |f^+(E)\rangle, \langle \psi^+(E) | \} \quad , \quad (7.39)$$

$$B_2 := \{ |f_k\rangle, \langle \tilde{f}_k |, |\psi^-(E)\rangle, \langle \tilde{f}^-(E) | \} \quad , \quad (7.40)$$

mit den Vollständigkeitsrelationen

$$\mathbb{1}_1 = \sum_k |f_k\rangle \langle \tilde{f}_k | + \int_\sigma dE |f^+(E)\rangle \langle \psi^+(E) | \quad (7.41)$$

bzw.

$$\mathbb{1}_2 = \sum_k |f_k\rangle \langle \tilde{f}_k | + \int_\sigma dE |\psi^-(E)\rangle \langle \tilde{f}^-(E) | \quad . \quad (7.42)$$

Nun kann man die obige Prozedur auch für eine Kurve Γ_- durchführen, die bezüglich Γ_+ an der reellen Achse gespiegelt, d.h. konjugiert komplex zu ihr ist. Sie liegt damit oberhalb aller Polstellen von $R_-(z)$. Es ergibt sich auch diesmal eine genau spiegelbildliche Situation. Die verallgemeinerten diskreten Eigenwerte liegen nun an den konjugiert komplexen Stellen. Die verallgemeinerten diskreten Eigenvektoren lauten

$$|g_k\rangle := \frac{1}{c_k} \lim_{E \rightarrow z_k^*} (E - z_k^*) G^-(E) |\psi\rangle \quad , \quad (7.43)$$

$$\langle \tilde{g}_k | := \frac{1}{\tilde{c}_k} \lim_{E \rightarrow z_k^*} (E - z_k^*) \langle \psi | G^-(E) \quad . \quad (7.44)$$

Wir führen eine komplexe Teildistribution

$$\int_\sigma dE D_-(E) \xi(E) \varphi(E) = \int_{\Gamma_-} dz \xi(z) \varphi(z) \quad (7.45)$$

ein. Daraus ergeben sich die verallgemeinerten kontinuierlichen Eigenvektoren

$$|g^\pm(E)\rangle := D_-(E) |\psi^\pm(E)\rangle \quad (7.46)$$

$$\langle \tilde{g}^\pm(E) | := D_-(E) \langle \psi^\pm(E) | \quad . \quad (7.47)$$

Mit analogen Überlegungen, wie für $|f^\pm(E)\rangle$ und $\langle \tilde{f}^\pm(E) |$, folgert man

$$|g^+(E)\rangle = D_-(E) |\psi^+(E)\rangle = |\psi^+(E)\rangle \quad (7.48)$$

$$\langle \tilde{g}^-(E) | = D_-(E) \langle \psi^-(E) | = \langle \psi^-(E) | \quad . \quad (7.49)$$

Zusammen mit den diskreten verallgemeinerten Eigenvektoren ergeben sich wieder zwei verschiedene vollständige biorthonormale Basissysteme

$$B_3 := \{ |g_k\rangle, \langle \tilde{g}_k |, |\psi^+(E)\rangle, \langle \tilde{g}^+(E) | \} \quad , \quad (7.50)$$

$$B_4 := \{ |g_k\rangle, \langle \tilde{g}_k |, |g^-(E)\rangle, \langle \psi^-(E) | \} \quad , \quad (7.51)$$

mit den Vollständigkeitsrelationen

$$\mathbb{1}_3 = \sum_k |g_k\rangle\langle\tilde{g}_k| + \int_\sigma dE |\psi^+(E)\rangle\langle\tilde{g}^+(E)| \quad (7.52)$$

bzw.

$$\mathbb{1}_4 = \sum_k |g_k\rangle\langle\tilde{g}_k| + \int_\sigma dE |g^-(E)\rangle\langle\psi^-(E)| \quad (7.53)$$

7.4 Äquivalenz zur Standard-Quantenmechanik

Wir haben eine allgemeine Konstruktionsvorschrift verallgemeinerter Eigenvektoren entwickelt, die sich auf ein beliebiges Modell anwenden läßt. Es zeigt sich, daß vier verschiedene verallgemeinerte Basissysteme konstruierbar sind.

Betrachten wir das Basissystem B_1 . Hier existieren Gamow-Vektoren $|f_k\rangle$ mit komplexen Eigenwerten z_k des Hamiltonoperators H . Interpretiert man diese Vektoren als echte *physikalische Zustände*, so zerfallen sie für $t \rightarrow \infty$:

$$U(t)|f_k\rangle = e^{-iHt}|f_k\rangle = e^{-iz_k t}|f_k\rangle \quad (7.54)$$

$$= e^{-\gamma_k t} e^{-i\tilde{\omega}_k t}|f_k\rangle \quad , \quad (7.55)$$

mit $z_k = \tilde{\omega}_k - i\gamma_k$. Da die z_k auf der unteren Halbebene liegen, sind die γ_k positiv. Demzufolge zerfallen die Gamow-Vektoren $|f_k\rangle$ für $t \rightarrow \infty$, wachsen jedoch für $t \rightarrow -\infty$ über alle Grenzen, was wenig sinnvoll erscheint. In B_1 gibt es außerdem die Gamow-Vektoren $|\tilde{f}_k\rangle$. Sie zerfallen in die Vergangenheit und wachsen für $t \rightarrow \infty$ über alle Grenzen:

$$\langle\varphi|e^{-iHt}|\tilde{f}_k\rangle = \langle\tilde{f}_k|e^{iHt}|\varphi\rangle^* = e^{-iz_k^* t}\langle\tilde{f}_k|\varphi\rangle^* \quad (7.56)$$

$$= e^{\gamma_k t} e^{-i\tilde{\omega}_k t}\langle\varphi|\tilde{f}_k\rangle \quad (7.57)$$

$$\Rightarrow e^{-iHt}|\tilde{f}_k\rangle = e^{\gamma_k t} e^{-i\omega_k t}|\tilde{f}_k\rangle \rightarrow \infty \quad \text{für } t \rightarrow \infty \quad . \quad (7.58)$$

Da sie jedoch nur in ihrer Bra-Form $\langle\tilde{f}_k|$ in der Spektralzerlegung auftauchen, bereiten sie nur für $t \rightarrow -\infty$ Schwierigkeiten:

$$\langle\tilde{f}_k|e^{-iHt} = e^{-iz_k t}\langle\tilde{f}_k| = e^{-\gamma_k t} e^{-i\omega_k t}\langle\tilde{f}_k| \quad . \quad (7.59)$$

Welche Konsequenzen hat dieses eigentümliche Verhalten auf die resultierenden Erwartungswerte? Betrachten wir die Überlebensamplitude eines Zustands $|\psi\rangle$:

$$c_\psi(t) = \langle\psi|U(t)|\psi\rangle \quad (7.60)$$

$$= \sum_k e^{-iz_k t}\langle\psi|f_k\rangle\langle\tilde{f}_k|\psi\rangle + \int_\sigma dE e^{-iEt}\langle\psi|f^+(E)\rangle\langle\psi^+(E)|\psi\rangle \quad (7.61)$$

$$= \sum_k e^{-iz_k t}\langle\psi|\text{Res}_{z_k} R_+(z)|\psi\rangle + \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_+} dz e^{-izt}\langle\psi|\{R_+(z) - R_-(z)\}|\psi\rangle \quad . \quad (7.62)$$

Hier haben wir die Spektralzerlegung bezüglich der Basis B_1 benutzt. Ebensogut hätten wir aber auch von einer Standard-Basiszerlegung ausgehen können und den Integrationsweg von

σ zu Γ_+ verformen, wie wir es auch in Abschnitt 6.4 gemacht haben. Definieren wir wieder eine Residualfunktion

$$\frac{1}{\eta(z)} := \langle \psi | R(z) | \psi \rangle \quad (7.63)$$

mit ihren analytischen Fortsetzungen

$$\frac{1}{\eta_{\pm}(z)} = \langle \psi | R_{\pm}(z) | \psi \rangle \quad , \quad (7.64)$$

dann ergibt sich

$$c_{\psi}(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{\sigma} dE e^{-iEt} \langle \psi | \{G^+(E) - G^-(E)\} | \psi \rangle \quad (7.65)$$

$$= \frac{i}{2\pi} \int_{\sigma} dE e^{-iEt} \left\{ \frac{1}{\eta_+(E)} - \frac{1}{\eta_-(E)} \right\} \quad (7.66)$$

$$= \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_+} dz e^{-izt} \left\{ \frac{1}{\eta_+(z)} - \frac{1}{\eta_-(z)} \right\} - \frac{i}{2\pi} \sum_k \oint_{|z-z_k|=\epsilon} dz e^{-izt} \frac{1}{\eta_+(z)} \quad (7.67)$$

$$= \sum_k e^{-iz_k t} \text{Res}_{z_k} \frac{1}{\eta_+(z)} + \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_+} dz e^{-izt} \left\{ \frac{1}{\eta_+(z)} - \frac{1}{\eta_-(z)} \right\} \quad . \quad (7.68)$$

Dies ist identisch mit (7.62). Die obigen Operationen sind ganz im Rahmen der Standard-Quantenmechanik zulässig, weil wir unter Einführung eines Referenzvektors $|\psi\rangle$ stets *skalare* Funktionen betrachten. Wir gelangen also mit dem Standard-Basissystem zur selben Zerlegung der Ausdrücke für die Überlebensamplituden in einen Pol-Beitrag und ein Hintergrund-Integral wie mit dem verallgemeinerten Basissystem B_1 der Brüsseler Schule. Dies ist insofern nicht weiter erstaunlich, als Spektralzerlegungen immer äquivalent zueinander sein sollten. Wir machen dies nun explizit deutlich, indem wir exemplarisch die Vollständigkeit des ersten Basissystems B_1 und damit die Äquivalenz zur Spektralzerlegung durch die Friedrichs-Eigenvektoren zeigen:

$$\mathbb{1}_1 = \sum_k |f_k\rangle \langle \tilde{f}_k| + \int_{\sigma} dE |f^+(E)\rangle \langle \tilde{f}^+(E)| \quad (7.69)$$

$$= \sum_k \lim_{E \rightarrow z_k} (E - z_k) G^+(E) + \int_{\sigma} dE D_+(E) |\psi^+(E)\rangle \langle \psi^+(E)| \quad (7.70)$$

$$= \sum_k \text{Res}_{z_k} R_+(z) + \frac{i}{2\pi} \int_{\sigma} dE D_+(E) \{G^+(E) - G^-(E)\} \quad (7.71)$$

$$= \sum_k \text{Res}_{z_k} R_+(z) + \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_+} dz \underbrace{R_+(z)}_{\text{Pole bei } z_k} - \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_+} dz \underbrace{R_-(z)}_{\text{keine Pole}} \quad (7.72)$$

$$= \underbrace{\sum_k \text{Res}_{z_k} R_+(z) - \sum_k \text{Res}_{z_k} R_+(z)}_0 + \frac{i}{2\pi} \int_{\sigma} dE G^+(E) - \frac{i}{2\pi} \int_{\sigma} dE G^-(E) \quad (7.73)$$

$$= \int_{\sigma} dE \{G^+(E) - G^-(E)\} = \int_{\sigma} dE |\psi^{\pm}(E)\rangle \langle \psi^{\pm}(E)| = \mathbb{1}_{Fr} \quad . \quad (7.74)$$

Ungeachtet dieser Äquivalenz besteht der Vorteil des Formalismus der Brüsseler Schule allerdings in einer gewissen Eleganz, denn dort sind alle Ausdrücke unabhängig von Referenzvektoren $|\psi\rangle$.

Wenn man in Betracht zieht, daß physikalische Aussagen ausschließlich aus Erwartungswerten gewonnen werden, enthält der Formalismus der Brüsseler Schule keine andere Physik. Man erhält dort jedoch unter Anwendung der Zeitordnungsregel eine besonders intuitive Darstellung des mikroskopischen Geschehens für $t > 0$. Dies gilt allerdings nicht für $t < 0$. Eine weitere Eigentümlichkeit dieser Vektoren ist ihre verschwindende Hilbertnorm:

$$\|f_k\|^2 = \langle f_k | f_k \rangle = 0 \quad , \quad (7.75)$$

$$\|\tilde{f}_k\|^2 = \langle \tilde{f}_k | \tilde{f}_k \rangle = 0 \quad . \quad (7.76)$$

Diese Eigenschaft ist erforderlich, da die Gamow-Vektoren zum selbstadjungierten Operator H komplexe Eigenwerte besitzen. Welche physikalische Bedeutung man Zuständen mit verschwindender Norm innerhalb des Hilbertraums zuweisen soll, die dort mit dem Nullvektor identifiziert werden, der mit Sicherheit kein realisierbarer Zustand ist, bleibt fraglich.

Die Brüsseler Schule spricht den Gamow-Vektoren eine physikalische Bedeutung zu. Sie wendet ihre Methodik auf den *Liouville-Raum* der Dichtematrizen an und findet dort Entsprechungen der Gamow-Vektoren in Eigendichten des Liouville-Operators $L = [H, \cdot]$ zu komplexen Eigenwerten. Die Diskussion dieser Methodik ist nicht Gegenstand der vorliegenden Arbeit. Siehe dazu die Veröffentlichungen der Brüsseler Schule bezüglich dieses Themengebietes ([3],[1]).

Diskutieren wir Gleichungen (7.62) bzw. (7.68): Da die Kurve Γ_+ unterhalb aller Polstellen liegt, können wir sie für positive Zeiten $t > 0$ wegen des Integralkerns e^{-izt} auf die negative imaginäre Achse legen. Daran erkennt man, daß der Beitrag des Hintergrund-Integrals im Vergleich zum Pol-Beitrag für genügend große Zeiten vernachlässigbar wird. Falls die Amplituden $\langle \tilde{f}_k | \psi \rangle$ nicht alle verschwinden, bzw. die Funktion $1/\eta_+(z)$ an den Stellen z_k isolierte Pole besitzt, bleibt nur der Pol-Beitrag übrig, der für den Zerfall des Zustands $|\psi\rangle$ sorgt. Das Zerfallsverhalten von $|\psi\rangle$ bestimmt sich aus den Überlagerungen der exponentiellen Abklingraten für die einzelnen Pole. Der Zustand $|\psi\rangle$ ist demnach genau dann instabil, wenn die Amplituden $\langle \tilde{f}_k | \psi \rangle$ nicht alle verschwinden, bzw. die Funktion $1/\eta_+(z)$ Pole in der unteren Halbebene besitzt. Ist dies nicht der Fall, bleibt der Beitrag des Hintergrund-Integrals, so klein er auch werden mag, als einziger übrig und ist damit nicht vernachlässigbar. Für negative Zeiten kehrt sich die Situation um. Das Hintergrund-Integral wird immer dominanter und mit ihr der Einfluß der kontinuierlichen verallgemeinerten Eigenvektoren $|f^+(E)\rangle$ und $\langle f^+(E)|$. Die Amplitude der Gamow-Vektoren wächst für eine Zeitrichtung über alle Grenzen. Wegen

$$\int_{\sigma} dE e^{-iEt} |f^+(E)\rangle \langle \psi^+(E)| \quad (7.77)$$

$$= \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_+} dz e^{-izt} \{R_+(z) - R_-(z)\} \quad (7.78)$$

$$= \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_+} dz e^{-izt} R_+(z) - \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma_+} dz e^{-izt} R_-(z) \quad (7.79)$$

$$= - \sum_k e^{-iz_k t} \text{Res}_{z_k} R_+(z) + \frac{i}{2\pi} \int_{\sigma} dE e^{-iEt} G^+(E) - \frac{i}{2\pi} \int_{\sigma} dE e^{-iEt} G^-(E) \quad (7.80)$$

$$= - \sum_k e^{-iz_k t} |f_k\rangle \langle \tilde{f}_k| + \frac{i}{2\pi} \int_{\sigma} dE e^{-iEt} |\psi^{\pm}(E)\rangle \langle \psi^{\pm}(E)| \quad (7.81)$$

werden jedoch sämtliche Beiträge der Gamow-Vektoren durch die kontinuierlichen Vektoren exakt aufgehoben und eine Katastrophe für $t \rightarrow -\infty$ verhindert. Außerdem kann man an

obigen Umformungen direkt sehen, daß durch die Einführung der verallgemeinerten Eigenvektoren nichts wirklich passiert ist: Gamow-Vektoren werden hinzuaddiert und implizit durch die verallgemeinerten kontinuierlichen Eigenvektoren wieder abgezogen.

Wir haben damit allgemein die Äquivalenz des Formalismus der Brüsseler Schule mit dem der Standard-Quantenmechanik gezeigt.

Fazit

- Der Formalismus der Brüsseler Schule liefert bezüglich der Erwartungswerte die gleichen Resultate wie die Standard-Quantenmechanik.
- Während die Standard-Quantenmechanik für bestimmte Operationen einen Referenzzustand benötigt, um analytische Fortsetzungen zu konstruieren, kommt der Formalismus der Brüsseler Schule ohne einen solchen aus.
- Die Brüsseler Schule benötigt eine *Zeitordnungsregel*, um aus den vier verschiedenen verallgemeinerten Basissystemen die "richtige" auszuwählen. Diese liefert für Entwicklungen in die Zukunft ($t > 0$) besonders intuitiv interpretierbare Ergebnisse. Eine solche Auswahl ist in der Standard-Quantenmechanik nicht nötig.
- Interpretative Schwierigkeiten der Standard-Quantenmechanik bezüglich der physikalischen Bedeutung von Basisvektoren werden ersetzt durch interpretative Schwierigkeiten der Brüsseler Quantenmechanik:
Gamow-Vektoren wachsen für $t \rightarrow \infty$ oder für $t \rightarrow -\infty$ über alle Grenzen und besitzen keine Hilbertnorm.

7.5 Anwendung auf das Friedrichsmodell

Wir wenden nun die im letzten Abschnitt erhaltenen Ergebnisse auf das Friedrichsmodell an. Hier folgen wir allerdings insofern der Brüsseler Schule, als wir ihre Zeitordnungsregel befolgen. Diese selektiert das Basissystem B_1 aus den vier möglichen verallgemeinerten Systemen. Wie bereits diskutiert, läßt sich dadurch eine Entwicklung in die *Zukunft* ($t > 0$) besonders adäquat beschreiben. Die involvierten komplexen Distributionen betreffen nur analytische Fortsetzungen auf die *untere* Halbebene.

Diskrete Eigenvektoren Wir bilden das Residuum der auf die untere Halbebene analytisch fortgesetzten Resolvente, welches dem dyadischen Produkt der verallgemeinerten Eigenvektoren entspricht:

$$|f_1\rangle\langle\tilde{f}_1| = \lim_{E \rightarrow z_1} (E - z_1)G^+(E) \quad (7.82)$$

Mit $G^+(E) = R(E + i\epsilon)$ ergibt sich aus (6.11):

$$|f_1\rangle\langle\tilde{f}_1| = \frac{1}{\eta'_+(z_1)} \left[|1\rangle + \int_0^\infty d\omega \frac{W(\omega)}{[z_1 - \omega]_+} |\omega\rangle \right] \left[\langle 1| + \int_0^\infty d\omega \frac{W^*(\omega)}{[z_1 - \omega]_+} \langle\omega| \right] \quad (7.83)$$

Ein Vergleich liefert

$$|f_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{\eta'_+(z_1)}} \left[|1\rangle + \int_0^\infty d\omega \frac{W(\omega)}{[z_1 - \omega]_+} |\omega\rangle \right] \quad (7.84)$$

$$\langle \tilde{f}_1| = \frac{1}{\sqrt{\eta'_+(z_1)}} \left[\langle 1| + \int_0^\infty d\omega \frac{W^*(\omega)}{[z_1 - \omega]_+} \langle \omega| \right] , \quad (7.85)$$

wobei die Normierungsbedingung

$$\langle \tilde{f}_1|f_1\rangle = 1 \quad (7.86)$$

ausgenutzt wurde. Die komplexe Teildistribution, die in den Vektoren verwendet wird, ist eine verzögerte *analytische Fortsetzung von oberhalb der reellen Achse* zum Punkt z_1 , definiert durch

$$\int d\omega \frac{\varphi(\omega)}{[z_1 - \omega]_+} = \lim_{E \rightarrow z_1} \int_0^\infty d\omega \frac{\varphi(\omega)}{E - \omega + i\epsilon} \quad (7.87)$$

$$= \lim_{E \rightarrow z_1} \left[\int_0^\infty d\omega \frac{\mathcal{P}}{E - \omega} \varphi(\omega) + i\pi\varphi(E) \right] \quad (7.88)$$

$$= \int_0^\infty d\omega \frac{\varphi(\omega)}{z_1 - \omega} + i\pi\varphi(z_1) . \quad (7.89)$$

Diese Distribution ist also nur für Testfunktionen φ definiert, die sich analytisch auf die untere Halbebene fortsetzen lassen.

Kontinuierliche Eigenvektoren Wir gehen von den bereits berechneten kontinuierlichen Eigenvektoren des Friedrichsmodells

$$|\psi^\pm(\omega)\rangle = |\omega\rangle + \frac{W^*(\omega)}{\eta_\pm(\omega)} \left[|1\rangle + \int_0^\infty d\omega' \frac{W(\omega')}{\omega - \omega' \pm i\epsilon} |\omega'\rangle \right] \quad (7.90)$$

aus, um daraus die verallgemeinerten kontinuierlichen Eigenvektoren zu konstruieren. Die Zeitordnungsregel selektiert die retardierten Friedrichs-Eigenvektoren sowie die Distribution $D_+(\omega)$. Damit erhält man für die verallgemeinerten kontinuierlichen Eigenvektoren:

$$|f^+(\omega)\rangle = D_+(\omega) |\psi^+(\omega)\rangle . \quad (7.91)$$

Die komplexe Teildistribution $D_+(\omega)$ bewirkt die Verformung des Integrationswegs $[0, \infty)$ zur Kurve Γ_+ , die von 0 ausgeht, unterhalb des Pols z_1 verläuft und nach $+\infty$ strebt.

Betrachten wir zunächst die Integration über die verallgemeinerten Skalarprodukte mit ei-

nem Testvektor φ :

$$\int_0^\infty d\omega \langle \varphi | f^+(\omega) \rangle = \int_0^\infty d\omega D_+(\omega) \left\{ \varphi^*(\omega) + \frac{W^*(\omega)}{\eta_+(\omega)} \left[\varphi_1^* + \int_0^\infty d\omega' \frac{W(\omega')}{\omega - \omega' + i\epsilon} \varphi^*(\omega') \right] \right\} \quad (7.92)$$

$$= \int_{\Gamma_+} dz \varphi^*(z) + \int_{\Gamma_+} dz \frac{W^*(z)}{\eta_+(z)} \left[\varphi_1^* + \int_0^\infty d\omega' \frac{W(\omega')}{z - \omega' + i\epsilon} \varphi^*(\omega') \right] \quad (7.93)$$

$$= \int_0^\infty d\omega \varphi^*(\omega) + 2\pi i \frac{W^*(z_1)}{\eta'_+(z_1)} \left[\varphi_1^* + \int_0^\infty d\omega' \frac{W(\omega')}{z_1 - \omega' + i\epsilon} \varphi^*(\omega') \right] \\ + \int_0^\infty d\omega \frac{W^*(\omega)}{\eta_+(\omega)} \left[\varphi_1^* + \int_0^\infty d\omega' \frac{W(\omega')}{\omega - \omega' + i\epsilon} \varphi^*(\omega') \right] \quad (7.94)$$

$$= \int_0^\infty d\omega \left\{ \varphi^*(\omega) + \frac{W^*(\omega)}{\eta_+^d(\omega)} \left[\varphi_1^* + \int_0^\infty d\omega' \frac{W(\omega')}{\omega - \omega' + i\epsilon} \varphi^*(\omega') \right] \right\} \quad (7.95)$$

Da dies für jeden Testvektor φ erfüllt ist, erhält man den verallgemeinerten Eigenvektor

$$|f^+(\omega)\rangle = |\omega\rangle + \frac{W^*(\omega)}{\eta_+^d(\omega)} \left[|1\rangle + \int_0^\infty d\omega' \frac{W(\omega')}{\omega - \omega' + i\epsilon} |\omega'\rangle \right] \quad (7.96)$$

mit der komplexen Distribution

$$\frac{1}{\eta_+^d(\omega)} = D_+(\omega) \frac{1}{\eta_+(\omega)} \quad , \quad (7.97)$$

definiert durch

$$\int_0^\infty d\omega \frac{\varphi(\omega)}{\eta_+^d(\omega)} = \int_{\Gamma_+} dz \frac{\varphi(z)}{\eta_+(z)} = \int_0^\infty d\omega \frac{\varphi(\omega)}{\eta_+(\omega)} + 2\pi i \frac{\varphi(z_1)}{\eta'_+(z_1)} \quad . \quad (7.98)$$

Den zugehörigen linken Eigenvektor erhält man durch

$$\langle \tilde{f}^+(\omega) | = D_+(\omega) \langle \psi^+(\omega) | = \langle \psi^+(\omega) | \quad (7.99)$$

$$= \langle \omega | + \frac{W(\omega)}{\eta_-(\omega)} \left[\langle 1 | + \int_0^\infty d\omega' \frac{W^*(\omega')}{\omega - \omega' - i\epsilon} \langle \omega' | \right] \quad , \quad (7.100)$$

wobei wieder ausgenutzt wurde, daß die Kurve Γ_+ durch das Holomorphiegebiet von $R_-(z) = R_+^\dagger(z)$ führt (siehe dazu Abschnitt 7.3). Aus diesem Grund ist auch $D_+(\omega)/\eta_-(\omega) = 1/\eta_-(\omega)$. Da die Friedrich-Eigenvektoren bereits normiert sind, entfällt das Normierungsproblem:

$$\langle \tilde{f}^+(\omega) | f^+(\omega') \rangle = \langle \psi^+(\omega) | f^+(\omega') \rangle = \delta(\omega - \omega') \quad . \quad (7.101)$$

Wir erhalten das Basisystem

$$B_1 = \{ |f_1\rangle, \langle \tilde{f}_1 |, |f^+(\omega)\rangle, \langle \psi^+(\omega) | \} \quad (7.102)$$

mit der Zerlegung

$$\mathbb{1}_1 = |f_1\rangle\langle\tilde{f}_1| + \int_0^\infty d\omega |f^+(\omega)\rangle\langle\psi^+(\omega)| \quad . \quad (7.103)$$

Die Überlebensamplitude erhält die Darstellung

$$c_1(t) = \langle 1|U(t)|1\rangle \quad (7.104)$$

$$= e^{-iz_1 t} \langle 1|f_1\rangle\langle\tilde{f}_1|1\rangle + \int_0^\infty d\omega e^{-i\omega t} \langle 1|f^+(\omega)\rangle\langle\psi^+(\omega)|1\rangle \quad (7.105)$$

$$= \frac{1}{\eta'(z_1)} e^{-iz_1 t} + \int_0^\infty d\omega e^{-i\omega t} \frac{|W(\omega)|^2}{\eta_+^d(\omega)\eta_-(\omega)} \quad (7.106)$$

$$= \frac{e^{-iz_1 t}}{\eta'(z_1)} + \int_{\Gamma_+} dz e^{-izt} \frac{|W(z)|^2}{\eta_+(z)\eta_-(z)} \quad , \quad (7.107)$$

in Übereinstimmung mit dem Ergebnis (6.68) von Abschnitt 6.4, in welchem man auch die Diskussion dieses Ergebnisses findet.

Kapitel 8

Jenseits des Hilbertraums

Im Hilbertraum wäre die Konstruktion der verallgemeinerten Eigenvektoren der Brüsseler Schule und auch die der kontinuierlichen Friedrichs-Eigenvektoren gar nicht möglich. Um eine solche Methodik zu gewährleisten, muß der Hilbertraum verlassen und das Konzept der Quantenmechanik erweitert werden. In diesem letzten Kapitel werden wir das Konzept des Gel'fand-Tripels, auch *rigged Hilbert space (RHS)* genannt, vorstellen und dadurch den formalen Rahmen für die Definition verallgemeinerter Eigenvektoren schaffen. Ferner werden wir den speziellen RHS der Brüsseler Schule konstruieren, innerhalb dessen wir auf eine *intrinsische Irreversibilität* der fundamentalen Dynamik stoßen. Die Vertreter der Brüsseler Schule sehen hierin eine Manifestation des Zeitpfeils. Um dies zu prüfen, werden wir die Begründung der Wahl dieses speziellen RHS genau untersuchen. Dabei werden wir auf die verschiedenen Begründungen der realistischen und fundamentalistischen Fraktion der Brüsseler Schule eingehen. Wir werden zeigen, daß jede dieser Begründungen nicht für eine Herleitung des Zeitpfeils in Frage kommt. Abschließend werden wir einen RHS konstruieren, in dem die verallgemeinerten Eigenvektoren der Brüsseler Schule definierbar sind, der jedoch ohne intrinsische Irreversibilität auskommt.

8.1 Der Rigged Hilbert Space

Der unendlichdimensionale¹ Hilbertraum der Quantenmechanik ist aus physikalischer Sicht zu klein. Die Eigenwertgleichung

$$A|\varphi_a\rangle = a|\varphi_a\rangle \quad (8.1)$$

ist für viele physikalisch wichtige Observablen im Hilbertraum nicht lösbar. Zum Beispiel hat der eindimensionale Impulsoperator $P = -i\frac{\partial}{\partial x}$ zwar Eigenfunktionen, nämlich die ebenen Wellen $\varphi_p(x) = e^{ipx}$, diese sind aber nicht quadratintegrabel über \mathbb{R} und damit keine Hilbertvektoren aus $L^2(\mathbb{R})$. Um die Eigenwertgleichungen solcher Operatoren lösbar zu machen, muß man den Hilbertraum angemessen erweitern. Das mathematisch fundierte Konzept solcher Erweiterungen bietet das *Gel'fand-Tripel*, welches man auch mit *rigged Hilbert space (RHS)*² bezeichnet. Das Konzept eines solchen RHS rechtfertigt die Diracsche Bracket-Notation und läßt sich folgendermaßen darlegen:

- Gegeben sei ein Hilbertraum \mathcal{H} . Dort gibt es ein Skalarprodukt $\langle\psi|\varphi\rangle \in \mathbb{C}$ für alle Paare $\psi, \varphi \in \mathcal{H}$.

¹Wir gehen im folgenden stets von einem unendlichdimensionalen, separablen Hilbertraum aus.

²Wörtliche Übersetzung: "aufgetakelter Hilbertraum".

- Man nehme einen *Testraum* $\Phi \subset \mathcal{H}$ mit folgenden Eigenschaften:
 - Φ ist lokalkonvexer topologischer Vektorraum.
 - Φ ist dicht in \mathcal{H} .
 - Φ ist vollständig bezüglich seiner eigenen Topologie.

Man bilde nun seinen **topologischen Dualraum** Φ^\dagger . Letzterer besteht aus den linear-stetigen Funktionalen auf Φ . Dies sind Abbildungen $l_\chi : \Phi \rightarrow \mathbb{C}$ mit

$$\varphi_n \rightarrow \varphi \quad \Rightarrow \quad l_\chi(\varphi_n) \rightarrow l_\chi(\varphi) \quad . \quad (8.2)$$

Die Konvergenz in Φ wird dabei durch die Testraum-Topologie festgelegt (s.u.). Die linear-stetigen Funktionalen bezeichnet man als **Distributionen**.

- Man erweitere den Begriff des Skalarprodukts auf den des **Brackets** $\langle \cdot | \cdot \rangle$ für alle Paare $(l_\chi, \varphi) \in \Phi^\dagger \times \Phi$ durch

$$\langle \chi | \varphi \rangle := l_\chi(\varphi) \quad , \quad (8.3)$$

$$\langle \varphi | \chi \rangle := l_\chi^*(\varphi) \quad . \quad (8.4)$$

- Man definiere für $l_\chi \in \Phi^\dagger$ den **Bra** $\langle \chi |$ als lineares Funktional auf Φ durch

$$\langle \chi | := \langle \chi | \cdot \rangle \quad (8.5)$$

und für $\varphi \in \Phi$ den **Ket** $|\varphi \rangle$ als antilineares Funktional auf Φ^\dagger durch

$$|\varphi \rangle := \langle \cdot | \varphi \rangle \quad . \quad (8.6)$$

Analog definiere man $|\chi \rangle = \langle \cdot | \chi \rangle$ und $\langle \varphi | = \langle \varphi | \cdot \rangle$.

- Durch Einbettung erreicht man die hierarchische Ordnung

$$\Phi \subset \mathcal{H} \subset \Phi^\dagger \quad . \quad (8.7)$$

Man nennt dann das Tripel $\mathcal{G} = (\Phi, \mathcal{H}, \Phi^\dagger)$ **Gel'fand-Tripel** oder **Rigged Hilbert Space (RHS)**.

Dadurch erreicht man folgende Erweiterung: Die Topologie³ des Hilbertraums wird durch die Hilbertnorm induziert. Jede Topologie definiert einen Stetigkeitsbegriff⁴ und einen Konvergenzbegriff⁵. Hat der Testraum Φ eine stärkere Topologie⁶, dann gibt es mehr stetige Abbildungen auf ihm. So werden Operatoren und Funktionale, die bezüglich der Hilbertraum-Topologie unstetig sind, stetig bezüglich der Testraum-Topologie. Damit ist der Dualraum des Testraums größer als der Dualraum des Hilbertraums, der normisomorph zum Hilbertraum selbst ist. Mit anderen Worten: Es kommen neben den Hilbertvektoren neue Vektoren hinzu. Diese Vektoren haben unter Umständen eine unendliche oder eine verschwindende Hilbertnorm, sind aber Eigenvektoren bestimmter Operatoren. Dazu muß man diese Operatoren natürlich auf den Raum Φ^\dagger erweitern. Dies geschieht folgendermaßen:

³Topologie: Die Menge aller offenen Mengen.

⁴Stetige Funktion sind solche, bei denen die Urbilder offener Mengen ebenfalls offen sind.

⁵Eine Folge konvergiert genau dann gegen ein Element ψ , wenn jede offene Umgebung um ψ alle bis auf endlich viele Folgenglieder enthält.

⁶Eine Topologie, die Obermenge einer anderen ist, ist stärker als diese.

Sei $\varphi \in \Phi$, $\chi \in \Phi^\dagger$ und A^\dagger der zu einem Operator A adjungierte Operator, dann ist die Fortsetzung von A auf Φ^\dagger definiert durch

$$a) \quad \langle \varphi | A | \chi \rangle = \langle A^\dagger \varphi | \chi \rangle \quad , \quad (8.8)$$

$$b) \quad \langle \chi | A | \varphi \rangle = \langle \chi | A \varphi \rangle \quad . \quad (8.9)$$

Der erste Ausdruck ist nur zulässig, wenn die Anwendung von A^\dagger nicht aus Φ herausführt, der zweite nur, wenn die Anwendung von A nicht aus Φ herausführt, d.h.

$$a) \quad A^\dagger \Phi \subset \Phi \quad , \quad (8.10)$$

$$b) \quad A \Phi \subset \Phi \quad . \quad (8.11)$$

Wenn das Spektrum von A innerhalb des Hilbertraums \mathcal{H} identisch mit seinem Spektrum innerhalb von Φ^\dagger ist, dann nennt man $(\Phi, \mathcal{H}, \Phi^\dagger)$ **tight rigged** bezüglich A .

8.2 Der RHS der Standard-Quantenmechanik

Wir gehen der Einfachheit halber von einem eindimensionalen Ortsraum aus. Die folgenden Festlegungen lassen sich jedoch leicht auf den dreidimensionalen Fall erweitern.

Im $L^2 = L^2(\mathbb{R})$ wird das Skalarprodukt definiert durch

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int dx \psi^*(x) \varphi(x) \quad . \quad (8.12)$$

Man verallgemeinert den Funktionsbegriff auf Distributionen $\chi(x)$, so daß der Ausdruck

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \int dx \chi^*(x) \varphi(x) \quad (8.13)$$

für jede Testfunktion $\varphi \in \Phi$ existiert.

Ein besonders wichtiger Testraum ist der **Schwarzraum** $\mathcal{S} = \mathcal{S}(\mathbb{R})$ der unendlich oft differenzierbaren Funktionen über \mathbb{R} , die im Unendlichen stark abfallen:

$$\mathcal{S} = \left\{ \psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \mid \frac{\partial^m}{\partial x^m} \psi(x) \text{ ex. und } \sup_x |x^n \frac{\partial^m}{\partial x^m} \psi(x)| < \infty \text{ für jedes } n, m \in \mathbb{N} \right\} \quad . \quad (8.14)$$

Im Schwarzraum gibt es die Normfamilie

$$\|\psi\|_{n,m} = \sup_x |x^n \frac{\partial^m}{\partial x^m} \psi(x)| \quad . \quad (8.15)$$

Man kann den Schwarzraum dann metrisieren durch die **Supermetrik**

$$d(\psi, \varphi) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n} \frac{\|\psi - \varphi\|_n}{1 + \|\psi - \varphi\|_n} \quad , \quad (8.16)$$

wobei n die Mitglieder der Normfamilie abzählt. Bezüglich dieser Metrik ist \mathcal{S} vollständig. Außerdem ist \mathcal{S} dicht im L^2 . Die Elemente des Dualraums \mathcal{S}^\dagger nennt man **temperierte Distributionen**. Der RHS

$$\mathcal{S} \subset L^2 \subset \mathcal{S}^\dagger \quad (8.17)$$

ist der eigentliche Zustandsraum der Standard-Quantenmechanik. Hier läßt sich die Ableitung von Distributionen bis zu beliebiger Ordnung definieren:

$$\int dx \chi^{(n)}(x)\varphi(x) = (-1)^n \int dx \chi(x)\varphi^{(n)}(x) \quad . \quad (8.18)$$

Damit ist die Anwendung des Impulsoperators auf alle Testfunktionen gestattet und führt auch nicht aus dem Testraum heraus. Dies gilt auch für den Ortsoperator $Q = x$. Man sagt, der Schwarzraum wird durch Orts- und Impulsoperator *generiert*, denn er ist genau derjenige Raum, auf welchem alle Operator-Polynome

$$f(Q, P) = \sum_{n,m} c_{nm} Q^n P^m = \sum_{n,m} c_{nm} x^n \frac{\partial^m}{\partial x^m} \quad (8.19)$$

definierbar sind und nicht aus dem Raum herausführen. Innerhalb dieses RHS existieren Eigenvektoren des Impulsoperators: Das verallgemeinerte Skalarprodukt $\langle p|\varphi\rangle = \int dx e^{-ipx}\varphi(x) = \tilde{\varphi}(p)$ definiert den Wert der Fourier-Transformierten $\tilde{\varphi}$ von der Schwarz-Funktion φ an der Stelle p . Auch der Ortsoperator erhält mit der Deltafunktion seinen Eigenvektor: Das verallgemeinerte Skalarprodukt $\langle x|\varphi\rangle = \int dx' \delta(x-x')\varphi(x') = \varphi(x)$ definiert den Wert der Schwarz-Funktion φ an der Stelle x . Sowohl die ebenen Wellen e^{ipx} als auch die Deltafunktionen $\delta(x-x')$ sind Distributionen aus dem Dualraum \mathcal{S}^\dagger von \mathcal{S} .

Eine weitere wichtige Eigenschaft des Standard-RHS $(\mathcal{S}, L^2, \mathcal{S}^\dagger)$ ist, daß er *tight rigged* bezüglich der wichtigen physikalischen Observablen ist, daß also das RHS-Spektrum dieser Observablen ihrem Hilbertraum-Spektrum gleicht. Das ist keineswegs selbstverständlich. Wählt man als Testraum den Raum \mathcal{D} der unendlich oft differenzierbaren Funktionen mit kompaktem Träger, dann ist z.B. das Spektrum des Impulsoperators die ganze komplexe Ebene: Es gibt "komplexe ebene Wellen" $e^{izx} \in \mathcal{D}^\dagger$, die Eigenfunktionen des Impulsoperators sind, denn das verallgemeinerte Skalarprodukt

$$\langle p_z|\varphi\rangle = \int dx e^{-izx}\varphi(x) \quad (8.20)$$

existiert für beliebige $z \in \mathbb{C}$, weil die Testfunktionen $\varphi \in \mathcal{D}$ einen kompakten Träger haben. Damit ist der RHS $(\mathcal{D}, L^2, \mathcal{D}^\dagger)$ kein *tight rigged Hilbert space* bezüglich des Impulsoperators.

8.3 Der RHS der Brüsseler Schule

Die Brüsseler Schule benötigt für ihren Formalismus einen RHS, der ebenfalls nicht *tight rigged* ist. Es soll nämlich dem Hamiltonoperator H ein komplexes Spektrum gestattet werden. Wie wir bereits gesehen haben, beinhalten die daraus resultierenden verallgemeinerten Eigenvektoren komplexe Distributionen, die sich nur für Testfunktionen definieren lassen, die auf die untere bzw. obere Halbebene analytisch fortsetzbar sind. Im Falle des Friedrichsmodells handelt es sich um die Distributionen

$$\int_0^\infty d\omega \frac{1}{\eta_+^d(\omega)} \varphi(\omega) = \int_{\Gamma_+} dz \frac{1}{\eta_+(z)} \varphi(z) \quad (8.21)$$

$$\int_0^\infty d\omega \frac{\varphi(\omega)}{[z_1 - \omega]_+} = \int_0^\infty d\omega \frac{\varphi(\omega)}{z_1 - \omega} + i\pi\varphi(z_1) \quad , \quad (8.22)$$

wobei Γ_+ eine Kurve in der unteren Halbebene ist, die mit \mathbb{R}_+ den Punkt z_1 umschließt.

Sei $f(t)$ quadratintegrabel. Die Fourier-Transformation ist eine Bijektion im L^2 , daher ist die invers Fourier-Transformierte

$$g(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} f(t) \quad (8.23)$$

ebenfalls quadratintegrabel. Betrachten wir ω als Energievariable und fragen nach Kriterien, unter denen sich $g(\omega)$ auf die untere Halbebene fortsetzen läßt. Die Existenz der Funktion

$$g(\omega - iy) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{yt} e^{i\omega t} f(t) \quad (8.24)$$

ist für alle $y \geq 0$ garantiert, falls der Träger von $f(t)$ nach oben beschränkt ist, d.h. wenn es ein $s \in \mathbb{R}$ gibt mit $f(t) = 0$ für alle $t > s$. Wählen wir $s = 0$. Die Funktion berechnet sich dann durch

$$g(\omega - iy) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^0 dt e^{yt} e^{i\omega t} f(t) \quad (8.25)$$

und existiert nicht nur für jedes $y \geq 0$, sondern hat wegen $e^{yt} \leq 1$ ($y \geq 0, t \leq 0$) die zusätzliche Eigenschaft, *beschränkt in y* zu sein:

$$|g(\omega - iy)|^2 \leq |g(\omega)|^2 \quad \text{für alle } y \geq 0 \quad , \quad (8.26)$$

und damit gilt auch

$$\sup_{y \leq 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega |g(\omega - iy)|^2 \leq \int_{-\infty}^{\infty} d\omega |g(\omega)|^2 = C < \infty \quad . \quad (8.27)$$

Diese Eigenschaften werden aber gerade durch **Hardyfunktionen von unten** erfüllt. Die durch solche Funktionen gebildete **Hardyklasse** H_-^2 ist, mit der L^2 -Norm versehen, ein abgeschlossener Unterraum des L^2 und damit selbst ein Hilbertraum. Ganz analog erhalten wir Hardyfunktionen von oben, wenn der Träger der Funktion $f(t)$ nach unten durch $t = 0$ beschränkt ist. Die Hardyklassen sind uns bereits in Abschnitt 4.1 begegnet. Wir wiederholen kurz:

Definition 13 (Hardyklassen) Die Hardyklassen H_{\pm}^2 bestehen aus Funktionen g , die über der oberen/unteren Halbebene analytisch sind und für die gilt:

$$\sup_{y>0} M_y^{\pm}[g] < C < \infty \quad , \quad (8.28)$$

mit der **y-Norm**

$$M_y^{\pm}[g] := \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\omega |g(\omega \pm iy)|^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad . \quad (8.29)$$

Hardyfunktionen haben also eine beschränkte y -Norm.

Ferner läßt sich zeigen (siehe [7] Theorem 11.5):

Satz 3 (Monoton fallende y-Norm) Für $g \in H_{\pm}^2$ und $0 < y < y'$ gilt

$$M_y^{\pm}[g] \geq M_{y'}^{\pm}[g] \quad . \quad (8.30)$$

sowie (siehe [7] Theorem 11.9):

Satz 4 (Paley-Wiener-Theorem) Die inverse Fourier-Transformation der über der positiven/negativen Halbachse quadratintegrablen Funktionen bildet die Hardyklasse von oben/unten, d.h.

$$F^{-1}\{L^2(\mathbb{R}_\pm)\} = H_\pm^2 \quad . \quad (8.31)$$

Hardyfunktionen lassen sich analytisch auf die reelle Achse fortsetzen und sind dort quadratintegrabel. Damit kann man sie auch als L^2 -Funktionen auffassen, die auf die obere/untere Halbebene analytisch fortsetzbar sind und zusätzlich Satz 3 (Seite 87) erfüllen.

Anhand der Fourier-Darstellung kann man leicht einsehen, daß folgendes gilt:

Satz 5 (Komplexe Konjugation von Hardyfunktionen) Die komplex konjugierte einer auf \mathbb{R} restringierten Hardyfunktion von oben ist eine auf \mathbb{R} restringierte Hardyfunktion von unten:

$$g(\omega) \in H_+^2(\mathbb{R}) \Rightarrow g^*(\omega) \in H_-^2(\mathbb{R}) \quad . \quad (8.32)$$

Wenn wir noch dem Umstand Rechnung tragen, daß der Hamiltonoperator ein nach unten durch Null begrenztes Spektrum hat, restringieren wir die Hardyklassen H_\pm^2 zusätzlich auf \mathbb{R}_+ . Da Hardyklassen eindeutig durch ihre Werte auf \mathbb{R}_+ bestimmt sind (van Winter Theorem ([3], Seite 23)), verlieren wir bei dieser Restriktion keine Information und die Abbildung

$$\theta(H_\pm^2) := H_\pm^2(\mathbb{R}_+) \quad (8.33)$$

ist eine Bijektion. Der Testraum sollte außerdem noch aus Schwarzfunktionen bestehen, damit die in der Standard-Quantenmechanik üblichen Distributionen definierbar sind. Insgesamt erhalten wir den

RHS der Brüsseler Schule

Der *rigged Hilbert space* der Brüsseler Schule ist gegeben durch

$$\Phi_\pm \subset L^2(\mathbb{R}_+) \subset \Phi_\pm^\dagger \quad , \quad (8.34)$$

mit den Testräumen

$$\Phi_\pm := \theta(H_\pm^2 \cap \mathcal{S}) \quad . \quad (8.35)$$

Man sollte anmerken, daß

$$\theta(H_+^2 \cap \mathcal{S}) \cap \theta(H_-^2 \cap \mathcal{S}) \neq \emptyset \quad , \quad (8.36)$$

obwohl $H_+^2 \cap H_-^2 = \emptyset$ und damit auch $(H_+^2 \cap \mathcal{S}) \cap (H_-^2 \cap \mathcal{S}) = \emptyset$. Dies wurde von *Gadella* gezeigt ([9]). Außerdem gilt mit Satz 5

$$\Phi_+^* = \Phi_- \quad (8.37)$$

8.4 Intrinsische Irreversibilität

Es gibt eine eigentümliche Eigenschaft des RHS der Brüsseler Schule: Er führt zu einer intrinsischen Irreversibilität. Dies bedeutet, daß die verallgemeinerten Vektoren aus Φ_-^\dagger nur in die *Zukunft* und die aus Φ_+^\dagger nur in die *Vergangenheit* entwickelt werden können. Sei $\chi \in \Phi_+^\dagger$ ein verallgemeinerter Vektor und $\varphi \in \Phi_+$ ein Testvektor. Der Zeitpropagator im Energiebild multipliziert eine Energiefunktion mit $e^{-i\omega t}$:

$$(U(t)\varphi)(\omega) = e^{-i\omega t}\varphi(\omega) \quad . \quad (8.38)$$

Damit $U(t)$ auf Φ_+^\dagger fortsetzbar ist, darf gemäß (8.10) die Anwendung von $U^\dagger(t)$ nicht aus dem Testraum Φ_+ herausführen:

$$\varphi(\omega) \in \Phi_+ \quad \Rightarrow \quad (U^\dagger(t)\varphi)(\omega) = e^{i\omega t}\varphi(\omega) \in \Phi_+ \quad . \quad (8.39)$$

Betrachten wir jedoch die y -Norm von $U(t)\varphi$

$$M_y^+[U(t)\varphi] = \int_0^\infty d\omega |e^{i(\omega+iy)t}\varphi(\omega+iy)|^2 = e^{-yt}M_y^+[\varphi] \quad , \quad (8.40)$$

dann sehen wir, daß diese für $t < 0$ bezüglich y über alle Grenzen steigt und damit ist $U(t)\varphi$ gemäß Satz 3 (Seite 87) keine Hardyfunktion mehr. Also ist die Erweiterung des Zeitpropagators $U(t)$ auf den Raum Φ_+^\dagger nur für $t \geq 0$ zulässig. Analog zeigt man, daß die Erweiterung von $U(t)$ auf Φ_-^\dagger nur für $t \leq 0$ erlaubt ist. Damit ist die Zeitentwicklung von Testfunktionen aus Φ_\pm nur für $t \geq 0$ bzw. $t \leq 0$ möglich. Schauen wir uns nun das Basissystem B_1 an.

$$B_1 = \{|f_k\rangle, \langle \tilde{f}_k|, |f^+(E)\rangle, \langle \psi^+(E)|\} \quad . \quad (8.41)$$

- $\langle \varphi|f_k\rangle$ setzt $\varphi^*(\omega)$ auf die untere Halbebene fort, also gemäß (8.37) $\varphi(\omega)$ auf die obere:

$$\varphi \in \Phi_+ \quad \text{und} \quad f_k \in \Phi_+^\dagger$$

\Rightarrow Der instabile Zustand $|f_1\rangle$ zerfällt nur in die Zukunft ($t \geq 0$).

- $\langle \tilde{f}_k|\varphi\rangle$ setzt $\varphi(\omega)$ auf die untere Halbebene fort:

$$\varphi \in \Phi_- \quad \text{und} \quad \tilde{f}_k \in \Phi_-^\dagger$$

\Rightarrow Der instabile Zustand $|\tilde{f}_1\rangle$ zerfällt nur in die Vergangenheit ($t \leq 0$).

- $\langle \varphi|f^+(E)\rangle$ setzt $\varphi^*(\omega)$ auf die untere Halbebene fort, also $\varphi(\omega)$ auf die obere:

$$\varphi \in \Phi_+ \quad \text{und} \quad f^+(E) \in \Phi_+^\dagger$$

\Rightarrow Die kontinuierlichen Energiezustände entwickeln sich nur in die Zukunft.

- $\langle \psi^+(E)|\varphi\rangle$ ist ein *Bracket* des gewöhnlichen Schwarz-RHS. \Rightarrow Die kontinuierlichen Energiezustände entwickeln sich in beide Zeitrichtungen.

Das Verhalten der Zustände entspricht unseren Beobachtungen. Die Basissysteme B_1, B_2, B_3 und B_4 enthalten komplexe Distributionen sowohl aus Φ_+^\dagger als auch aus Φ_-^\dagger . Diese sind aber nur jeweils für eine bestimmte Zeitrichtung entwickelbar. Die Auswahl des Basissystems B_1 durch die Zeitordnungsregel entspricht der Anpassung des Modells an die empirische Realität.

Intrinsische Irreversibilität

Sei $\Phi_{\pm} = (H_{\pm}^2 \cap \mathcal{S})(\mathbb{R}_{\pm})$ ein Testraum. Die Zeitentwicklung von Testfunktionen aus Φ_{+} ist nur für $t \geq 0$ zulässig und die von Funktionen aus Φ_{-} nur für $t \leq 0$. Die Zeitpropagatoren $U(t)$ bilden auf Φ_{+} und Φ_{-} jeweils eine Halbgruppe mit $t \geq 0$ bzw. $t \leq 0$.

Diese zeitliche Asymmetrie interpretieren die Vertreter der Brüsseler Schule als Manifestation eines Zeitpfeils auf der fundamentalen Ebene: Wenn man das RHS der Brüsseler Schule zugrundelegt, dann zerfällt die zeitliche Entwicklung *a priori* in zwei Richtungen: die Bewegungsgleichung

$$|\varphi(t)\rangle = U(t)|\varphi\rangle \quad (8.42)$$

gilt nur für $t \geq 0$ bzw. $t \leq 0$, je nachdem, aus welchem Testraum φ stammt. Ist der Anfangszustand eines Systems z.B. durch $\varphi \in \Phi_{+}$ gegeben, so kann es sich nur in die *Zukunft* ($t \geq 0$) entwickeln.

8.5 Begründung der Wahl des RHS

Die Frage stellt sich natürlich, ob ein solcher RHS, der für zeitliche Asymmetrie sorgt, wirklich zwingend erforderlich ist.

8.5.1 Realistische Fraktion

Die in der vorliegenden Arbeit als *realistische Fraktion* bezeichnete Gruppe von Vertretern der Brüsseler Schule (siehe zu Argumentation und verwendeten Zitaten, den Beitrag von A. Bohm und N.L. Harshman in [3], Seite 180ff, sowie den Beitrag von C. Schulte und R. Twarock in [6], Seite 53ff) rechtfertigt die Wahl des RHS durch Kausalitätsannahmen. Danach zerfällt jeder Meßvorgang in zwei Stadien:

1. Das **Präparationsstadium**, in welchem ein Zustand präpariert wird.
2. Das **Meßstadium**, in welchem eine Observable am Zustand gemessen wird.

Der Zeitpunkt, zu dem die Präparation abgeschlossen ist und die Messung beginnen kann, ist $t = 0$. Die Kausalitätsannahme, die von den Autoren als *preparation*→*registration arrow of time* bezeichnet wird, lautet:

Kausalitätsannahme (preparation→registration arrow of time)

“Time translation of the registration apparatus relative to the preparation apparatus makes sense only for an amount of $t \geq 0$.”

Nun wird der Operator $|\phi^+\rangle\langle\phi^+|$ als *präparierter Zustand* definiert. In der Begriffsaxiomatik entspricht dies der Präparations-Apparatur. Der Operator $|\psi^-\rangle\langle\psi^-|$ hingegen wird als *Observable* definiert, die der Meßapparatur entspricht. Die Vertreter der realistischen Fraktion der Brüsseler Schule übertragen nun den allgemeinen *preparation*→*registration arrow of time* in den Formalismus der Quantenmechanik, wo er *quantum mechanical arrow of time* genannt wird:

Kausalitätsannahme (quantum mechanical arrow of time)

- “1. (Heisenberg picture) An observable $|\psi^-(t)\rangle\langle\psi^-(t)|$ can be measured in a state $\phi^+(= \phi^+(0))$ only after the state has been prepared, i.e., for $t \geq 0$.
2. (Schrödinger picture) A state $\phi^+(t)$ must be prepared before an observable $|\psi^-\rangle\langle\psi^-| (= |\psi^-(0)\rangle\langle\psi^-(0)|)$ can be measured in that state, i.e., ϕ^+ must be prepared during $t \leq 0$.”

Zum Zeitpunkt $t = 0$ ist die Präparation von $W = |\phi^+\rangle\langle\phi^+|$ abgeschlossen, und die Messung der Observablen $\Lambda(t) = |\psi^-(t)\rangle\langle\psi^-(t)|$ kann beginnen. Es ergibt sich der Erwartungswert

$$\text{Tr}\{W\Lambda(t)\} = |\langle\psi^-(t)|\phi^+\rangle|^2 \quad . \quad (8.43)$$

Die Präparationszustände sollen nun in der Energiedarstellung Schwarzfunktionen sein, deren Fourier-Transformierte für $t > 0$ verschwindet, denn nach dem Zeitpunkt $t = 0$ findet keine Präparation mehr statt. Dagegen sollten die Fourier-transformierten Energiefunktionen der Meßzustände für $t < 0$ verschwinden, weil dort keine Messung möglich ist. Hierbei wurde der *quantum mechanical arrow of time* benutzt. In der Tat führt dies unter Verwendung des Paley-Wiener-Theorems zur Auswahl des Testraums Φ_+ bzw. Φ_- und damit zur intrinsischen Irreversibilität. Damit ist (8.43) nur für $t \geq 0$ gültig.

8.5.2 Kritik

Es handelt sich bei der Argumentation der realistischen Fraktion der Brüsseler Schule nicht um eine *Herleitung* des Zeitpfeils, sondern um seine *Implementierung*. Es kann sich um keine Herleitung handeln, weil der Ausgangspunkt, nämlich die Kausalitätsannahme, in beiden Versionen bereits eine Zeitrichtung auszeichnet, nämlich die *positive* Richtung. Dies wird in der zweiten Version unter anderem durch die Verwendung der Vokabeln “*before*” und “*after*” deutlich, die mathematisch mit $t \leq 0$ bzw. $t \geq 0$ verbunden werden. Auch in der Wortwahl “*preparation*→*registration arrow of time*” bzw. “*quantum mechanical arrow of time*” kommt die Bedeutung der Kausalitätsannahmen als Festlegung eines Zeitpfeils zum Vorschein. Dies wird von den Autoren auch insofern nicht bestritten, als daß sie tatsächlich nur von einer *Implementierung* des quantenmechanischen Zeitpfeils sprechen:

“In the RHS formulation the quantum mechanical arrow of time can be implemented in the following way: [...]”

Hiernach folgt die Argumentation über die Fouriertransformationen der Energiefunktionen.

Würde man die gesamte Argumentation als Herleitung betrachten, so lautete sie inhaltlich folgendermaßen: “Wir setzen voraus, daß sich meßbare Zustände nur in die Zukunft entwickeln können, präparierbare Zustände hingegen nur in die Vergangenheit. Daraus ergeben sich bestimmte mathematische Strukturen, aus denen wir schließen, daß sich meßbare Zustände nur in die Zukunft und präparierbare Zustände nur in die Vergangenheit entwickeln können.” Dies ist offensichtlich ein Zirkelschluß. Man hätte auch ohne den Umweg über die Konstruktion eines speziellen RHS den quantenmechanischen Zeitpfeil implementieren können, indem man einfach für den Zeitpropagator $U(t)$ die Aufteilung in zwei Halbgruppen axiomatisch *festlegt*. Hiermit wäre jedoch zweifellos niemand zufrieden gewesen.

Den Vertretern der realistischen Fraktion ist klar, so muß man folgern, daß der Zeitpfeil durch den Brüsseler Formalismus nicht *hergeleitet* wird, sondern, daß vielmehr die axiomatisch gewählte Zeitrichtung für die Entwicklung meßbarer bzw. präparierbarer Zustände durch die mathematische Struktur des Formalismus *wiedergespiegelt* wird.

8.5.3 Fundamentalistische Fraktion

Die in der vorliegenden Arbeit als *fundamentalistische Fraktion* bezeichnete Gruppe von Vertretern der Brüsseler Schule (siehe zu Argumentation und verwendeten Zitaten die Veröffentlichungen [18], [2] und [3], sowie auch die Beiträge verschiedener Vertreter der Brüsseler Schule in [6]) besteht auf einer Herleitung des Zeitpfeils. Sie postuliert die Existenz der verallgemeinerten Vektoren. Deren Existenz, so wird argumentiert, bedingt den Brüsseler RHS, woraus sich ein Zeitpfeil ableiten läßt.

Im Zusammenhang mit der Verwendung der Zeitordnungsregel (*time ordering rule*) wird in der früher publizierten Schrift [18] immerhin eingeräumt, die intrinsische Irreversibilität nicht herzuleiten, sondern zu implementieren. Bereits in Abschnitt 7.2 haben wir aus [18] zitiert:

“We emphasize that we do not *deduce* irreversibility but show that irreversibility can be incorporated into dynamics in the frame of an extended dynamical scheme when dealing with LPS.”

In der später erschienenen Veröffentlichung [2] hingegen wird gesagt:

“Irreversibility emerges naturally as the selection of semigroup corresponding to our observations. In this case decay is observed in our future, therefore the extension to the space Φ_+^\dagger is the relevant one.”

Im Beitrag von J.-P. Antoine in [3] findet man die Schlußfolgerung

“Since the preparation of the state ϕ^+ must be completed (at time $t = 0$) before the detection begins, there is an intrinsic asymmetry between past and future, that is, one may define an arrow of time.”

8.5.4 Kritik

Offenbar ist Antoine kein Vertreter der realistischen Fraktion, denn er nimmt an, daß der Zeitpfeil aus dem Brüsseler Formalismus *abgeleitet* werden kann. Andererseits stützt er sich auf die Voraussetzung, daß der Zustand ϕ^+ bis zum Zeitpunkt $t = 0$ vollständig präpariert sein muß, bevor die Messung beginnt und nimmt damit offenbar die von der realistischen Fraktion favorisierte Kausalitätsannahme in seine Axiomatik auf. Diese jedoch ist für eine Herleitung des Zeitpfeils nicht verwendbar, da sie bereits einen Zeitpfeil enthält. Die Kausalitätsannahme ist eine Tautologie für den Zeitpfeil und damit ist ein Schluß aus der Kausalitätsannahme auf einen Zeitpfeil ein Zirkelschluß.

Wenden wir uns der Argumentation von *Antoniou* und *Petrosky* zu ([2]). Die Halbgruppen-Eigenschaft der Zeitpropagatoren resultiert aus der Wahl des speziellen Brüsseler RHS. Damit wäre die Herleitung des Zeitpfeils aus der intrinsischen Irreversibilität nicht mehr möglich, falls ein anderer RHS konstruierbar wäre, in welchem die von der Brüsseler Schule konstruierten verallgemeinerten Vektoren definierbar sind. Ein solcher RHS ist allerdings konstruierbar, wie wir im nächsten Kapitel sehen werden.

Kapitel 9

Ein alternativer RHS

In diesem Kapitel werden wir einen RHS konstruieren, in welchem die verallgemeinerten Eigenvektoren der Brüsseler Schule definierbar sind, in welchem jedoch keine intrinsische Irreversibilität herrscht. Wir werden sogar sehen, daß dieser RHS aus physikalischer Sicht gewisse Vorteile gegenüber dem RHS der Brüsseler Schule aufweist.

9.1 Konstruktion und Eigenschaften

Betrachten wir den Raum der unendlich oft differenzierbaren Funktionen auf \mathbb{R} mit kompaktem Träger:

$$\mathcal{D} := \{\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \mid \infty\text{-fach stetig differenzierbar und auf } \mathbb{R} \setminus [a, b] \text{ verschwindend}\} . \quad (9.1)$$

Es gilt $\mathcal{D} \subset \mathcal{S} \subset L^2$. Betrachten wir nun den Raum der invers Fourier-Transformierten \mathcal{D} -Funktionen

$$\mathcal{Z} := \mathbb{F}^{-1}\{\mathcal{D}\} . \quad (9.2)$$

Die Fourier-Transformation ist eine Bijektion im Schwarzraum \mathcal{S} , daher ist

$$\mathcal{Z} \subset \mathcal{S} . \quad (9.3)$$

Sei $f(t)$ eine \mathcal{D} -Funktion. Ihre invers Fourier-Transformierte lautet:

$$g(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_a^b dt e^{i\omega t} f(t) , \quad (9.4)$$

wobei $a, b \in \mathbb{R}$ durch f bestimmt sind. Die analytische Fortsetzung von g auf die komplexe Ebene ist

$$g(\omega + iy) = \frac{1}{2\pi} \int_a^b dt e^{-yt} e^{i\omega t} f(t) . \quad (9.5)$$

Dieser Ausdruck existiert für jedes y , also auch für $y < 0$. Damit ist g auf der ganzen komplexen Ebene analytisch (siehe dazu auch [21], Theorem 7.22). Die Schwarzfunktion $g(\omega)$ ist jedoch

im allgemeinen nicht in irgendeiner Hardyklasse. Dies ist leicht zu zeigen. Mit $t \in [a, b]$ gilt:

$$y > 0 : \quad e^{-yt} \geq e^{-yb} \quad , \quad (9.6)$$

$$y < 0 : \quad e^{-yt} \geq e^{-ya} \quad . \quad (9.7)$$

Daraus ergibt sich

$$y > 0 : \quad |g(\omega + iy)|^2 \geq e^{-2yb} \left| \frac{1}{2\pi} \int_a^b dt e^{i\omega t} f(t) \right|^2 = e^{-2yb} |g(\omega)|^2 \quad , \quad (9.8)$$

$$y < 0 : \quad |g(\omega + iy)|^2 \geq e^{-2ya} \left| \frac{1}{2\pi} \int_a^b dt e^{i\omega t} f(t) \right|^2 = e^{-2ya} |g(\omega)|^2 \quad , \quad (9.9)$$

und damit

$$M_y^+[g] \geq e^{-yb} M_0^+[g] \quad , \quad (9.10)$$

$$M_y^-[g] \geq e^{ya} M_0^-[g] \quad . \quad (9.11)$$

Für $b < 0$ wächst $M_y^+[g]$ unbeschränkt mit $y \rightarrow \infty$ und damit ist g gemäß Satz 3 (Seite 87) nicht in H_+^2 . Für $a > 0$ wächst $M_y^-[g]$ mit $y \rightarrow \infty$ unbeschränkt und damit ist g nicht in H_-^2 . Weil in \mathcal{D} für alle Funktionen der Träger zwar kompakt, nicht aber festgelegt ist, so ist \mathcal{D} keine Teilmenge einer Hardyklasse. \mathcal{D} ist auch keine Obermenge einer Hardyklasse, da der Träger der Fourier-Transformierten einer Hardyfunktion stets nur entweder von oben durch Null (H_-^2) oder von unten durch Null (H_+^2) beschränkt ist, im allgemeinen aber nicht zugleich von oben und unten.

Der Raum \mathcal{D} ist ein lokalkonvexer, topologischer Vektorraum, der bezüglich seiner (nicht metrisierbaren) Topologie vollständig und außerdem dicht in L^2 ist¹. Er ist ein klassischer Testraum, auf ihm wurden die ersten Distributionen definiert. Die Topologie $T_{\mathcal{D}}$ von \mathcal{D} übertragen wir mittels inverser Fourier-Transformation auf \mathcal{Z} :

$$T_{\mathcal{Z}} := F^{-1}\{T_{\mathcal{D}}\} \quad . \quad (9.12)$$

Die inverse Fourier-Transformation ist eine Bijektion und mit der transformierten Topologie trivialerweise stetig, da die Urbilder offener Mengen (Elemente aus $T_{\mathcal{D}}$) offene Mengen sind (Elemente aus $T_{\mathcal{Z}} = F^{-1}\{T_{\mathcal{D}}\}$). Also übertragen sich die topologischen Eigenschaften von \mathcal{D} auf \mathcal{Z} . Ebenso überträgt sich die Eigenschaft, dicht in L^2 zu sein. Damit ist $(\mathcal{Z}, T_{\mathcal{Z}})$ ein *vollständiger lokalkonvexer topologischer Raum, der dicht in L^2 ist*. Er besteht aus Funktionen, die analytisch auf ganz \mathbb{C} sind. Der auf \mathbb{R}_+ restringierte Raum $\mathcal{Z}(\mathbb{R}_+)$ besteht daher aus Schwarz-Funktionen über \mathbb{R}_+ , die analytisch fortsetzbar auf ganz \mathbb{C} sind. Er ist daher ein einwandfreier Testraum für die von der Brüsseler Schule konstruierten verallgemeinerten Eigenvektoren.

¹Die genaue Konstruktion der Topologie bedarf funktionalanalytischer Methoden, die den Rahmen dieser Arbeit sprengen. Genauere Informationen entnehme man [21], Abschnitt 6.2ff. Wichtig ist hier die Tatsache, daß eine Topologie konstruierbar ist, bezüglich der \mathcal{D} vollständig ist. Man kann dann zeigen, daß diese Topologie nicht metrisierbar ist. Grob gesprochen wäre der Konvergenzbegriff einer metrisierbaren Topologie, die für \mathcal{D} ebenfalls existiert, zu schwach, da er konvergente Folgen zuließe, deren Grenzelement nicht in \mathcal{D} läge. Man konstruiert stattdessen eine stärkere Topologie, bezüglich welcher solche Folgen nicht mehr konvergent sind, womit der so topologisierte Raum \mathcal{D} vollständig ist.

Der Brüsseler Formalismus ließe sich im RHS

$$\mathcal{Z}(\mathbb{R}_+) \subset L^2(\mathbb{R}_+) \subset \mathcal{Z}^\dagger(\mathbb{R}_+) \quad (9.13)$$

definieren. Jedoch gibt es hier keinerlei intrinsische Irreversibilität. Dazu betrachten wir die Fourier-Transformation von $e^{i\omega s}g(\omega)$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} e^{i\omega s} g(\omega) = f(t-s) \quad (9.14)$$

Wenn also $f(t)$ den Träger $[a, b]$ hat, dann hat $f_s(t) := f(t-s)$ den Träger $[a-s, b-s]$. Der ist für jedes $s \in \mathbb{R}$ ebenfalls kompakt, womit $f_s(t)$ eine \mathcal{D} -Funktion ist. Da diese Überlegungen für jedes $g(\omega) \in \mathcal{Z}$ gelten, ist damit gezeigt, daß alle Testfunktionen aus \mathcal{Z} zeitlich entwickelt werden können, und zwar in jede beliebige Zeitrichtung.

9.2 Physikalische Betrachtungen

Aus physikalischer Sicht sollte man noch zwei Dinge anmerken:

1. Der Testraum des Brüsseler RHS enthält keine Energie-Gaußverteilungen. Die analytische Fortsetzung der Funktion

$$g(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(\omega-\omega_0)^2}{2\sigma}} \quad (9.15)$$

existiert zwar auf ganz \mathbb{C} , ihr Betragsquadrat divergiert jedoch exponentiell für wachsenden und fallenden Imaginärteil:

$$g(\omega + iy) \sim e^{y^2} \quad (9.16)$$

Damit ist die Gaußverteilung gemäß Satz 3 (Seite 87) in keiner Hardyklasse, demnach im Sinne des Brüsseler RHS keine zulässige Testfunktion. Die Fourier-Transformierte von g ist selbst eine Gaußfunktion, diesmal in der Zeit. Wenn man ihren Träger auf ein genügend großes Kompaktum beschränkt, dann ergibt die inverse Fourier-Transformation ein Energie-Funktion, die sich von der Gaußverteilung kaum merklich unterscheidet, die aber in \mathcal{Z} enthalten ist.

2. Wenn man die Testfunktionen aus \mathcal{Z} als die tatsächlich physikalisch realisierbaren Zustände betrachtet, dann gibt es eine weitere wichtige Konsequenz: Die Fourier-Transformierte einer \mathcal{Z} -Energiefunktion ist eine Zeitfunktion mit kompaktem Träger. Damit sind in \mathcal{Z} alle Zustände mit *endlicher Lebensdauer*! Zunächst scheint dies im Widerspruch zu stehen mit der Schärfe der diskreten Energieniveaus in Atomen, deren Lebensdauer unbegrenzt ist. Doch die Arbeit von Wigner und Weisskopf (siehe [26]) hat die tatsächliche *Verschwommenheit* dieser scheinbar scharfen Niveaus ans Licht gebracht. Diese Verschwommenheit hängt zusammen mit der Instabilität jedes Zustands aufgrund der Anwesenheit anderer Zustände, mit denen er über elektromagnetische Wechselwirkung gekoppelt ist. Er wird über diese Kopplung instabil und erhält eine endliche Lebensdauer. Dies ist übrigens auch die Essenz unserer Untersuchungen des Friedrichsmodells. Hier wird ein diskreter Zustand durch eine Wechselwirkung an ein kontinuierliches

Feld gekoppelt. Dies entspricht formal, wie wir gezeigt haben, der Situation eines Zwei-Niveau-Systems im Vakuum eines Strahlungsfeldes. Und auch für dieses einfache System ergibt sich eine Instabilität des diskreten Zustands. Scharfe diskrete Energieniveaus sind demnach eine Idealisierung, wohingegen physikalisch realisierbare Zustände stets von endlicher Lebensdauer und somit durch Vektoren im \mathcal{Z} -Raum beschreibbar sind.

Die letzte Überlegung führt zu einer ganz allgemeinen Interpretation des *rigged Hilbert space*:

Physikalische Interpretation des RHS

Sei $\Phi \subset \mathcal{H} \subset \Phi^\dagger$ ein RHS. Die darin enthaltenen Vektoren lassen sich folgendermaßen interpretieren:

- Die Vektoren des Distributionsraumes Φ^\dagger entsprechen **idealisierten Zuständen**. Sie kommen in der Natur nicht vor, finden aber ihren abstrakten Platz in Spektralzerlegungen.
- Die Vektoren des Testraumes Φ entsprechen physikalisch **realisierbaren Zuständen**. Sie sind Objekte der physikalischen Realität und im Experiment präparierbar.

Schematisch stellt sich diese Interpretation so dar:

$$\begin{array}{ccc} \Phi^\dagger & \xrightarrow{\langle \chi | \varphi \rangle} & \Phi \\ \text{idealisierte} & & \text{reale} \\ \text{Zustände} & & \text{Zustände} \end{array}$$

Gestützt wird diese Interpretation von der Tatsache, daß Spektralzerlegungen, die sich verallgemeinerter Eigenvektoren bedienen, strenggenommen nur auf dem Testraum definiert sind:

Sei Φ^\dagger ein Distributionsraum und $\chi_k, \tilde{\chi}_k, \chi_a, \tilde{\chi}_a \in B$ verallgemeinerte Basisvektoren eines Basissystems $B \subset \Phi^\dagger$ dann ist die Spektralzerlegung

$$\mathbb{1}_B = \sum_k |\chi_k\rangle\langle\tilde{\chi}_k| + \int_\sigma da |\chi_a\rangle\langle\tilde{\chi}_a| \quad (9.17)$$

eine Sesquilinearform auf $\Phi \times \Phi$. Gäbe es also physikalisch realisierbare Vektoren $\psi \in \Phi^\dagger \setminus \Phi$, dann wären sie strenggenommen nicht durch diese Spektralzerlegung darstellbar.

Fazit

- Es lassen sich auf der Basis eines Nicht-Standard-RHS Eigenvektoren zum Hamiltonoperator konstruieren, die zu einer Analytizität im Störparameter führen und somit eine Störreihenentwicklung auch bei nicht-integrablen Systemen ermöglichen.
- Es sind vier verschiedene einander äquivalente Basissysteme konstruierbar. Eins dieser Systeme läßt sich besonders gut interpretieren, da es das mikroskopische Geschehen durch die Dynamik der beteiligten Basisvektoren in Übereinstimmung mit unserer Erwartung wiedergibt. Die Zeitordnungsregel der Brüsseler Schule selektiert dieses Basissystem aus. Jedoch führen auch die anderen Basissysteme zur korrekten Dynamik der Erwartungswerte.
- Durch die Wahl eines speziellen RHS läßt sich die fundamentale Dynamik nur in jeweils eine der beiden möglichen Zeitrichtungen formulieren. Diese *intrinsische Irreversibilität* kommt in der Standard-Beschreibung der Physik nicht vor. Durch Präparation bestimmter Anfangszustände könnte man eine der beiden Zeitrichtungen als die "richtige" auszeichnen.
- Die realistische Fraktion der Brüsseler Schule begründet die Wahl dieses speziellen RHS durch eine Kausalitätsannahme. Diese jedoch setzt bereits einen Zeitpfeil voraus und daher ist eine Herleitung des Zeitpfeils aus dieser Kausalitätsannahme unzulässig.
- Die fundamentalistische Fraktion der Brüsseler Schule begründet die Wahl des speziellen RHS durch Postulierung der Existenz gewisser verallgemeinerter Vektoren. Wir haben jedoch gezeigt, daß sich ein alternativer RHS konstruieren läßt, in dem besagte Vektoren ebenfalls definierbar sind, in dem jedoch keine intrinsische Irreversibilität herrscht. Damit ist diese Herleitung ebenfalls unzulässig.
- Der Testraum des RHS der Brüsseler Schule enthält keine Gaußschen Energieverteilungen. Dagegen enthält der Testraum des alternativen RHS Verteilungen, die der Gaußverteilung beliebig nahekommen.
- Der Testraum des alternativen RHS enthält alle Zustände mit endlicher Lebensdauer, auf die Orts- und Impulsoperator angewandt werden dürfen. Damit entsprechen sie physikalisch relevanten und realisierbaren Zuständen.

Zusammenfassung

Das Friedrichsmodell ist das einfachste System, in dem Instabilität vorkommt. Dieses Phänomen wird verursacht durch die Kopplung eines diskreten Zustands über eine Wechselwirkung an ein Kontinuum von Zuständen. Ohne diese Kopplung bleibt das diskrete Niveau in der Spektralzerlegung des Hamiltonoperators erhalten und ist daher stabil. Das Friedrichsmodell entspricht unter bestimmten vereinfachenden Annahmen einem Zwei-Niveau-System im Vakuum eines Strahlungsfeldes und ist daher physikalisch interpretierbar. Es ist daher ein ausgezeichneter Prüfstein verschiedener Methoden in der Behandlung von Instabilität. Dies wurde ausführlich unternommen, wobei der Schwerpunkt auf dem Vergleich der Standard-Quantenmechanik mit der verallgemeinerten Quantenmechanik der Brüsseler Schule lag. Wir sind dabei zu folgendem Ergebnis gekommen:

Der Formalismus der Brüsseler Schule führt zu denselben physikalischen Ergebnissen wie der Formalismus der Standard-Quantenmechanik. Die durch ihn erhaltene Spektralzerlegung ist, wie wir explizit gezeigt haben, äquivalent zur Spektralzerlegung durch die Friedrichs-Eigenvektoren. Im Formalismus der Brüsseler Schule wird der Integrationsweg über das kontinuierliche Spektrum des Hamiltonoperators in den Ausdrücken für Vektoren und Operatoren zu einer komplexen Kurve verformt, wodurch sich verallgemeinerte Vektoren und Operatoren ergeben. Man findet eine genaue Entsprechung im Formalismus der Standard-Quantenmechanik. Hier wird jedoch der Integrationsweg in den skalaren Funktionen der Erwartungswerte und damit in einem für die Standard-Quantenmechanik zulässigen Rahmen durchgeführt. Die Dynamik der Erwartungswerte wird in beiden Formalismen korrekt wiedergegeben. Worin sich der Formalismus der Brüsseler Schule von dem der Standard-Quantenmechanik unterscheidet, ist allerdings eine gewisse Eleganz. Man erhält sehr kompakte Ausdrücke, die intuitiv interpretierbar und leicht zu approximieren sind. Außerdem ist hier eine Entwicklung in Störreihen möglich, da die Analytizität im Störparameter erhalten wird. Der Preis dafür sind allerdings Schwierigkeiten in der physikalischen Interpretation der verallgemeinerten Eigenvektoren. Bestimmte verallgemeinerte Eigenvektoren, die *Gamov-Vektoren*, besitzen keine Hilbertnorm und liefern daher auch keine endlichen Erwartungswerte. Sie besitzen komplexe Eigenwerte bezüglich des Hamiltonoperators und zerfallen damit in jeweils einer Zeitrichtung exponentiell, wachsen dafür aber in der entgegengesetzten Zeitrichtung über alle Grenzen. Es wird dadurch jedoch keine Katastrophe verursacht, da ihre Norm verschwindet und ihr Beitrag in der Spektralzerlegung von anderen verallgemeinerten Vektoren exakt aufgehoben wird. Für sich alleine betrachtet, bieten sie jedoch keine direkte Interpretationsmöglichkeit. Wenn man hingegen die physikalisch realisierbaren Zustände ausschließlich mit den Testvektoren identifiziert, vermeidet man besagte Schwierigkeiten. Die Brüsseler Schule führt diese Identifikation nicht durch und spricht den verallgemeinerten Vektoren eine physikalische Bedeutung zu, allerdings erst im Rahmen des Dichtematrix-Formalismus.

Durch die Instabilität eines Zustands wird eine tendenzielle Irreversibilität eingeführt: Die

Wahrscheinlichkeit, den instabilen Zustand nachzuweisen, nimmt mit der Zeit monoton ab. Im Sinne einer dynamischen Entwicklung läßt sich dadurch jedoch kein Zeitpfeil definieren: Die Messung des Zustands würde dem von Neumannschen Projektionspostulat folgen und damit a priori irreversibel sein, weil dabei Informationen über quantenmechanische Korrelationen unwiederbringlich verlorengehen. Ein Informationsverlust ist jedoch im Erfahrungsbereich eines Laplaceschen Dämons nicht möglich und daher läßt sich eine solche Irreversibilität vor ihm nicht rechtfertigen. Grob gesprochen: Die Wahrscheinlichkeit, den Zustand nachzuweisen, nimmt zwar mit der Zeit ab, dies kann aber nie verifiziert werden, ohne in Diskrepanz mit dem Laplaceschen Dämon zu geraten. Wenn der Dämon als Maßstab für Objektivität genommen werden soll, so wird folglich durch das von Neumannsche Projektionspostulat kein objektiver Prozeß beschrieben. Hier gerät man in ernste Konflikte, die in den Bereich des Meßproblems gehören, das hier nicht erörtert werden soll.

Die Brüsseler Schule behauptet, einen Ausweg aus diesem Dilemma gefunden zu haben, indem sie der von ihr formulierten fundamentalen Dynamik eine *intrinsische Irreversibilität* zuspricht. Diese intrinsische Irreversibilität wird verursacht durch eine zeitliche Asymmetrie in der Entwicklung der von ihr zugrundegelegten Testvektoren eines speziell gewählten Gel'fand-Tripels. Es gibt zwei Argumentationsrichtungen, die Wahl dieses Gel'fand-Tripels zu rechtfertigen: Die *realistische Fraktion* benutzt eine *Kausalitätsannahme*. Wir haben gezeigt, daß diese Kausalitätsannahme bereits einen Zeitpfeil beinhaltet, womit eine Herleitung des Zeitpfeils insgesamt zu einem Zirkelschluß wird. Die *fundamentalistische Fraktion* behauptet, die Konstruktion der verallgemeinerten Vektoren erzwingt die Wahl des besagten Gel'fand-Tripels. Wir haben jedoch gezeigt, daß dies nicht der Fall ist, indem wir explizit ein Gel'fand-Tripel konstruierten, welches den Anforderungen genügt, in dem jedoch keine intrinsische Irreversibilität herrscht. Damit enthält die Argumentation der fundamentalistischen Fraktion einen Fehlschluß. Es wurde insgesamt gezeigt, daß sich ein Zeitpfeil auf der fundamentalen Ebene mittels des Brüsseler Gel'fand-Tripels zwar implementieren läßt, daß es jedoch keine zwingenden Gründe dafür gibt und daß keinesfalls von einer *Herleitung* des Zeitpfeils gesprochen werden kann.

Literaturverzeichnis

- [1] I. Antoniou and I. Prigogine. Intrinsic irreversibility and integrability of dynamics. *Physica A*, 192:443–464, 1993.
- [2] I. Antoniou and S. Tasaki. Generalized spectral decomposition of mixing dynamical systems. *Int. J. of Qu. Ch.*, 45:2718, 1993.
- [3] A. Bohm, H.-D. Doebner, and P. Kielanowski, editors. *Irreversibility and Causality*. Springer, 1998.
- [4] A. Bohm and M. Gadella. *Dirac Kets, Gamow Vectors and Gel'fand Triplets*. Springer, 1989.
- [5] M. Capek. *The Philosophical Impact of Contemporary Physics*. D. van Nostrand, Princeton, New Jersey, 1961.
- [6] H.-D. Doebner, V. K. Dobrev, and P. Nattermann, editors. *Nonlinear and Irreversible Quantum Systems*. World Scientific, 1995.
- [7] P. Duren. *Theory of H^p spaces*. Academic Press, 1970.
- [8] K. Friedrichs. On the perturbation of continuous spectra. *Commun. Pure Appl. Math.*, 1:361–406, 1948.
- [9] M. Gadella. *J. Math. Phys.*, 24:1462, 1983.
- [10] D. Giulini, E. Joos, C. Kiefer, I.-O. Stamatescu, and H.-D. Zeh. *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*. Springer, 1996.
- [11] T. Filk H. Römer. *Statistische Mechanik*. VCH, 1994.
- [12] B. Holstein. *Topics in advanced quantum mechanics*. Addison-Wesley, 1992.
- [13] E. Joos and H.-D. Zeh. The emergence of classical properties through interaction with the environment. *Z. Phys.*, 95:223, 1985.
- [14] L. Landau and E. Lifschitz. *Statistische Physik*, volume 5. Akademie-Verlag Berlin, 1971.
- [15] A. Likhoded and G. Pronko. Possible origin of extra states in particle physics. *Int. J. of Th. Phys.*, 36(11):2335, 1997.
- [16] W. Louisell. *Quantum Statistical Properties of Radiation*. Wiley, 1990.
- [17] R. Penrose. *Computerdenken*. Spektrum, 1991.

- [18] T. Petrosky, I. Prigogine, and S. Tasaki. Quantum theory of non-integrable systems. *Physica A*, 173:175–242, 1991.
- [19] H. Poincaré. *Les Méthodes Nouvelles de la Mécanique Celeste*, volume 1. Dover, New York, 1957 (orig. 1892).
- [20] P. Résibois. *Physica*, 27:721, 1963.
- [21] W. Rudin. *Functional Analysis*. McGraw-Hill, 1991,1973.
- [22] M. Scully and M. Suhail Zubairy. *Quantum Optics*. Cambridge University Press, 1997.
- [23] L. Sklar. *Philosophy of Physics*. Oxford University Press, 1992.
- [24] E. Sudarshan, C. Chiu, and V. Gorini. Decaying states as complex energy eigenvectors in generalized quantum mechanics. *Phys. Rev. D*, 18:2914–2929, 1978.
- [25] C. F. von Weizsäcker. *Aufbau der Physik*. dtv wissenschaft, 1985.
- [26] V. Weisskopf and E. Wigner. *Berechnung der natürlichen Linienbreite auf Grund der Diracschen Lichttheorie*, volume 15. *Z. Phys.*, 1930.
- [27] H.-D. Zeh. *The Physical Basis of the Direction of Time*. Springer, 1992.
- [28] R. Zwanzig. *Lectures in Theoretical Physics*, volume 3. Wiley, New York, 1960.

Danksagung

Vor allem möchte ich mich bei Herrn PD. Dr. Francesco Petruccione und Herrn PD. Dr. Heinz-Peter Breuer sehr herzlich bedanken, die mich bei dieser interessanten Aufgabenstellung hervorragend betreut haben und die durch viele anregende Diskussionen sehr zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Herrn Prof. Dr. Honerkamp danke ich für die Aufnahme in seine Arbeitsgruppe.

Sehr herzlich bedanke ich mich bei Herrn PD. Dr. Martin Bordemann, der mir in vielen speziellen Fragen wichtige Anregungen gab.

Den Mitarbeitern der Abteilung danke ich für das sehr angenehme Arbeitsklima und die Unterstützung.

Herrn Thorsten Müller danke ich besonders für das fachlich kompetente Korrekturlesen.

Meine Freundin Sonja sei umarmt, daß sie mich so liebevoll unterstützt und diese Arbeit in Bezug auf Formulierungen korrekturgelesen hat.

Nicht zuletzt bedanke ich mich bei meinen Eltern, die mir dieses Studium ermöglicht und mir viel liebevollen Rückhalt gegeben haben.

Ich versichere, daß ich diese Arbeit selbständig verfaßt und ausschließlich die angegebene Literatur verwendet habe.