Kapitel 1

Grundzüge der Quantenstruktur

1.1 Moderne Physik ist Quantenphysik

Die moderne Physik beschreibt alle materiellen Objekte als Systeme von Elementarteilchen verschiedener Art. Die wichtigsten Elementarteilchen sind Elektron, Proton, Neutron (Elektromaterie) und das Photon (Fotomaterie). Das Photon ist das Elementarteilchen der Fotomaterie, die in der klassischen Physik völlig unatomistisch beschrieben wird (nichtrelativistische Maxwell - Hertzsche bzw. relativistische Einstein - Minkowskische Elektrodynamik).

Das Photon wurde von Einstein 1905 als Lichtquant (ein neuartiges Teilchenkonzept) in die moderne Physik eingeführt, um die klassisch unerklärbaren Sachverhalte beim Photoeffekt verständlich zu machen: Der klassischen Beschreibung der Fotomaterie durch eine fastebene Welle (charakterisiert durch κ und Wellenzahlvektor $\vec{k}$) ordnete er Züge eines einsteinischen Massenpunktes (charakterisiert durch m und Impuls $\vec{p}$) zu durch die Beziehung $\boxed{\vec{p} = \hbar\vec{k}}$

Aus der Dispersionsrelation für Fotowellen $\omega(\vec{k}) = c\sqrt{(\vec{k}^2 + \kappa^2)}$ und der mechanischen Relation $E(\vec{p}) = c\sqrt{(\vec{p}^2 + m^2c^2)}$ folgt dann die Beziehung $E = \hbar\omega$ (für die Fotomaterie wird $\kappa = 0$ angenommen, die Masse des Photons ist daher 0).

Damit ist die Lenardsche Beziehung für den Photoeffekt $\frac{mv^2}{2} = \hbar\omega - A$ einfach als Folge des Energieerhatungssatzes beim Ablöseprozess des Elektrons durch ein Photon zu verstehen.

Die Hypothese, daß Licht in all seinen Erscheinungsformen als ein System von Photonen beschrieben werden kann, hat sich bis heute vielfach bewährt. Als Beispiele seien noch der Compton-Effekt und die Hohlraumstrahlung genannt.

Hohlraumstrahlung ist ein Photonengas in thermodynamischem Gleichgewicht bei der Temperatur T. Zur Erklärung der dabei auftretenden Sachverhalte ist neben dem Konzept **Lichtquant** auch noch das **Bose-Einstein Prinzip** (1924) erforderlich, welches eine grundlegende Aussage über die möglichen Zustände eines Vielphotonensystems macht. (Die ursprüngliche "Ableitung" der Formel für die spektrale Intensitätsverteilung der

Hohlraumstrahlung durch Planck ist heute nicht mehr logisch nachvollziehbar, sie ist als zufälliger Fund eines Goldkorns einzustufen.)

Photonen sind real existierende Elementarteilchen, sie sind aber nicht demokritisch, dh. sie sind erzeugbar (Lichtemission) und vernichtbar (Lichtabsorption). Sie können also grundsätzlich nicht mit einer mechanistischen Theorie (unveränderliche Teilchenzahl im System) beschrieben werden. Die heute akzeptierte Beschreibung der Photonen geschieht im Rahmen der Quantenfeldtheorie (Quantenelektrodynamik QED), auf die hier nicht näher eingegangen werden kann.

Anders steht es mit den Teilchen Elektron, Proton, Neutron; diese sind zwar auch erzeugbar und vernichtbar, man kann aber weite Erfahrungsbereiche gut beschreiben, wenn man von diesen, erst bei hohen Energien möglichen Erscheinungen, absieht. Tut man dies, so ist eine Beschreibung als demokritische Teilchen im Rahmen einer mechanistischen Theorie, der **Quantenmechanik** möglich.

Die Quantenmechanik ist eine "Neue Mechanik", die sehr erfolgreich die Eigenschaften von Atomen, Molekülen, Festkörpern, Gasen, Flüssigkeiten u.a.m. beschreibt. Diese Objekte werden von der Quantenmechanik als **Systeme von Punktquanten mit immateriellen Wechselwirkungskräften** beschrieben. Mit dem Wort Punktquant bezeichnen wir das neue mathematische Konzept (das an die Stelle des Konzeptes Massenpunkt tritt), das zur Beschreibung der real existierenden Teilchen Elektron, Proton, etc. dient.

Es gilt also zunächst das Konzept Punktquant zu erarbeiten. Anschließend ist zu klären, wie man Systeme von Punktquanten beschreibt. Das einfachste quantenmechanische System ist das Wasserstoffatom, das aus 1 Proton + 1 Elektron besteht, die durch die immaterielle Coulombkraft zusammengehalten werden. Falls in einem System mehrere Elektronen vorhanden sind tritt ein weiteres fundamentales Naturgesetz in Aktion, das **Pauli-Prinzip**. Dieses Prinzip ist der Grund für die Schalenstruktur der Atomhüllen; (es gilt auch für Protonen bzw. Neutronen und erklärt die Schalenstruktur der Atomkerne). Das Pauli-Prinzip spielt auch eine wesentliche Rolle bei Elektronengasen, den Leitungselektronen in Festkörpern u.a.m.

Bevor wir uns der Erarbeitung des Konzeptes Punktquant zuwenden sei hervorgehoben, daß dabei 4 wesentlich neue Züge auftreten:

a) **unaufhebbare Unbestimmtheiten** (Indeterminismus, Probabilistik)
b) Probabilistik auf **komplementären Ereignismengen**
c) **Interferenzerscheinungen** (Teilchen zeigen wellenartige Züge)
d) **Quantensprünge** (kausal unvorhersagbare Ereignisse)

Der letzte Punkt ist besonders eigenartig und wird als unbefriedigende Unvollständigkeit der Quantenmechanik angesehen (Einstein, Schrödinger, Bell). Die Wahrscheinlichkeitsmaße werden von den wirkenden Kräften in ihrer zeitlichen Entwicklung gesteuert, und diese Zeitentwicklung ist völlig kausal; aber die aktualen Einzelereignisse zur Zeit t treten in prinzipiell unvorhersagbarer Weise auf, das Ereignis ist ein Quantensprung. Allerdings gehorcht die statistische Häufigkeit der Einzelereignisse zur Zeit t genau den

Wahrscheinlichkeiten, die der Zustand des Systems zur Zeit t bestimmt. Da der Zustand eines Systems zur Zeit t durch die Kunst des Experimentators nach Wunsch hergestellt werden kann (Kontrolle von Quantensystemen), sind die aktual auftretenden Ereignisse im dadurch bestimmten statistischen Rahmen manipulierbar.

Probabilistisch ist auch die klassische statistische Mechanik, dies hat die Physiker aber nicht beunruhigt, da die dabei auftretenden Unbestimmtheiten prinzipiell behebbar sind (durch Vollständige Vermessung des Systems d.h. Präparation eines reinen Zustandes). Im Prinzip ist also alles determiniert, nur unsere begrenzten Experimentiermöglichkeiten führen zu Unbestimmtheiten (Mangel an Kontrolle).

Die Quantenmechanik wurde 1925 von Heisenberg, Born, Jordan und Dirac initiert; dabei bildete die klassische Mechanik hamiltonischer Systeme den Ausgangspunkt. Nach Dirac geht die neue "q-Zahl - Mechanik" aus der hamiltonischen Mechanik hervor, wenn man die Poisson-Klammern durch Kommutatoren ersetzt. Wenn man die theoretische Struktur der Quantenmechanik verstehen will, ist eine gewisse Vertrautheit mit der hamiltonischen Mechanik unumgänglich. Um den probabilistischen Aspekt gleich mitzunehmen gehen wir von der statistischen Mechanik aus.

1.2 Statistische Mechanik

Die Quantenmechanik ist eine probabilistische Theorie für Teilchen und Systeme von Teilchen (auch makroskopische). In dieser Hinsicht ist sie der klassischen statistischen Mechanik analog. Wenn man den Wahrscheinlichkeitsmaßen $W(t,x,p)$ der statistischen Mechanik die BOHRsche **Quantenbedingung** auferlegt kommt man zu einer mechanistischen Theorie der Elektromaterie, die durch **unaufhebbare Unbestimmtheiten** gekennzeichnet ist. Wir nennen diese indeterministische Theorie **Bohrmechanik**; diese enthält bereits wesentliche Züge der Quantenmechanik.

Wir stellen zunächst die Grundideen der statistischen Mechanik zusammen. Es genügt, das einfachste Beispiel zu wählen, den Fall:

1-Teilchen in 1 Raumdimension.

Voraussetzung für die Möglichkeit einer statistischen Beschreibung eines mechanischen Systems ist die Existenz einer Lagrangefunktion L für das betrachtete System. Aus dieser gewinnt man die **Hamiltonfunktion** $H(t,x,p)$ des Systems und die daraus folgende "kanonische" Formulierung der Bewegungsgleichung auf dem newtonischen Geschwindigkeitenbündel $B(M)$ (wir nennen $B(M)$ auch den Bewegungsraum). Es ist hier nicht der Ort, die kanonische Formulierung der Mechanik im Detail abzuhandeln, dazu sei auf die Mechanikvorlesung verwiesen; wir setzen voraus, daß der Leser genügend Vorkenntnisse hat, um das Folgende zu verstehen.

(t,x,p) sind die Koordinatenfunktionen einer lagrangeischen Karte der Mannigfaltigkeit $B(M)$. Die "Hyperflächen" $t = const.$ definieren eine Blätterung von $B(M)$ in instantane Phasenräume.

Auf $B(M)$ ist eine 1-Form definiert, wir nennen sie die Lagrangeform Λ; der Kartenausdruck lautet:

$$\Lambda = pdx - H(t,x,p)dt \tag{1.1}$$

Das Differential $d\Lambda =: \Omega$ ist eine exakte 2-Form auf $B(M)$ (dies ist die eindeutig bestimmte mathematische Struktur auf $B(M)$, die die Dynamik des mechanischen Systems enthält); wir nennen Ω die Souriauform. Der Kartenausdruck lautet:

$$\Omega = dp \wedge dx + H_{|x} dt \wedge dx + H_{|p} dt \wedge dp \tag{1.2}$$

Vermöge Ω und der Zeitform $Z = dt$ ist eindeutig ein Vektorfeld b auf $B(M)$ definiert durch: $b \lrcorner \Omega = 0, \quad Z(b) = 1;$ wir nennen b das Bewegungsfeld. Der Kartenausdruck lautet:

$$b = \partial_t + H_{|p}\partial_x - H_{|x}\partial_p \tag{1.3}$$

Die Integralkurve des Bewegungsvektorfeldes b durch den gewählten Anfangspunkt liefert die die Lösung der Bewegungsgleichnung.

Die **statistische Mechanik** beschreibt eine Gesamtheit (ein Ensemble von stets gleich präparierten 1-Teilchen Systemen) durch eine zeitlich kontinuierliche Folge von **Wahrscheinlichkeitsmaßen** auf den instantanen Phasenräumen:

$$W(t,x,p) \equiv W_t(x,p) \qquad \text{wobei} \quad W_t \geq 0, \quad \int dp \wedge dx W_t = 1 \tag{1.4}$$

$dp \wedge dx$ ist das LIOUVILLEsche Maß auf den Phasenräumen; es ergibt sich als Einschränkung der Souriauform auf die Hyperflächen $t = const.$

Wir nennen W_t den **Zustand des Systems zur Zeit** t.

Die Zeitentwicklung (Dynamik) des Systems ist kausal bestimmt durch seine Hamiltonfunktion. Sei $H(t,x,p)$ die Hamiltonfunktion des Systems; dann lautet die Gleichung für die Zeitentwicklung der Zustände W_t **Liouville-Gleichung**:

$$\frac{\partial}{\partial t}W + \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial W}{\partial x} - \frac{\partial H}{\partial x}\frac{\partial W}{\partial p} = 0 \qquad \text{kurz:} \quad \frac{\partial}{\partial t}W = -\{H, W\} \tag{1.5}$$

Aus einem gegebenen Anfangszustand W_0 folgt daraus eindeutig der Zustand W_t für alle Zeiten t (Kausalität).

Die Liouville-Gleichung besagt, daß die Funktion $W(t,x,p)$ konstant ist längs der Integralkurven des Bewegungsvektorfeldes b d.h. $b[W] = 0$.

Aus der Eigenschaft $d\Omega = 0$ folgt für jede 2-Form $W.\Omega$, bei der W der Liouville-Gleichung genügt der **Satz von Liouville**: $d(W.\Omega) = 0$

Daraus folgt, daß das Integral $\int dp \wedge dx W_t$ nicht von der Zeit abhängt. Hier sieht man, daß die Eigenschaft eines mechanischen Systems, eine exakte Souriauform zu besitzen, die Voraussetzung für die statistische Mechanik bildet.

Observablen

Eine Observable des Systems wird beschrieben durch eine Funktion $A(t,x,p)$ auf $B(M)$. Alle Observablen können aus den fundamentalen Observablen

$X(t,x,p) = x$ (Ortsobservable) und $P(t,x,p) = p$ (Impulsobservable) und der Zeitvariablen t aufgebaut werden. Als Funktionenalgebra ist die Observablenalgebra kommutativ. (Dies ist einer der wesentlichen Unterschiede zur Quantenmechanik).

Erwartungswerte und Streuungen

Die 2 wichtigsten Konzepte einer probabilistischen Theorie sind: Erwartungswert (Mittelwert) und Streuung (Unbestimmtheit); sie sind folgend definiert:

Der Erwartungswert der Observablen A zur Zeit t beim Zustand W_t ist definiert als

$$\langle A\rangle_{W_t} := \int dp \wedge dx W_t(x,p).A(t,x,p) \tag{1.6}$$

Die **Unbestimmtheit**(Streuung) der Observablen A zur Zeit t beim Zustand W_t ist definiert als

$$(\Delta A)_{W_t} := \sqrt{\langle A^2\rangle_{W_t} - \langle A\rangle^2_{W_t}} \tag{1.7}$$

Über die zeitliche Änderung von Erwartungswerten gibt es ein nützliches Theorem:

Das **Theorem von Ehrenfest**

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle_{W_t} = \langle \frac{\partial A}{\partial t} + \{H,A\}\rangle_{W_t} \tag{1.8}$$

Der Beweis folgt aus den 2 Relationen

$$d(AW\Omega) = W dA \wedge \Omega, \qquad dA \wedge \Omega = b[A]Z \wedge \Omega \tag{1.9}$$

Wir betrachten ein Beispiel: Die Hamiltonfunktion sei von der Form $H(t,x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(t,x)$

Man folgert daraus leicht die folgenden Gleichungen für die Erwartungswerte:

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle_t = \frac{1}{m}\langle p\rangle_t \qquad \frac{d}{dt}\langle p\rangle_t = \langle f\rangle_t \quad \text{wobei} \quad f := -V_{|x}(t,x) \quad \text{(Kraft)} \tag{1.10}$$

Für die Fälle $V(x) = mg(t)x + \frac{m\omega^2}{2}x^2$ erfüllen die Erwartungswerte von Ort und Impuls genau die Bewegungsgleichungen eines Massenpunktes.

Beispiel: Der getriebene Oszillator

Zur Erläuterung sei exemplarisch dieses nützliche Beispiel vorgeführt:

Die Hamiltonfunktion sei $\boxed{H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 - xfcos(\nu t + \alpha)}$

(Der Fall $f = 0$ beschreibt einen ungetriebenen Oszillator, der als Modell für ein in einem Atom gebundenes Elektron dienen kann. Der Fall $\omega = 0, f = 0$ beschreibt ein freies Teilchen).

Als Anfangszustand sei eine beliebige positive, integrable Funktion $F(x,p)$ vorgegeben: $W_0(x,p) = F(x,p)$

Die Lösung der Liouville-Gleichung dazu lautet:

$$W_t(x,p) = F(X(t,x,p), P(t,x,p)), \qquad \text{wobei X,P definiert sind:} \tag{1.11}$$

$$X(t,x,p) = xcos\omega t - \frac{p}{m\omega} sin\omega t - Q(t) \tag{1.12}$$

$$P(t,x,p) = pcos\omega t + xm\omega sin\omega t - K(t) \tag{1.13}$$

mit den Ausdrücken:

$$Q(t) = \frac{f}{m(\omega+\nu)}\{\frac{sin\frac{\nu-\omega}{2}t}{\frac{\nu-\omega}{2}} sin[\frac{\nu-\omega}{2}t + \alpha] - sin(\nu t + \alpha)\frac{sin\omega t}{\omega}\} \tag{1.14}$$

$$K(t) = \frac{f}{(\omega+\nu)}\{\frac{\nu sin\frac{\nu-\omega}{2}t}{\frac{\nu-\omega}{2}} cos[\frac{\nu-\omega}{2}t + \alpha] + cos(\nu t + \alpha) sin\omega t\} \tag{1.15}$$

Zum Beweis zeigt man zunächst, daß die Funktionen $X(t,x,p)$ und $P(t,x,p)$ Lösungen der Liouville-Gleichung sind; daraus schließt man leicht, daß auch $F(X(t,x,p), P(t,x,p))$ eine Lösung ist.

Stationäre Zustände

Wenn eine anziehende zeitunabhängige Kraft das Teilchen an ein Gebiet im Raum bindet, dann existieren Zustände, die sich zeitlich nicht ändern: $\frac{\partial}{\partial t}W = 0$, Der **ungetriebene Oszillator** (Spezialfall $f = 0$) besitzt also auch stationäre Zustände; diese haben die Form $W = F(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2) = F(H)$.

Wir betrachten das Beispiel: ein stationärer Zustand eines Oszillators sei gegeben als $W = N.exp(-\frac{H}{E_0})$, d.h. genauer:

$$W(x,p) = \frac{m\omega}{\sqrt{\pi}\sqrt{2mE_0}}.exp\{-\frac{m\omega^2x^2}{2E_0}\} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{2mE_0}}.exp\{-\frac{p^2}{2mE_0}\} \tag{1.16}$$

Man leitet daraus leicht die Gleichungen ab:

$$\langle\frac{p^2}{2m}\rangle = \frac{E_0}{2}, \qquad \langle\frac{m\omega^2x^2}{2}\rangle = \frac{E_0}{2} \tag{1.17}$$

Für den Erwartunswert der Hamiltonfunktion, die in diesem Beispiel die Observable der Energie des Systems bedeutet, ergibt sich also $\langle H\rangle = E_0$

Ein 3-dimensionales Beispiel

Ein physikalisch wichtiges Beispiel ist die Bewegung eines geladenen Teilchens (Elektron), das durch die Coulombkraft an einen Atomkern gebunden ist, und das ab der Zeit $t = 0$ von einer Lichtwelle in Schwingung versetzt wird. Die Hamiltonfunktion für diesen Fall ist:

$$H(t,x^k,p_i) = \frac{1}{2m}\sum(p_i + \frac{e}{c}A_i)^2 + eA_0 \tag{1.18}$$

Das elektromagnetische Potentialfeld wählen wir in der Form:

$$A_0(t,x^k) = V(1 - \frac{x^2+y^2+z^2}{2R^2}), \qquad \text{statisches Coulombpotential} \quad (1.19)$$

$$A_1(t,x^k) = \tilde{V}\theta(t)sin\nu t, \qquad \text{monofrequente Welle} \quad (1.20)$$

Für Zeiten $t < 0$ liege der stationäre Grundzustand vor:
$W(t,x^k,p_i) = N.exp(-\frac{2H}{3\hbar\omega})$. Mit diesem Anfangswert ist für $t > 0$ die Lösung der Liouville-Gleichung:

$$W_t(x^k,p_i) = N.exp(-\frac{2}{3\hbar\omega}(\frac{1}{2m}P^2 + \frac{m\omega^2}{2}X^2)) \quad (1.21)$$

wobei die 6 Funktionen $X^k(t,x^l,p_i), P_k(t,x^l,p_i)$ die folgenden Lösungen der Liouville-Gleichung sind:

$$X^k(t,x^l,p_i) = x^k cos\omega t - \frac{p_k}{m\omega}sin\omega t - Q^k(t) \quad (1.22)$$

$$P_k(t,x^l,p_i) = p_k cos\omega t + x^k m\omega sin\omega t - K_k(t) \quad (1.23)$$

mit $Q^2(t) = Q^3(t) = K_2(t) = K_3(t) = 0$, und

$$Q^1(t) = \frac{e\tilde{V}}{mc(\omega+\nu)}\{\frac{\nu sin^2(\frac{\nu-\omega}{2}t)}{\frac{\nu-\omega}{2}} + sin\nu t sin\omega t\} \quad (1.24)$$

$$P_1(t) = \frac{e\tilde{V}\omega}{c(\omega+\nu)}\{\frac{\nu sin(\nu-\omega)t}{\nu-\omega} - sin\nu t cos\omega t\} \quad (1.25)$$

Für ein Elekton ist e negativ, $e = -e_0$ (Elementarladung). Die Oszillatorfrequenz ergibt sich als $\omega^2 = \frac{e_0}{m}\frac{V}{R^2}$. Der Spezialfall $\omega = 0$ beschreibt die Bewegung eines ungebundenen Teilchens in der Lichtwelle.

1.3 Bohrmechanik

Die Quantenmechanik ist gekennzeichnet durch einen **unaufhebbaren intrinsischen Indeterminismus**, der quantitativ bestimmt ist durch die PLANCK**sche Konstante h**. Auch in die statistische Mechanik läßt sich eine analoge Unbestimmtheit einbauen: durch die Forderung, daß nicht mehr alle Wahrscheinlichkeitsmaße zuläßig sind, sondern nur solche, die der BOHR **schen Quantenbedingung** genügen:

$$\langle W\rangle := \int dp \wedge dx W \cdot W \leq \frac{1}{h} \quad (1.26)$$

Wir nennen diese Bedingung das BOHRsche Quantenpostulat, weil heute klar ist, das dies die logische Bedeutung der Quantenbedingungen ist, die BOHR

1913 der Mechanik hinzufügte .

Man sieht sofort, daß damit u. a. delta-Maße $W_0 = \delta(x - x_0)\delta(p - p_0)$ ausgeschlossen sind, Ort und Impuls also niemals gleichzeitig scharf bestimmt sein können.

Das auf diese Weise definierte mathematische Konzept zur Beschreibung 1 Teilchens nennen wir **bohrischen Massenpunkt** (m, h, W_t).

Insbesondere nennen wir die extremalen Zustände, welche die Bedingung $\langle h.W \rangle = 1$ erfüllen **reine Zustände**, die übrigen nennen wir gemischte Zustände. Die maximal mögliche gleichzeitige Bestimmtheit von Ort und Impuls erreicht man in reinen Zuständen.

Aus der Gleichung $d(W^2\Omega) = 0$ folgt unmittelbar der Satz:

Ein reiner Zustand bleibt bei seiner zeitlichen Entwicklung rein.

Aufgabe 1) Zeigen Sie, daß die Zustände

$$W(x,p) = \frac{1}{\sqrt{\pi}a}.exp\{-\frac{(x-x_0)^2}{a^2}\} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}b}.exp\{-\frac{(p-p_0)^2}{b^2}\} \tag{1.27}$$

rein sind, wenn zwischen der Konstante a und der Konstante b die Beziehung besteht: $\boxed{a \cdot b = \hbar}$.

Aus (1.11) folgt also: für einen reinen Zustand ist $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ Dies ist auch in der Quantenmechanik die Grundzustandsenergie eines Oszillators.

Man erkennt hier, wie die Forderung eines reinen stationären Zustandes zu diskreten Energiewerten des Systems führt. Auf diese Weise hat BOHR 1913 die stationären Zustände der Atome zu erklären versucht.

Freies Teilchen als bohrischer Massenpunkt

Aus (1.9) folgen für ein freies Teilchen $(f = 0, \omega = 0)$:

$X(t,x,p) = x - \frac{p}{m}t, \quad P(t,x,p) = p.$ Daraus ergibt sich als eine Lösung der Liouville-Gleichung die Folge der Zustände:

$$W_t(x,p) = \frac{1}{\pi ab}exp\{-\frac{(x - x_0 - \frac{p}{m}t)^2}{a^2}\} \cdot exp\{-\frac{p-p_0)^2}{b^2}\} \tag{1.28}$$

Aufgabe 2) Berechnen Sie für diese Zustände eines kräftefreien Teilchens:

a) die **Ortswahrscheinlichkeitsdichte**

$$\rho(t,x) := \int dp W_t(x,p) = \frac{1}{a(t)\sqrt{\pi}}.exp\{-(x - x_0 - \frac{p_0}{m}t)^2/a^2(t)\} \tag{1.29}$$

wobei $a(t) := a\sqrt{1 + \frac{t^2}{\tau^2}}, \quad \tau := \frac{m}{\hbar}a^2$ (Zerfließdauer). Die Ortsunbestimmtheit wird also für große Zeiten beliebig groß.

(Beachten Sie: $\rho(t,x)$ ist keine Funktion auf dem Geschwindigkeitenbündel !)

b) die **Impulswahrscheinlichkeitsdichte**

$$\tilde{\rho}(t,p) := \int dx W_t(x,p) = \frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}}.exp - [(p-p_0)^2\frac{a^2}{\hbar^2}] \tag{1.30}$$

die Impulsunbestimmtheit hängt also nicht von der Zeit ab. (Impulserhaltung!) ($\tilde{\rho}(t,p)$ ist keine Funktion auf dem Geschwindigkeitenbündel !)

c) die **Erwartungswerte für den Ort**

$$\langle x\rangle_t = \int dp \wedge dx W_t(x,p) \cdot x = x_0 + \frac{p_0}{m}t \qquad \text{(klassische Bahn)} \tag{1.31}$$

d) die **Erwartungswerte für den Impuls**

$$\langle p\rangle_t = \int dp \wedge dx W_t(x,p) \cdot p = p_0 \qquad \text{(Impulserhaltung)} \tag{1.32}$$

e) die **Unbestimmtheiten von Ort und Impuls**

$$\langle \Delta x\rangle_t = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot a(t), \qquad \langle \Delta p\rangle_t = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\hbar}{a} \tag{1.33}$$

Da $a(t) \geq a$ liest man daraus die **Unbestimmtheitsrelation** ab:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$$

Kohärente Zustände eines Oszillators

Bei nichtstationären Zuständen ändert sich die Unbestimmtheit des Ortes (u. des Impulses) im Laufe der Zeit. Für ungebundene Teilchen nimmt sie schließlich unbegrenzt zu. Für gebundene Zustände oszilliert sie quasiperiodisch. Im speziellen Fall eines harmonischen Oszillators oszilliert sie im allgemeinen periodisch mit der Oszillatorfrequenz; es gibt in diesem Fall aber auch spezielle Zustände (kohärente Zustände), bei denen sie konstant bleibt:

Verifizieren Sie: Für einen harmonischen Oszillator liefern die Anfangszustände

$$W_0(x,p) = N.exp\{-\frac{(x-x_0)^2}{a^2}\}.exp\{-\frac{(p-p_0)^2}{b^2}\} \tag{1.34}$$

mit dem speziellen Wert $b = m\omega a$ die Zustände

$$W_t(x,p) = N.exp\{-\frac{(x-q(t))^2}{a^2}\}.exp\{-\frac{(p-m\dot{q}(t))^2}{b^2}\}, \qquad \text{wobei} \tag{1.35}$$

$$q(t) = x_0 cos(\omega t) + \frac{p_0}{m\omega} sin(\omega t) \tag{1.36}$$

Man sieht sofort, daß die Ortsunbestimmtheit und die Impulsunbestimmtheit zu allen Zeiten denselben Wert $\Delta x = a/\sqrt{2}$ bzw. $\Delta p = b/\sqrt{2}$ besitzten. Im Falle daß der Zustand auch rein ist ($ab = \hbar$), gilt also zu allen Zeiten $\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$.

Für die Berechnung benützt man die Formel:

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int dx exp\{-\frac{x^2}{a^2}\}.exp\{ikx\} = a.exp\{-\frac{k^2a^2}{4}\} \tag{1.37}$$

Setzt man $k = 0$ und differenziert man nach a ergibt sich daraus die Formel

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int dx.x^2 exp\{-\frac{x^2}{a^2}\} = \frac{1}{2}a^3 \tag{1.38}$$

Wenn man ψ als Beschreibung eines Ensembles auffaßt, ergeben sich Aussagen, die denen der statistischen Mechanik entsprechen und gleichzeitig der Quantenstruktur der Realität Rechnung tragen. EINSTEIN.

Kapitel 2

Die Logik der Quantenmechanik

2.1 Die Grundzüge der Quantenmechanik

Der Quantenmechanik liegt dieselbe geometrische Raum-Zeit-Struktur zu Grunde wie der klassischen Mechanik: der newtonische Zaum (M, Z, h, E, Δ). Die Observablen werden i. A. relativ zu einem Inertialsystem bestimmt.

Die Quantenmechanik beschreibt

Elektromaterie als Systeme von unvernichtbaren, unerzeugbaren, ausdehnungslosen Teilchen.

Es liegt also ein demokritisches Materie-Konzept zu Grunde, dies rechtfertigt die Bezeichnung Quanten-MECHANIK.

Das mathematische Konzept der quantenmechanischen Beschreibung eines Teilchens (designatum) nennen wir **Punktquant** (designans); dieses tritt an die Stelle des Konzeptes *Massenpunkt* der klassischen Mechanik.

Die Quantenmechanik ist eine **probabilistische Theorie**, sie kann also i.A. keine bestimmte Aussage machen über das aktuale Auftreten eines Einzelereignisses (das Ergebnis einer Einzelmessung), und zwar auch dann nicht, wenn der Zustand des Systems maximal präpariert ist. Wegen dieser unaufhebbaren **Unbestimmtheit** nennt man diese Theorie indeterministisch. Der instantane Zustand (zur Zeit t) eines Quantensystems in maximaler Präparation wird durch einen **Zustandsvektor** ψ_t beschrieben. Der Name Zustandsvektor kommt daher, daß ψ_t mathematisch ein Element jenes HILBERTschen Vektorraumes $\mathcal{H}$ ist, der dem System zugeordnet ist. Die physikalische Bedeutung von ψ_t ist die eines **Wahrscheinlichkeitenpotentials**, d.h. aus ψ_t lassen sich die quantitativen Aussagen über die

Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten der gemeinsamen Meßwerte eines jeden kompletten Satzes von Observablen zur Zeit t

ableiten.

Die Prüfung all dieser Vorhersagen über das Verhalten eines Quantensystems beim Zustand ψ_t geschieht in der Weise, daß der Experimentator in der Lage ist, den Zustand ψ_t beliebig oft zu präparieren, um daran die nötigen Messungen (Registrierung der auftretenden Ereignisse) vorzunehmen. Die bei diesen Meßreihen auftretenden Häufigkeiten der **gemeinsamen Meßwerte**

eines KOS (kompletten Observablensatzes) müssen mit den vorhergesagten Wahrscheinlichkeiten übereinstimmen.

Ein wesentlicher Unterschied zwischen Quantenmechanik und Bohrmechanik ist der, daß in der Quantenmechanik verschiedene, miteinander **inkompatible Ereignismengen** existieren: Der KOS_1 definiert eine Ereignismenge E_1 und ψ_t liefert das Wahrscheinlichkeitsmaß auf der Menge E_1; der KOS_2 definiert eine Ereignismenge E_2, ψ_t liefert auch das Wahrscheinlichkeitsmaß auf der Menge E_2 u.s.w. Der Zustandsvektor ψ_t liefert also auf allen Ereignismengen E_n das zugehörige Wahrscheinlichkeitsmaß , daher nennen wir ψ_t Wahrscheinlichkeitenpotential.

Der zweite wesentliche Unterschied zwischen der Quantenmechanik und der Bohrmechanik ist der, daß in der Quantenmechanik die **Superposition von 2 Zustandsvektoren** $\alpha\psi_1 + \beta\psi_2$ wieder einen möglichen Zustandsvektor ergibt; dies führt zu **Interferenzerscheinungen** analog zu denen, die aus den klassischen Wellentheorien (Wasserwellen, Akustik, Licht) bekannt sind. Deswegen sagt man oft, daß "Quanten auch Wellen seien"(Teilchen-Welle Dualismus).

Wir geben hier zunächst die vollständige Formulierung der Quantenmechanik für die einfachsten Quantensysteme, die 1-Teilchen-Systeme.

2.2 1-Teilchen-Systeme: (m, e, A)

Die **Masse** m, und die elektrische **Ladung** e definieren den **Charakter** des Teilchens (Elektron, Proton,...); das **Lorentzfeld** $A = A_\nu(x^\rho)dx^\nu$ beschreibt die **Einwirkung** (äußere elektromagnetische Kraft) auf das Teilchen.

Man geht aus von der klassischen Beschreibung des Teilchens in hamiltonischer Form, wobei eine galileische Karte (Inertialsystem) (t, x^k), $(k = 1, 2, 3)$ zu Grunde zu legen ist. Mit p_k seien die 3 kanonisch konjugierten Impulskoordinatenfunktionen bezeichnet, die von der Standard-Lagrangefunktion auf dem Bewegungsraum $B(M)$ (newtonisches Geschwindigkeitenbündel) induziert werden.

In dieser Karte lautet die **Hamiltonfunktion**

$$H(x^k, p_l, t) = \frac{1}{2m}\sum_k (p_k + \frac{e}{c}A_k(x^l, t))^2 + eA_0(x^l, t) \tag{2.1}$$

Zur Beachtung:

1) Was die p_k physikalisch bedeuten, ergibt sich aus der Beziehung

$$v^k = \frac{\partial H}{\partial p_k} = \frac{1}{m}(p_k + \frac{e}{c}A_k(x^l, t)) \quad d.h. \quad p_k = mv^k - \frac{e}{c}A_k(x^l, t)$$

dabei ist v^k die Geschwindigkeitskoordinatenfunktion. Da eine bestimmte elektromagnetische Einwirkung durch verschiedene Potentialfelder A beschrieben werden kann (mechanische Umeichungen) ist die konkrete Bedeutung der p_k von der Eichung abhängig.

2) Die vorgegebenen Funktionen $A_\nu(x^k, t)$ beschreiben die Einwirkung eines äußeren Kraftfeldes, also eines immateriellen Agens im Sinne von

NEWTONs Kraftbegriff. Das ist nicht die Beschreibung der Wechselwirkung mit der Fotomaterie im Sinne FARADAYs. Photomaterie und Elektromaterie in Wechselwirkung können nur durch eine wesentlich erweiterte Theorie, die **Quanten-Elektro-Photo-Dynamik** (Quantenelektrodynamik) beschrieben werden.

Der **Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik** erfolgt nun durch eine wohldefinierte Prozedur, die wir in 3 Axiomen formulieren:

Axiom 1

Dem Quantensystem ist der **Hilbertraum** $\mathcal{H} \doteq L^2(\mathbb{R}^3)$ zugeordnet;
den 3 galileischen Orts-Observablen sind 3 selbstadjungierte Operatoren X^k, die **Orts-Operatoren** in $\mathcal{H}$ zugeordnet;
den 3 konjugierten Impulsobservablen sind 3 selbstadjungierte Operatoren P_k, die **Impuls-Operatoren** in $\mathcal{H}$ zugeordnet.
Diese 6 fundamentalen Operatoren des Systems sind charakterisiert durch die, von BORN und JORDAN 1925 entdeckten
kanonischen Vertauschungsrelationen: (CVR)

$$[X^k, P_l] = i\hbar\delta^k_l.I, \qquad [X^k, X^l] = 0, \qquad [P_k, P_l] = 0 \tag{2.2}$$

Jeder sonstigen Observablen $\mathcal{A}$ ist ein selbstadjungierter Operator $A(X^k, P_l, t)$ in $\mathcal{H}$ zugeordnet, der aus den 6 fundamentalen Operatoren und t aufgebaut ist, wobei die Zeit t nur als Parameter mal Einheitsoperator auftritt.
Die möglichen Meßwerte einer Observablen sind die **Spektralwerte** des zugeordneten selbstadjungierten Operators.

Bemerkung:

Den Observablen eines Quantensystems sind also nichtkommutierende Größen zugeordnet; in der Mathematik treten z.B. Matrizen als solche Größen auf, daher nannte man die "Neue Mechanik" in der Anfangszeit "Matrizenmechanik". DIRAC nannte solche Größen "q-numbers" (queer numbers oder quantum numbers) und nannte die kommutativen Größen der klassischen Mechanik "c-numbers"(classical numbers). Man kann leicht zeigen, daß die CVR nicht durch endlichdimensionale Matrizen dargestellt werden können, die Hilberträume physikalischer Systeme sind also immer ∞-dimensional. Die mathematische Theorie ist daher etwas aufwendig (Definitionsbereich, kontinuierliches Spektrum, Konvergenzfragen).

Dem Quantensystem ist ein Hilbert-Raum $\mathcal{H}$ zugeordnet, in dem die Orts- und Impuls-Operatoren eine irreduzible Darstellung haben. Man kann zeigen, daß die Darstellung der CVR bis auf Äquivalenz eindeutig ist. Als konkrete Darstellung kann man den Hilbert-Raum $L^2(\mathbb{R}^3)$ benutzen, die Vektoren ψ, φ, ... $\in \mathcal{H}$ sind also quadratintegrable Funktionen ("Wellenfunktionen") $\psi(\vec{x})$, $\varphi(\vec{x})$,... ; das Skalarprodukt (φ, ψ) ist definiert als

$$(\varphi, \psi) := \int d^3x \; \bar{\varphi}(\vec{x})\psi(\vec{x}) \tag{2.3}$$

Die Wirkung der Orts- und Impuls-Operatoren lautet dann:

$$(X^k\,\Psi)(\vec{x}) = x^k\,\Psi(\vec{x}), \qquad (P_k\,\Psi)(\vec{x}) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x^k}\Psi(\vec{x}) \tag{2.4}$$

Daraus ergibt sich die Wirkung aller anderen Operatoren.

Es ist wohl sofort klar, wie die folgenden, abstrakt geschriebenen, Operatoren konkret auf den "Wellenfunktionen" $\Psi(\vec{x})$ operieren:

$$L^1 := X^2P_3 - X^3P_2, \quad cycl. \qquad \text{kurz} \quad \vec{L} = \vec{X} \times \vec{P} \tag{2.5}$$

das sind die **Drehimpuls-Operatoren** des Systems (Bahndrehimpuls bez. 0).

$$G^k(X^l, P_j, t) := mX^k - tP_k \tag{2.6}$$

das sind die **Operatoren des Schwerpunktes** des Systems.

$$H(X^k, P_l, t) = \frac{1}{2m}\sum_k (P_k + \frac{e}{c}A_k(X^l, t))^2 + eA_0(X^l, t) \tag{2.7}$$

ist der **Hamilton-Operator** des Systems. Dieser ist von besonderer Wichtigkeit, er bestimmt die **Quantendynamik**, d.h. die Zeitentwicklung aller Auftrittswahrscheinlichkeiten des Quantensystems.

Axiom 2 (gemeinsame Meßwahrscheinlichkeiten)

Der instantane **Zustand** (zum Zeitpunkt t) einer Gesamtheit von (identisch präparierten) 1-Teilchen-Systemen wird mathematisch beschrieben durch den **Zustandsoperator** (Dichtematrix) W_t.
Beim Zustand W_t ist die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines bestimmten Ereignisses, charakterisiert durch gemeinsame "Meßwerte" im Spektralintervall $\Delta_{a,b,..}$ eines **kompletten Observablen Satzes** (KOS) gegeben als:

$$w_{W_t}(\Delta_{a,b,..}) = Sp\; W_t\; P_{\Delta_{a,b,...}} \tag{2.8}$$

dabei ist $P_{\Delta_{a,b,..}}$ der Projektionsoperator auf das gewählte Spektralintervall des KOS.

W_t ist ein positiver Operator in $\mathcal{H}$ mit den Eigenschaften:

$$W_t^\dagger = W_t, \qquad W_t^2 \le W_t, \qquad Sp\; W_t = 1 \tag{2.9}$$

Falls $W_t^2 = W_t$, dann ist W_t ein eindimensionaler Projektor, es gibt also einen Vektor $\Psi_t \in \mathcal{H}$, mit $W_t = P_{\Psi_t}$; ein solcher Zusand heißt ein **reiner Zustand**, er entspricht einer maximalen Präparation der Gesamtheit.

Falls $W_t^2 < W_t$, dann liegt ein **gemischter Zustand** vor; ein solcher beschreibt Mittelwerte über mehrere (auch ∞ viele) reine Zustände. Eine solche Gesamtheit ist nicht maximal präpariert,sie kann durch Entmischung in reine zerlegt werden.

Eine Gesamtheit von Quantensystemen ist charakterisiert durch eine genau spezifizierte Präpariermethode (Laborvorschrift), nach

der beliebig viele Einzelsysteme hergestellt werden können. Außerdem muß durch Kontrollexperimente, *d.h.* durch Aufnahme entsprechender Meß-Statistiken für alle möglichen kompletten Observablensätze, sichergestellt sein, daß diese Statistiken sich stets reproduzieren. Zwei verschiedene Präpariermethoden liefern dieselbe Gesamtheit, wenn alle Meß-Statistiken übereinstimmen. Schließlich ist der präparierten Gesamtheit jener Zustandsoperator W_{t_0} zuzuordnen, der alle Meßwahrscheinlichkeiten in Übereinstimmung mit den gemessenen Häufigkeiten liefert.

Einige Beispiele für Ereignismengen (gemeinsame Messung mehrerer Observablen):

1) **Gemeinsame Messung der 3 Impuls-Observablen** $\{P_1, P_2, P_3\}$:

Der Projektionsoperator auf das gemeinsame Spektralintervall ist

$$P_{\Delta^3 p} = \int_{\Delta^3 p} d^3p \; |\vec{p}\rangle \langle\vec{p}| \tag{2.10}$$

wobei $|\vec{p}\rangle$ die uneigentliche Impulsbasis ist, definiert durch die Gleichungen

$$\vec{P} \; |\vec{p}\rangle = \vec{p} \; |\vec{p}\rangle, \qquad \langle\vec{p}'|\vec{p}\rangle = \delta^3(\vec{p}' - \vec{p}) \tag{2.11}$$

Damit ergibt sich für die **gemeinsame Impuls-Meßwahrscheinlichkeit**

$$Sp \; W_t \; P_{\Delta^3 p} = \int_{\Delta^3 p} d^3p \; \langle\vec{p}|W_t|\vec{p}\rangle \tag{2.12}$$

Falls ein reiner Zustand vorliegt: $W_t = P_{\psi_t}$, ergibt sich der Ausdruck

$$Sp \; W_t \; P_{\Delta^3 p} = \int_{\Delta^3 p} d^3p \; |\langle\vec{p}|\psi_t)|^2 \tag{2.13}$$

Das Absolutquadrat des Zustandsvektors in der Impulsdarstellung ist also einfach als Impuls-Wahrscheinlichkeitsdichte zu interpretieren.

2) **Gemeinsame Messung der 3 Observablen** $\{P_1, P_2, X^3\}$

Die uneigentliche Basis zu diesen 3 Operatoren $|p_1, p_2, x^3\rangle$ liefert die entsprechenden Projektionsoperatoren $P_{\Delta_{p_1, p_2, x^3}}$; und die **gemeinsame Meßwahrscheinlichkeit**

$$Sp \; P_{\psi_t} \; P_{\Delta_{p_1, p_2, x^3}} = \int_{\Delta_{p_1, p_2, x^3}} dp_1 \; dp_2 \; dx^3 \; |\langle p_1, p_2, x^3|\psi_t)|^2 \tag{2.14}$$

Zur Klarstellung sei nun noch darauf hingewiesen, daß $\{P_1, X^1, ...\}$ kein KOS ist, *d.h.* die Frage: Mit welcher Wahrscheinlichkeit erhält man gemeinsam einen P_1 -Meßwert im Intervall Δ_{p_1} und einen X^1 -Meßwert im Intervall Δ_{x^1} ? wird von der Quantenmechanik als unzuläßig, unmöglich, sinnlos,... qualifiziert.

X^1, P_1 sind grundsätzlich **nicht gemeinsam bestimmt**. Zwischen den Meß-Statistiken je einer X^1 -, bzw. P_1 - Meßreihe bei einer bestimmten Gesamtheit W besteht die

Unbestimmtheits-Relation

$$(\Delta X^1)_W . (\Delta P_1)_W \geq \frac{\hbar}{2} \tag{2.15}$$

In diesem Sinne ist die Quantentheorie (unaufhebbar) indeterministisch.

Axiom 3 (Quantendynamik)
Wenn eine Gesamtheit zum Zeitpunkt t_0 präpariert vorliegt, also durch einen bestimmten Zustandsoperator W_{t_0} beschrieben ist, und ab dann der dynamischen Entwicklung folgt, dann ändert sich der Zustand kausal nach dem **Bewegungsgesetz**:

$$\frac{d}{dt} W_t = -\frac{i}{\hbar}[H, W_t], \qquad W_t = U_{t,t_0}\ W_{t_0}\ U_{t,t_0}^{-1} \tag{2.16}$$

Dieses liefert zum Anfangszustand W_{t_0} den Zustand W_t zu jeder anderen Zeit t, eindeutig. Ein reiner Anfangszustand bleibt dabei rein.

Für den Zustandsvektor Ψ_t eines reinen Zustands gilt speziell die

Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi_t = H \Psi_t \tag{2.17}$$

die mit dem Anfangsdatum Ψ_{t_0} zu lösen ist. Ist der Anfangszustand eine Superposition $\Psi_{t_0} = \psi + \phi$, dann gilt wegen der Linearität der Schrödingergleichung $\Psi_t = \psi_t + \phi_t$. Dieser Sachverhalt führt zu **Interferenzerscheinungen** beim Auftritt von Ereignissen, die analog sind zu den bekannten Interferenzen in einer klassischen Wellentheorie. (2 Löcherversuch !)

Schrödinger hat 1926 versucht eine klassische Wellentheorie der elektronischen Materie aufzustellen (Wellenmechanik), diese ist aber nicht im Einklang mit der Realität. Seine Wellengleichung und die mit dieser zusammenhängenden mathematischen Methoden hatten aber für die Entwicklung der Quantenmechanik allergrößte Bedeutung.

Die hier gegebene Formulierung der Zeitentwicklung nennt man das SCHRÖDINGER-BILD; dies ist die von BORN 1927 gegebene Interpretation der SCHRÖDINGERschen Wellenfunktion. Später werden wir eine äquivalente Formulierung der Zeitentwicklung eines Quantensystems kennenlernen, das HEISENBERG-BILD.

Die Lösung der Bewegungsgleichung bedeutet die Konstruktion einer Schar unitärer Operatoren U_{t,t_0} , die durch den Hamiltonoperator H erzeugt werden gemäß den Gleichungen

$$i\hbar \frac{d}{dt}\ U_{t,t_0} = H\ U_{t,t_0} \qquad U_{t_0,t_0} = I \tag{2.18}$$

Diese Evolutionsoperatoren sind unitär und genügen den Relationen

$$U_{t_2,t_1}.U_{t_1,t_0} = U_{t_2,t_0}, \qquad U_{t_0,t_1} = U^{-1}_{t_1,t_0} \tag{2.19}$$

Mittels der Operatoren U_{t,t_0} erhält man die Lösung der Bewegungsgleichung in der Form

$$\Psi_t = U_{t,t_0}\ \Psi_{t_0}, \qquad W_t = U_{t,t_0}\ W_{t_0}\ U^{\dagger}_{t,t_0} \tag{2.20}$$

Die Lösung der Gleichung für die Operatoren U_{t,t_0} läßt sich formal in Form der zeitgeordneten Exponentialreihe anschreiben:

$$U_{t,t_0} = \mathcal{T} \exp\{\frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt'\ H(t')\} \qquad \text{(Dyson-Reihe)} \tag{2.21}$$

Falls der Hamiltonoperator H nicht explizite von der Zeit abhängt, ergibt sich

$$U_{t,t_0} = e^{-i(t-t_0)H/\hbar} \tag{2.22}$$

Dies ist eine 1-dimensionale Lie-Gruppe unitärer Operatoren im Hilbertraum.

Das IV. Axiom

Nach dem bisher Gesagten stehen wir vor folgender Situation:

Ein quantenmechanisches System sei zur Zeit $t = 0$ in einem bestimmten Zustand W_0 präpariert worden, danach entwickle es sich unter Einwirkung gegebener immaterieller Kräfte bis zur Zeit $t = t_1$. Während dieser Zeit treten keinerlei Ereignisse auf, zur Zeit t_1 liegt also der eindeutig bestimmte Zustand W_{t_1} vor. Zur Zeit t_1 möge nun ein Ereignis auftreten; dies geschieht entweder, weil das betrachtete System mit einem anderen System in Wechselwirkung tritt (z.B. mit einer Meßapparatur), oder weil innerhalb des Systems "etwas geschieht" (z.B. ein Atomkern stößt ein α-Teilchen aus; oder eine Zelle stirbt ab). Nach dem Ereignis liegt offenbar ein neuer Zustand des Systems vor, der, weil das Ereignis ein Quantensprung war, nicht aus der Zeitentwicklungsgleichung für Zustände berechnet werden kann.

> Die Quantenmechanik sagt nichts darüber aus, was bei einem Quantensprung passiert, gerade das aber würde uns brennend interessieren. E. Schrödinger

Die Antwort auf die Frage: Welcher Zustand liegt unmittelbar nach Eintritt eines bestimmten Ereignisses vor? wird durch das IV. Axiom der Quantenmechanik gegeben (v. Neumann):

> Es liegt ein Zustand vor, der für den dem Ereignis zugeordneten Punkt in der entsprechenden Ereignismenge die Wahrscheinlichkeit 1 liefert.

Die Problematik, die mit den hier aufgeworfenen Fragen zusammenhängt, gilt als das bis heute ungelöste Problem der Quantentheorie (Vervollständigung wird verlangt), es wird in der Literatur als das "Meßproblem" bezeichnet. Vorläufig ist wohl zuzugeben, daß noch nicht alle Probleme gelöst sind.

> "What really bothers me is the measurement problem." I. Cirac

Wir geben nun noch einen kurzen Ausblick auf weitere fundamentale Quantengesetze.

2.3 Elektronen haben einen Spin

Die Erfahrung zeigt, daß ein Elektron neben Ort und Impuls noch 3 weitere fundamentale kinematische Eigenschaften besitzt: die 3 Komponenten des Eigendrehimpulses S^1, S^2, S^3. Diese erfüllen dieselben Vertauschungsrelationen wie die 3 Komponenten des Bahndrehimpulses. Der Betrag des Eigendrehimpulses ist jedoch fixiert ($\frac{\hbar}{2}$); einen solchen Drehimpuls nennt man **Spin**.

Der bisher betrachtete Hilbertraum eines Elektrons muß also vergrößert werden, um Platz zu haben für die Spinvariablen. Der dafür zuständige Funktionenraum besteht aus 2-komponentigen komplexen Wellenfunktionen (Pauli-Spinorfelder).

Mit dem Spin ist ein magnetisches Dipolmoment des Elektrons verbunden (Bohrsches Magneton). Dies führt zu einer Reihe interessanter Phänomene:

Feinstruktur, Zeeman-Effekt, Magnetismus.

2.4 Mehrelektronen-Systeme

Wie sind Quantensysteme mit mehreren Elektronen zu beschreiben?

Die Lösung dieser Aufgabe führte auf ein neues fundamentales Naturgesetz:

das Pauli-Prinzip:

Der Hilbertraum eines n-Elektronen Systems ist das n-fache **alternierende Tensorprodukt** von 1-Elektron Hilberträumen.

Damit erklären sich viele physikalische Eigenschaften: z.B. Schalenaufbau der Atomhüllen, Verhalten von Leitungselektronen in Leitern und Halbleitern, etc.

Im Falle von nicht wechselwirkenden Elektronen, die irgendwie gebunden sind (diskrete Energieniveaus) findet dieses Prinzip einfache Anwendung durch die Formulierung:

Jedes Energieniveau kann nur durch 1 Elektron besetzt sein.

Das Pauliprinzip gilt auch für alle anderen Sorten gleichartiger Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$; z.B. für Protonen, oder für Neutronen.