

**Wir bedürfen mehr des Gesamtüberblicks  
als der Kenntnis der Einzelheiten.**

## Die Vorstufen der Quantentheorie

Vorlesungen von J. Rothleitner

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 (Lenard 1899) verständlich zu machen: Der klassischen Beschreibung der Fotomaterie durch eine flache Ebene Welle (charakterisiert durch  $\kappa$  und Wellenzahlvektor  $\vec{k}$ ) werden Züge eines einsteinischen Massenpunktes (charakterisiert durch Masse  $m$  und Impuls  $\vec{p}$ ) zugeordnet 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  $E(\vec{p}) = c\sqrt{\vec{p}^2 + m^2 c^2}$  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 Energieerhaltungssatzes 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 **Quanten-Fotodynamik** (“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 Konzept (das an die Stelle des Konzeptes Massenpunkt tritt), das zur mathematischen Beschreibung der real existierenden Teilchen Elektron, Proton, etc. dient. Die wesentlichen Charakteristika dieses neuartigen Teilchenkonzeptes sind: a) wellenartige Züge (Interferenz), b) unaufhebbare **Unbestimmtheiten**, die eine fundamental **probabilistische** Beschreibung unumgänglich machen.

Eine Darstellung der Quantenmechanik hat also zunächst das mathematische 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 Prin-

zip 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 Beschreibung des Konzeptes Punktquant zuwenden sei hervorgehoben, daß dabei 4 wesentlich neue Züge auftreten:

- a) **unaufhebbare Unbestimmtheiten** ("Indeterminismus")
- b) **Probabilistik** auf (komplementären) **Ereignismengen**
- c) **Interferenzerscheinungen** ( die Teilchen zeigen wellenartige Züge)
- d) **Quantensprünge** (kausal unvorhersagbare definitive 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 **dynamische Zeitentwicklung** ist völlig kausal; aber die aktualen, definitiven 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  $W_t$  des Systems 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 **Unbekanntheiten** prinzipiell behebbar sind (durch Vollständige Vermessung des Systems d.h. Präparation eines, im Sinne der Theorie reinen Zustandes). Im Prinzip ist also alles determiniert, nur unsere begrenzten Experimentiermöglichkeiten führen zu Unbekanntheiten (Mangel an Kontrolle).

Die Quantenmechanik wurde 1925 von Heisenberg, Born, Jordan und Dirac initiiert; 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 probabilistische Struktur der Quantenmechanik verstehen will, ist zunächst die Vertrautheit mit der hamiltonischen Mechanik

unumgänglich; um den probabilistischen Aspekt verständlich zu machen, gehen wir von der Statistischen Mechanik aus.

## 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 **unaufhebba-re 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 Massenpunkt 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“  $t = \text{const.}$  definieren eine Blätterung von  $B(M)$  in instantane Phasenräume.

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

$$\Lambda = p dx - H(t, x, p) dt \quad (1)$$

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  $\Omega$  die Souriauform. Der Kartenausdruck lautet:

$$\Omega = dp \wedge dx + H_{|x} dt \wedge dx + H_{|p} dt \wedge dp \quad (2)$$

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

Der Kartenausdruck lautet:

$$b = \partial_t + H_{|p} \partial_x - H_{|x} \partial_p \quad (3)$$

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

Die **statistische Mechanik** beschreibt eine bestimmte Gesamtheit, ein bestimmtes **Ensemble** von 1-Teilchen Systemen durch eine zeitlich kontinuierliche Folge von **Wahrscheinlichkeitsmaßen** auf den instantanen Phasenräumen:

$$W(t, x, p) \equiv W_t(x, p) \quad \text{wobei} \quad W_t \geq 0, \quad \int dp \wedge dx W_t = 1 \quad (4)$$

$dp \wedge dx$  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 dynamische Zeitentwicklung des Systems ist kausal bestimmt durch seine Hamiltonfunktion. Sei  $H(t, x, p)$  die Hamiltonfunktion des Systems; dann lautet die Gleichung für die dynamische Zeitentwicklung der Zustände  $W_t$

**Liouville-Gleichung:**

$$\frac{\partial}{\partial t} W + \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial W}{\partial x} - \frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial W}{\partial p} = 0 \quad \text{kurz:} \quad \frac{\partial}{\partial t} W = -\{H, W\} \quad (5)$$

Aus einem gegebenen Anfangszustand  $W_0$  folgt daraus während ereignisloser Perioden eindeutig der Zustand  $W_t$  für alle Zeiten  $t$  (kausale Dynamik).

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  $W \cdot \Omega$ , bei der  $W$  der Liouville-Gleichung genügt, der **Satz von Liouville:**  $d(W \cdot \Omega) = 0$

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

Souriaform 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).

#### Erwartungswert und Streuung einer Observablen

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

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

$$\langle A \rangle_{W_t} := \int dp \wedge dx W_t(x, p) \cdot A(t, x, p) \quad (6)$$

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

$$(\Delta A)_{W_t} := \sqrt{\langle A^2 \rangle_{W_t} - \langle A \rangle_{W_t}^2} \quad (7)$$

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

#### Das Theorem von Ehrenfest

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{W_t} = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} + \{H, A\} \right\rangle_{W_t} \quad (8)$$

Der Beweis folgt aus den 2 Relationen

$$d(AW\Omega) = WdA \wedge \Omega, \quad dA \wedge \Omega = b[A]Z \wedge \Omega \quad (9)$$

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:

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle_t = \frac{1}{m}\langle p \rangle_t \quad \frac{d}{dt}\langle p \rangle_t = \langle f \rangle_t \quad \text{wobei} \quad f := -V_x(t, x) \quad (10)$$

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 
$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 - xf\cos(\nu t + \alpha)$$

(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:

$$W_t(x, p) = F(X(t, x, p), P(t, x, p)), \quad \text{wobei } X, P \text{ definiert sind:} \quad (11)$$

$$X(t, x, p) = x\cos\omega t - \frac{p}{m\omega}\sin\omega t - Q(t) \quad (12)$$

$$P(t, x, p) = p\cos\omega t + x m\omega\sin\omega t - K(t) \quad (13)$$

mit den Ausdrücken:

$$Q(t) = \frac{f}{m(\omega + \nu)} \left\{ \frac{\sin\frac{\nu-\omega}{2}t}{\frac{\nu-\omega}{2}} \sin\left[\frac{\nu-\omega}{2}t + \alpha\right] - \sin(\nu t + \alpha) \frac{\sin\omega t}{\omega} \right\} \quad (14)$$

$$K(t) = \frac{f}{(\omega + \nu)} \left\{ \frac{\nu\sin\frac{\nu-\omega}{2}t}{\frac{\nu-\omega}{2}} \cos\left[\frac{\nu-\omega}{2}t + \alpha\right] + \cos(\nu t + \alpha)\sin\omega t \right\} \quad (15)$$

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:

$$W(x, p) = \frac{m\omega}{\sqrt{\pi}\sqrt{2mE_0}}.exp\{-\frac{m\omega^2 x^2}{2E_0}\} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{2mE_0}}.exp\{-\frac{p^2}{2mE_0}\} \quad (16)$$

Man leitet daraus leicht die Gleichungen ab:

$$\langle \frac{p^2}{2m} \rangle = \frac{E_0}{2}, \quad \langle \frac{m\omega^2 x^2}{2} \rangle = \frac{E_0}{2} \quad (17)$$

Für den Erwartungswert 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:

$$H(t, x^k, p_i) = \frac{1}{2m} \sum (p_i + \frac{e}{c}A_i)^2 + eA_0 \quad (18)$$

Das elektromagnetische Potentialfeld wählen wir in der Form:

$$A_0(t, x^k) = V(1 - \frac{x^2 + y^2 + z^2}{2R^2}), \quad \text{statisches Coulombpotential} \quad (19)$$

$$A_1(t, x^k) = \tilde{V}\theta(t)\sin vt, \quad \text{monofrequente Welle} \quad (20)$$

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:

$$W_t(x^k, p_i) = N.exp(-\frac{2}{3\hbar\omega}(\frac{1}{2m}P^2 + \frac{m\omega^2}{2}X^2)) \quad (21)$$

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:

$$X^k(t, x^l, p_i) = x^k \cos \omega t - \frac{p_k}{m\omega} \sin \omega t - Q^k(t) \quad (22)$$

$$P_k(t, x^l, p_i) = p_k \cos \omega t + x^k m\omega \sin \omega t - K_k(t) \quad (23)$$

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

$$Q^1(t) = \frac{e\tilde{V}}{mc(\omega + \nu)} \left\{ \frac{\nu \sin^2\left(\frac{\nu - \omega}{2}t\right)}{\frac{\nu - \omega}{2}} + \sin \nu t \sin \omega t \right\} \quad (24)$$

$$P_1(t) = \frac{e\tilde{V}\omega}{c(\omega + \nu)} \left\{ \frac{\nu \sin(\nu - \omega)t}{\nu - \omega} - \sin \nu t \cos \omega t \right\} \quad (25)$$

Für ein Elektron 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.

## Bohrmechanik

Die Quantenmechanik ist gekennzeichnet durch einen **unaufhebbaren intrinsischen Indeterminismus**, der quantitativ bestimmt ist durch die **PLANCKSche 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:

$$\langle W \rangle := \int dp \wedge dx W \cdot W \leq \frac{1}{h} \quad (26)$$

Wir nennen diese Bedingung das BOHRsche Quantenpostulat, weil sich zeigen wird, dass dieses die mathematische Bedeutung der Quantenbedingungen ist, die BOHR 1913 der Mechanik hinzufügte, um die stationären (strahlungslosen) Zustände der Atome zu erklären.

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**  $(m, h, W_t)$ .

Delta-Maße, die in der statistischen Mechanik gerade die reinen Zustände beschreiben, sind also ausgeschlossen. Wir nennen nun 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 dynamischen Entwicklung rein.**

**Aufgabe :** Man zeige, daß die Zustände

$$W(x, p) = \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \cdot \exp\left\{-\frac{(x - x_0)^2}{a^2}\right\} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi b}} \cdot \exp\left\{-\frac{(p - p_0)^2}{b^2}\right\} \quad (27)$$

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

Aus (17) 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 solche Weise hat BOHR 1913 versucht, die stationären Zustände der Atome zu erklären.

### Freies Teilchen als bohrischer Massenpunkt

Aus (12)(13) 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:

$$W_t(x, p) = \frac{1}{\pi ab} \exp\left\{-\frac{(x - x_0 - \frac{p}{m}t)^2}{a^2}\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{(p - p_0)^2}{b^2}\right\} \quad (28)$$

**Aufgabe :** Man berechne für diese Zustände eines kräftefreien Teilchens:

a) die **Ortswahrscheinlichkeitsdichte**

$$\rho(t, x) := \int dp W_t(x, p) = \frac{1}{a(t)\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left\{-\frac{(x - x_0 - \frac{p_0}{m}t)^2}{a^2(t)}\right\} \quad (29)$$

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.

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

b) die **Impulswahrscheinlichkeitsdichte**

$$\tilde{\rho}(t, p) := \int dx W_t(x, p) = \frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}} \cdot \exp - \left[ (p - p_0)^2 \frac{a^2}{\hbar^2} \right] \quad (30)$$

die Impulsunbestimmtheit hängt also nicht von der Zeit ab. (Impulserhaltung!)

c) die **Erwartungswerte für den Ort**

$$\langle x \rangle_t = \int dp \wedge dx W_t(x, p) \cdot x = x_0 + \frac{p_0}{m} t \quad (\text{klassische Bahn}) \quad (31)$$

d) die **Erwartungswerte für den Impuls**

$$\langle p \rangle_t = \int dp \wedge dx W_t(x, p) \cdot p = p_0 \quad (\text{Impulserhaltung}) \quad (32)$$

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

$$\langle \Delta x \rangle_t = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot a(t), \quad \langle \Delta p \rangle_t = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\hbar}{a} \quad (33)$$

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 quasi-periodisch. Im speziellen Fall eines harmonischen Oszillators oszilliert sie im allgemeinen periodisch mit der Oszillatorfrequenz; es gibt in diesem Fall aber auch spezielle Zustände (kohärente), bei denen sie konstant bleibt:

Für einen harmonischen Oszillator liefern die Anfangszustände

$$W_0(x, p) = N \cdot \exp\left\{-\frac{(x - x_0)^2}{a^2}\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{(p - p_0)^2}{b^2}\right\} \quad (34)$$

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

$$W_t(x, p) = N \cdot \exp\left\{-\frac{(x - q(t))^2}{a^2}\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{(p - m\dot{q}(t))^2}{b^2}\right\}, \text{ wobei} \quad (35)$$

$$q(t) = x_0 \cos(\omega t) + \frac{p_0}{m\omega} \sin(\omega t) \quad (36)$$

Man sieht sofort, daß die Ortsunbestimmtheit und die Impulsunbestimmtheit zu allen Zeiten denselben Wert  $\Delta x = a/\sqrt{2}$  bzw.  $\Delta p = b/\sqrt{2}$  besitzen. 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:

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int dx \exp\left\{-\frac{x^2}{a^2}\right\} \cdot \exp\{ikx\} = a \cdot \exp\left\{-\frac{k^2 a^2}{4}\right\} \quad (37)$$

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

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int dx \cdot x^2 \exp\left\{-\frac{x^2}{a^2}\right\} = \frac{1}{2} a^3 \quad (38)$$

### Diskrete stationäre Zustände

Für die Berechnung der stationären Zustände des harmonischen Oszillators gibt es keine zwingende Vorschrift. Die übliche Vorgangsweise, die zu den diskreten "orthogonalen" stationären Zuständen führt, besteht in dem Ansatz:

$$W_0 = \frac{1}{h} \Theta(E_0 - H), \quad W_n = \frac{1}{h} \Theta(E_n - H) \Theta(H - E_{n-1}) \quad (39)$$

Die Forderung, dass dies reine Zustände seien, führt auf die diskreten Energien:

$$E_n = (1 + n)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

### Quantensprünge

Abschließend sei noch besonders darauf hingewiesen, dass auch in der Bohrmechanik das Problem der "Zustandsreduktion" nach dem Auftritt eines bestimmten Ereignisses in voller Schärfe vorhanden ist. Vgl. dazu das auf Seite 9 Gesagte!

Ein maximales Ereignis ist charakterisiert durch ein zusammenhängendes Gebiet  $g$  im Phasenraum, mit Volumen  $h$  :  $\int dp \wedge dx \chi(g) = h$   
Dabei ist  $\chi(g)$  die charakteristische Funktion von  $g$  :  $= 1$  für Punkte in  $g$ ,  
 $= 0$  sonst.

Die Wahrscheinlichkeit für den Auftritt des Ereignisses  $\mathcal{E}_g$  beim Zustand  $W$  ist gegeben als:

$$w_W(\mathcal{E}_g) = \int dp \wedge dx \chi(g) W \quad (40)$$

Eine **Quantenpflasterung** des Phasenraumes ist definiert als eine Pflasterung, in der jedes Gebiet das Volumen  $h$  besitzt:

$$\Sigma_n \chi(g_n) = 1, \quad \int dp \wedge dx \chi(g_n) = h \quad (41)$$

Daraus folgt:  $\Sigma_n w_W(\mathcal{E}_{g_n}) = 1$

2 disjunkten Gebieten  $g_1, g_2$  kann man als Ereignis das Maß  $P = \lambda \chi(g_1) + (1 - \lambda) \chi(g_2)$  zuordnen, wobei  $0 \leq \lambda \leq 1$ . Ein solches Maß ist nicht maximal, mathematisch erkennt man dies aus:

$$\int dp \wedge dx P^2 = h(1 - 2\lambda(1 - \lambda)) < h$$

Abschließend sei noch darauf hingewiesen, dass jede Quantenpflasterung einen eigenen Ereignisraum definiert.