

# 1 Quantenmechanik

## 1.1 Grundlagen der Mechanik

In der klassischen Mechanik betrachtet man die Größen Zeit  $t$ , Länge  $x$  (oder im dreidimensionalen  $\vec{x}$ ) und Masse  $m$  als gegeben. Man geht davon aus, daß Zeit und Raum beliebig unterteilbar sind, daß sie also *kontinuierlich* sind. Deswegen kann man die Zeit mit den reellen Zahlen  $\mathbb{R}$  beschreiben. Den Ort eines Teilchens, von dem man in den theoretischen Überlegungen annimmt, es habe keine räumliche Ausdehnung, kann man nun zu allen Zeitpunkten angeben und erhält so eine Ort-Zeit-Funktion  $\vec{x}(t)$  für das Teilchen. Da sich der Ort nicht sprunghaft ändert und die Zeit durch die reellen Zahlen beschrieben wird, kann man nun die Ableitung der Funktion  $\vec{x}(t)$  nach der Zeit betrachten. Sie ist ein Maß für die Stärke der Änderung des Ortes in einem bestimmten Moment. Dies bezeichnet man in der Leibnizschen Schreibweise<sup>1</sup> als

$$\frac{dx}{dt}.$$

Die Ableitung der Ort-Zeit-Funktion nach der Zeit nennt man die Geschwindigkeit

$$\vec{v}(t) := \frac{dx}{dt},$$

die Ableitung der Geschwindigkeit nach der Zeit wird als Beschleunigung bezeichnet

$$\vec{a}(t) := \frac{dv}{dt} = \frac{d^2x}{dt^2}.$$

Außerdem definiert man den Impuls als das Produkt aus Geschwindigkeit und Masse eines Teilchens.

$$\vec{p} = m\vec{v}.$$

Nach dem Trägheitssatz bewegen sich Körper, die eine Masse besitzen, mit konstanter Geschwindigkeit auf einer geraden Bahn, solange, bis eine Kraft auf sie einwirkt und ihre Bahn oder Geschwindigkeit ändert. Es ist eines der wichtigsten Gesetze der Physik, das zweite Newtonsche Gesetz, das besagt: Eine Kraft ist das Produkt aus Masse und Beschleunigung

$$\vec{K} = m\vec{a}.$$

Dies bedeutet, die Masse ist die Eigenschaft, die sich einer Änderung des Bewegungszustandes (Änderung der Geschwindigkeit bzw. der Bewegungsrichtung) widersetzt. Die Einheit der Kraft ist das Newton [ $N=kg\ m/s^2$ ]. Auf eine 100g-Tafel Schokolade wirkt am Erdboden eine Kraft von ca. 1N. Beispiele für Kräfte sind die Erdanziehung, die Anziehung oder Abstoßung elektrisch geladener Körper.

Die Energie ist das Produkt aus Kraft und Weg, über den die Kraft wirkt. Genauer: Auf einen 10kg schweren Koffer wirkt am Erdboden eine Kraft von 981 Newton. Hebe ich diesen Koffer um einen Meter an, so habe ich eine Arbeit von 981 Joule [ $J=Nm$ ] verrichtet. Wenn ich aber den Koffer einen Meter nach rechts verschiebe, habe ich keine Arbeit geleistet, da ich nicht gegen die Schwerkraft

gearbeitet habe. Wenn die Kraft vom Ort abhängt, muß man zur Berechnung der Energie ein Integral verwenden. Dies bedeutet, man nimmt ganz kleine Wegstücke  $dx$  auf denen man sich die Kraft als konstant denkt, dann multipliziert man diese Wegstücke mit der dortigen Kraft und summiert die vielen kleinen Energien auf zur Gesamtenergie

$$E = \int \vec{K}(\vec{x})d\vec{x}.$$

Es gibt viele verschiedene Energieformen: Eine Energieform ist die Lageenergie, meist als *potentielle Energie* bezeichnet. Ein Körper, der auf einem hohen Berg liegt hat diese Energie. Sie berechnet sich in der Nähe des Erdbodens als Produkt aus der Erdbeschleunigung  $g = 9,81m/s^2$ , der Höhe  $h$  und der Masse des Körpers  $m$  zu

$$E_{pot} = mgh.$$

Wenn man ihn vom Berg wirft, dann verliert er die Lageenergie und seine Geschwindigkeit nimmt zu. Dies entspricht einer anderen Energieform, der kinetischen Energie

$$E_{kin} = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m},$$

mit der Geschwindigkeit  $v$  und dem Impuls  $p$ .

Umgekehrt führt eine Energiedifferenz zu einer Kraft: Weil die potentielle Energie eines Balles auf einer schiefen Ebene weiter oben größer ist als ein kleines Stückchen weiter unter resultiert eine Kraft, die den Ball nach unten zieht. Mathematisch exakt drückt man dies dadurch aus, daß man Kraft und Energie durch eine Ableitung verbindet

$$F = -\frac{dE}{dx}.$$

## 1.2 Differentialgleichungen

Weil man den Ort, die Geschwindigkeit und andere Eigenschaften von Teilchen als Funktionen der Zeit definiert, ist es nun Ziel, Zusammenhänge zwischen diesen Größen zu finden. Zum Beispiel kann man angeben, wie groß die Anziehungskraft zwischen zwei Massen in einem bestimmten Abstand oder die elektrische Kraft ist. Wenn man die Kräfte kennt, möchte man gerne berechnen, wie die Bewegungen der Teilchen oder Körper unter diesen Kräften aussehen. Ein einfaches Beispiel ist eine Feder.

Man weiß, daß eine Feder eine Masse mit der Kraft  $K = -kx$  in Richtung Ruhelage zieht, wenn sich die Masse in der Entfernung  $x$  von dieser Ruhelage befindet. Nach Newtons Gesetz für die Kraft heißt das

$$m \frac{d^2x(t)}{dt^2} = -kx(t).$$

Das liefert einen Zusammenhang zwischen der Beschleunigung und dem Ort, beide als Funktionen der Zeit. Da aber die Beschleunigung auch die zweite Ableitung des Ortes nach der Zeit ist, können die beiden nicht völlig unabhängig sein. Eine Beziehung wie hier, die die Ableitungen einer Größe mit anderen Größen oder anderen, niedrigeren Ableitungen verknüpft, heißt eine *Differentialgleichung*. Viele wichtigen Beziehungen in der Physik bestehen aus solchen Gleichungen. Ziel ist es dann, eine Funktion

<sup>1</sup>In der Schule schreibt man meist  $f'(x)$  für die Ableitung von  $f(x)$  nach  $x$ , die wir als  $\frac{df}{dx}$  bezeichnen werden.

(hier  $x(t)$ ) zu finden, die so beschaffen ist, daß die Gleichung gilt. Dafür gibt es einige Tricks, aber es ist oft gar nicht möglich, eine Lösung zu finden. Manchmal braucht man auch einfach Glück, um die richtige Lösung zu erraten. Hat man aber die Lösung, so kann man leicht feststellen, ob diese richtig ist, denn Ableiten ist viel einfacher als das Lösen von Differentialgleichungen.

Die Lösung für die Gleichung hier ist einfach eine Sinus- oder Kosinusfunktion

$$x(t) = A \sin\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right).$$

Die Amplitude  $A$ , das bedeutet die maximale Auslenkung der Masse, ist in dieser Lösung jedoch noch nicht enthalten. Wenn man nur die Differentialgleichung kennt, genügt dies also doch nicht für die ganze Lösung. Hier kann man jedes  $A$  wählen. Erst wenn man noch zu einem Zeitpunkt den Ort und die Geschwindigkeit der Masse an der Feder kennt, kann man  $A$  ausrechnen und damit die Bewegung der Masse für alle Zukunft vorher sagen. Dies ist ein wichtiges Konzept der klassischen Physik: Bei Kenntnis eines Anfangszustandes und aller Kräfte ist man grundsätzlich in der Lage, das System für alle Zeiten korrekt zu beschreiben. Mathematisch mag dies schwierig sein, aber die Bewegungen sind alle vorherbestimmt, sie sind *deterministisch*. Wenn die ganze Natur so beschaffen wäre, stünde die Zukunft heute schon fest. Der französische Mathematiker Pierre-Simon de Laplace hat sich ein Wesen ausgedacht, daß intelligent genug sein sollte, die ganze Welt in allen Einzelheiten zu erfassen und dann mit den Gesetzen der Mechanik die Zukunft für alle Zeit vorherzusagen. Nach ihm nennt man solch ein übermenschliches Wesen einen *Laplaceschen Dämon*.

### 1.3 Zweizustandssysteme

In der klassischen Mechanik macht man die Annahme, daß sich Meßgrößen prinzipiell beliebig genau messen lassen. Tatsächlich greift der Meßvorgang immer auch in das zu messende System ein. Man stellt sich aber vor, daß diese Störung gerade so klein ist, daß die Messung nicht mehr beeinflußt wird. Ein Teilchen ist an einem bestimmten Ort. Um diesen zu messen, muß man das System eventuell etwas stören. Das ändert aber nichts an der Tatsache, daß das Teilchen einen genau bestimmten Ort hat, den man mit ausreichender Sorgfalt so genau bestimmen kann, wie man es wünscht.

#### 1.3.1 Stern-Gerlach-Versuch

Diese Vorstellungen der klassischen Mechanik führten zu Schwierigkeiten mit Experimenten, die in den letzten Jahren des 19. Jahrhunderts und den ersten Jahren des 20. Jahrhunderts gemacht wurden. Einige werden Euch vielleicht bekannt sein. Hier werden wir einen Versuch der Frankfurter Physiker Otto Stern und Walter Gerlach aus dem Jahre 1922 diskutieren, der besonders deutlich werden

<sup>2</sup>Eigentlich betrachtet man im Versuch nur den Spin eines Elektrons. Allerdings ist das Elektron nicht elektrisch neutral, weswegen sich seine Bewegung in einem Magnetfeld schwierig berechnen und messen läßt. Ein Silberatom (Ordnungszahl 47) hat in der 5s-Schale ein ungerades Elektron, das im wesentlichen für die Wechselwirkung von Silberatomen mit einem inhomogenen Magnetfeld verantwortlich ist. Das Atom ist aber elektrisch neutral. So wurde der Versuch in den zwanziger Jahren durchgeführt. Deswegen wird im folgenden vom „Spin des Silberatoms“ gesprochen.

läßt, wieso die Quantenmechanik einige Fragen aufwirft, die in der klassischen Physik als unbedeutend erschienen.

Viele Elementarteilchen besitzen neben ihrer Ladung eine weitere Eigenschaft. Diese macht sich bemerkbar, wenn sich die Teilchen durch ein Magnetfeld bewegen. Während sie sich ohne Magnetfeld auf einer geraden Bahn bewegen („Teilchenstrahl“), führt das Magnetfeld zu einer Ablenkung der Teilchen. Die Teilchen besitzen also eine Eigenschaft, die sie mit dem magnetischen Feld wechselwirken läßt. Man sagt, die Teilchen besitzen ein *magnetisches Moment*. Dieses kann verursacht werden durch sich bewegende elektrische Ladungen. Wie man aus anderen Experimenten folgert, drehen oder bewegen sich in Elementarteilchen jedoch keine Ladungen. Vielmehr verhalten sich viele Elementarteilchen in magnetischen Feldern einfach so, als gäbe es eine sich drehende elektrische Ladung in ihrem Inneren, die das magnetische Moment verursacht, sich aber sonst nicht bemerkbar macht. Diese Eigenschaft wird auch *Spin* genannt. Das magnetische Moment  $\vec{\mu}$ , das verantwortlich ist für eine Wechselwirkung mit einem Magnetfeld, ist proportional zum Spin  $\vec{S}$

$$\vec{\mu} \propto \vec{S}.$$

Der Spin wird als ein Vektor definiert. Das liegt daran, daß eine Drehung nicht allein durch eine Zahl beschrieben werden kann: Schon für die Drehfrequenz benötigt man eine Zahl. Man muß aber auch angeben, um welche Drehachse die Drehung laufen soll. Der Vektor zu einer Drehung zeigt in die Richtung der Drehachse, seine Länge entspricht der Drehgeschwindigkeit. Da sich der Spin genauso wie eine Drehung äußert, definiert man ihn analog als Vektor.

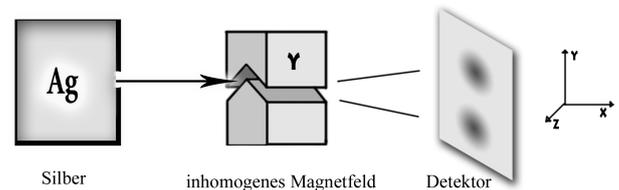


Abbildung 1: Stern-Gerlach-Versuch. Die Silberatome werden von einem inhomogenen Magnetfeld (hier in  $y$ -Richtung) abgelenkt. Auf dem Schirm finden wir zwei Komponenten.

Wenn man einen Strahl von Silberatomen<sup>2</sup> durch ein inhomogenes Magnetfeld  $\vec{B}$  schießt, so kann man die Atome hinter dem Magnetfeld auf einem Schirm auftreffen lassen. Man nimmt an, daß das Magnetfeld nur in der  $z$ -Koordinate, welche senkrecht zur Strahlrichtung steht, inhomogen ist. Dann gilt

$$\frac{d}{dx}B_x = \frac{d}{dy}B_y = 0$$

Das inhomogene Magnetfeld  $\vec{B}$  übt in  $z$ -Richtung eine Kraft auf ein magnetisches Moment  $\vec{\mu}$  aus

$$F_z = \frac{d}{dz}(\vec{\mu}\vec{B}) = \mu_z \frac{d}{dz}B_z.$$

Da der Spin des Atoms keine Raumrichtung auszeichnet oder bevorzugt, würde man erwarten, daß er sich zufällig auf alle Richtungen verteilt. Für die Ablenkung der Silberatome ist die  $z$ -Komponente des Spins verantwortlich, die dann kontinuierliche Werte zwischen  $-|\vec{\mu}|$  und  $|\vec{\mu}|$  aufweisen würde. Auf dem Schirm sollte ein diffuser Fleck zu sehen sein. Tatsächlich sieht man auf dem Schirm zwei deutlich voneinander getrennte Komponenten, man sprach damals von „Raumquantisierung“. Wenn also keine anderen Effekte zur Ablenkung beitragen als der Spin des 47. Elektrons, so kann der Spin  $\mathbf{S}$  in  $z$ -Richtung nur zwei verschiedene Werte annehmen. Diese sollen mit  $S_z+$  und  $S_z-$  bezeichnet werden. Die zwei möglichen Werte des Spins können als Vielfache des sogenannten Wirkungsquantums ausgedrückt werden:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,0546 \times 10^{-34} Js.$$

Dabei ist  $h$  das Plancksche Wirkungsquantum,  $\hbar$  ist eine Grundeinheit des Drehimpulses.

Vor dem Versuch wurde willkürlich festgelegt, in welche Richtung die  $z$ -Achse orientiert sein soll. Das Ergebnis des Versuchs ist von dieser Wahl freilich völlig unabhängig. Hätte man das Magnetfeld  $\mathbf{B}$  anders ausgerichtet und dadurch eine andere Richtung relativ zum Strahl ausgewählt, z. B. die  $x$ -Achse, so hätte man ebenfalls genau zwei Komponenten des Strahls, nämlich  $S_x+$  und  $S_x-$ , erhalten.

### 1.3.2 Sequentielle Stern-Gerlach-Versuche

Das überraschende Ergebnis, daß eine bestimmte Komponente eines Vektors nur zwei Werte annehmen kann, bereitet der Vorstellungskraft bereits einige Probleme. Die volle Kompliziertheit dieser Tatsache kommt allerdings erst zum Tragen, wenn man nacheinander die Vektorkomponenten in verschiedenen Richtungen mißt.

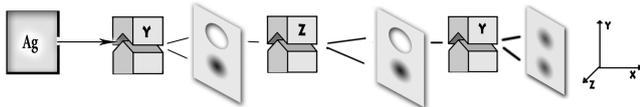


Abbildung 2: Sequentieller Stern-Gerlach-Versuch. Messung des Spins in  $y$ -Richtung, dann in  $z$ -Richtung und wieder in  $y$ -Richtung.

Zu Beginn mißt die Komponenten eines Strahls von Silberatomen in  $z$ -Richtung. Den Teil des Strahls, der den Spin  $S_z-$  besitzt, blendet man aus. Der Teil, der den Spin  $S_z+$  besitzt, wird durch ein weiteres Magnetfeld  $\mathbf{B}$  geschickt, das ebenfalls nur in  $z$ -Richtung inhomogen ist. Auf dem Schirm hinter diesem Magnetfeld sieht man nun nur eine Komponente, nämlich die  $S_z+$ -Komponente. Da die übrigen Atome ausgeblendet wurden, ist dies genau das, was man erwartet hätte.

Wenn man nun in  $z$ -Richtung mißt, die  $S_z-$ -Komponente ausblendet, und anschließend die  $y$ -Komponente bestimmt, die senkrecht auf die Strahlrichtung und auf die  $z$ -Richtung stehe, so findet man auf dem Schirm zwei gleichstarke Komponenten, die den Orientierungen  $S_y+$  und  $S_y-$  entsprechen. Dies ist nicht

verwunderlich, da ja in der  $S_z+$ -Komponente beide Orientierungen enthalten sein können und dies offensichtlich mit der gleichen Wahrscheinlichkeit.

In einem weiteren Versuch geht man vor wie vorhin: Man mißt in  $z$ -Richtung und blendet  $S_z-$  aus, vermißt den Rest anschließend in  $y$ -Richtung. Nun blendet man davon  $S_y-$  aus. Der verbleibende Strahl wird erneut in ein Magnetfeld geleitet, welches in  $z$ -Richtung orientiert ist. Da man bereits die  $S_z-$ -Komponente ausgeblendet hatte, würde man nun erwarten, nur eine  $S_z+$ -Komponente zu finden. Es werden im Experiment aber beide Komponenten in gleicher Stärke beobachtet!

Dies bedeutet: Die Messung in der  $y$ -Richtung hat die Kenntnis, die wir zuvor hatten (nur  $S_z+$  ist im Strahl), zerstört. Dies ist keine Folge einer schlechten Messung sondern ein typisch quantenmechanisches Phänomen.

## 1.4 Mathematisches Theorie der Quantenmechanik

**Axiom 1** *Reine Zustände der Quantenmechanik werden durch Vektoren der Länge eins im Hilbertraum  $\mathcal{H}$  beschrieben.*

Man schreibt die Vektoren in der sogenannten Bra-Ket-Schreibweise (von englisch bracket)  $|a\rangle$  auf. Da es nach dem Riezischen Darstellungssatz zu jedem  $|a\rangle \in \mathcal{H}$  eine Linearform gibt, die man durch das Skalarprodukt erhält, führen wir eine Schreibweise ein, die das Skalarprodukt und die Linearformen verbindet. Ein Skalarprodukt der Vektoren  $|a\rangle$  und  $|b\rangle$  wird durch

$$\langle a|b\rangle$$

ausgedrückt. Will man die zu  $|a\rangle$  gehörige Linearform bezeichnen, so schreibt man  $\langle a|$ .

Das Axiom besagt anschaulich, daß ein System, daß zwei oder mehr verschiedene Zustände einnehmen kann auch durch beliebige Linearkombinationen dieser Zustände beschrieben werden kann. Solche Überlagerungen von Zuständen heißen *Superpositionen* und daher wird Axiom 1 auch *Superpositionsprinzip* genannt.

**Axiom 2** *Observable werden durch selbstadjungierte Operatoren, z.B.  $\mathbf{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  beschrieben.*

**Axiom 3** *Die möglichen Meßergebnisse einer Observablen sind die Eigenwerte des Operators. Sei  $|a\rangle$  eine Eigenvektor zum Operator  $\mathbf{A}$  mit  $\mathbf{A}|a\rangle = a|a\rangle$  (man bezeichnet einfach den Vektor durch seinen Eigenwert). Die Wahrscheinlichkeit, an einem System im Zustand  $|\psi\rangle$  den Wert  $a$  zu messen ist gegeben durch den Ausdruck*

$$P_\psi(a) = |\langle a|\psi\rangle|^2.$$

Das Axiom sorgt dafür, daß eine Messung von  $\mathbf{A}$  am Zustand  $|a\rangle$  mit Sicherheit den Meßwert  $a$  liefern wird. Weiterhin weiß man nun, wie man den Erwartungswert eines Operators bezogen auf ein System im Zustand  $|\psi\rangle$  berechnen kann. Er ist definiert als

$$\langle \mathbf{A} \rangle := \sum_a P(a)a,$$

wobei die Summe über alle möglichen Eigenwerte läuft. Nun ist

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{A} \rangle &= \sum_a |\langle a | \psi \rangle|^2 a \\ &= \sum_a \langle \psi | a \rangle a \langle a | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \mathbf{A} \sum_a | a \rangle \langle a | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle.\end{aligned}$$

Per definitionem sind die so gefundenen Erwartungswerte immer reelle Zahlen, da ja die Eigenwerte  $a$  real sind und die Wahrscheinlichkeiten  $P(a)$  ebenfalls.

**Axiom 4** Die zeitliche Änderung einer Observablen wird beschrieben durch den Zeitenwicklungsoperator

$$\mathbf{U}_t = \exp(-i\mathbf{H}t/\hbar).$$

Dabei ist  $\mathbf{H}$  der Hamiltonoperator, welcher der Observablen Energie entspricht.  $\hbar$  ist eine Kurzschreibweise für das Plancksche Wirkungsquantum geteilt durch  $2\pi$ , wie oben bereits eingeführt.<sup>3</sup>

Der Hamiltonoperator ist die Summe der kinetischen Energie und der potentiellen Energie. Andere Energieformen sind darauf zurückzuführen. Er sieht für ein freies Teilchen (also ein einziges Teilchen ohne potentielle Energie) mit Impulsoperator  $\mathbf{P}$  und Masse  $m$  folgendermaßen aus

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m}.$$

Wenn man dies mit dem Ausdruck für die kinetische Energie aus der klassischen Mechanik  $E = p^2/2m$  vergleicht, so fällt auf, daß nur der Impuls durch den Impulsoperator ersetzt werden muß. Diese Analogie zwischen klassischer und Quantenmechanik kann man noch weiter fortführen und ist darin begründet, daß die klassische Mechanik ein Grenzfall der Quantenmechanik darstellt. Man fordert, die Quantenmechanik müsse die klassische Mechanik als Grenzfall enthalten. Diese Forderung an die Quantenmechanik, die deswegen erhoben wird, weil die klassische Mechanik über weite Strecken eine sehr gute Beschreibung der Beobachtungen ermöglicht, wird als *Korrespondenzprinzip* bezeichnet.

Eine weitere Anmerkung ist hier angebracht: Die Zeit wird in der Quantenmechanik nicht als Observable eingeführt. Das bedeutet, daß ihr, obwohl sie meßbar ist, kein Operator zugeordnet ist. Sie wird wie ein Parameter behandelt, der außerhalb der Theorie steht. Dies ist ein wichtiger Unterschied zwischen der Quantenmechanik und der Relativitätstheorie und eine der Ursachen, weswegen die beiden Theorien nicht zusammenpassen.

<sup>3</sup>Die Exponentialfunktion hat die Eigenschaft

$$e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}.$$

Dies ist auch die Definition für die Exponentialfunktion von Operatoren, die man bekanntlich mit sich selbst multiplizieren kann

$$e^{\mathbf{A}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\mathbf{A}^k}{k!}.$$

## 1.5 Zweizustandssysteme II

Es sollen nun die Axiome näher erläutert werden, in dem das Stern-Gerlach-Experiment eingehender untersucht und mit quantenmechanischen Mitteln beschrieben wird.

Das System ist ein sogenanntes Zweizustandssystem. Der Spin kann zu einer vorgegebenen Richtung (z. B. die  $z$ -Achse) nur zwei Werte annehmen, nämlich  $S_z+$  und  $S_z-$ . Das bedeutet, der hier benötigte Hilbertraum ist ein zweidimensionaler Vektorraum. Man wählt als Basis die zwei Vektoren  $|S_z; +\rangle$  und  $|S_z; -\rangle$ . Der einfachste Operator im zugehörigen Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ist der Einsoperator

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = |S_z; +\rangle \langle S_z; +| + |S_z; -\rangle \langle S_z; -|.$$

Da man weiß, daß die zugehörige Observable  $\mathbf{S}_z$  die Eigenvektoren  $|S_z; +\rangle$  und  $|S_z; -\rangle$  mit den Eigenwerten  $\hbar/2$  und  $-\hbar/2$  besitzt und der Operator in dieser Notation diagonal mit den Eigenwerten auf der Diagonalen ist, findet man

$$\mathbf{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (|S_z; +\rangle \langle S_z; +| - |S_z; -\rangle \langle S_z; -|).$$

Es gelten dann die folgenden Eigenwertbeziehungen

$$\mathbf{S}_z |S_z; +\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} |S_z; +\rangle.$$

und

$$\mathbf{S}_z |S_z; -\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} |S_z; -\rangle.$$

Die physikalische Bedeutung dieser Beziehungen ist folgende: Der Operator  $\mathbf{S}_z$  steht für die Meßung des Spins in  $z$ -Richtung. Ist das System im Zustand  $|S_z; +\rangle$ , und mißt man den Spin in  $z$ -Richtung, so wendet man  $\mathbf{S}_z$  auf den Zustand an. Man erhält den Eigenwert  $\hbar/2$  als Meßergebnis, der Zustand bleibt  $|S_z; +\rangle$ . Dies drückt die Gleichung

$$\mathbf{S}_z |S_z; +\rangle = \frac{\hbar}{2} |S_z; +\rangle$$

aus: Die Anwendung des Operators  $\mathbf{S}_z$  auf den Zustand  $|S_z; +\rangle$  („die Messung des Spins in  $z$ -Richtung“) ist gleich („ergibt“) den selben Zustand mit dem Eigenwert („Meßwert“)  $\hbar/2$ .

Man kann in unserem Hilbertraum weitere Operatoren definieren. Folgende Definitionen werden betrachtet

$$\mathbf{S}_+ := \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \hbar |S_z; +\rangle \langle S_z; -|$$

und

$$\mathbf{S}_- := \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \hbar |S_z; -\rangle \langle S_z; +|.$$

Die Wirkung der beiden Operatoren ist folgende

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_+|S_z; +\rangle &= \hbar|S_z; +\rangle\langle S_z; -|S_z; +\rangle = 0 \\ \mathbf{S}_+|S_z; -\rangle &= \hbar|S_z; +\rangle\langle S_z; -|S_z; -\rangle = \hbar|S_z; +\rangle \\ \mathbf{S}_-|S_z; +\rangle &= \hbar|S_z; -\rangle\langle S_z; +|S_z; +\rangle = \hbar|S_z; -\rangle \\ \mathbf{S}_-|S_z; -\rangle &= \hbar|S_z; -\rangle\langle S_z; +|S_z; -\rangle = 0.\end{aligned}$$

Dies bedeutet, daß der Operator  $\mathbf{S}_+$  den Spin von -1 auf +1 erhöht, wenn dies möglich ist, anderenfalls ergibt seine Anwendung Null. Umgekehrt verringert der Operator  $\mathbf{S}_-$  den Spin falls möglich. Die beiden Operatoren sind, wie man an ihrer Matrixdarstellung sehen kann, nicht selbstadjungiert. Das bedeutet umgekehrt, daß sie keinen Meßprozeß widerspiegeln.

Nun geht man von Axiom 3 aus, um die Eigenwerte der Messungen in  $y$ -Richtung ( $\mathbf{S}_y$ ) und in  $x$ -Richtung ( $\mathbf{S}_x$ ) zu konstruieren. Wir erinnern uns, daß in einem Strahl, aus dem alle Atome des Typs  $|S_z; -\rangle$  ausgeblendet wurden, je mit Wahrscheinlichkeit einhalb  $|S_y; +\rangle$  und  $|S_y; -\rangle$  beobachtet wurde. Mathematisch bedeutet dies

$$|\langle S_y; +|S_z; +\rangle|^2 = |\langle S_y; -|S_z; +\rangle|^2 = \frac{1}{2}.$$

Analog gilt aus Symmetriegründen

$$|\langle S_y; +|S_z; -\rangle|^2 = |\langle S_y; -|S_z; -\rangle|^2 = \frac{1}{2}.$$

Damit gilt

$$|S_y; +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z; +\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_1}|S_z; -\rangle.$$

Der Parameter  $\delta_1$  ist an dieser Stelle beliebig. Da  $|S_y; -\rangle$  orthogonal auf  $|S_y; +\rangle$  stehen muß, folgt

$$|S_y; -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z; +\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_1}|S_z; -\rangle.$$

Aus der Anforderung, daß  $\mathbf{S}_y$  diagonal in der Darstellung  $|S_y; \pm\rangle$  sein muß, erhält man

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_y &= \frac{\hbar}{2}(|S_y; +\rangle\langle S_y; +| - |S_y; -\rangle\langle S_y; -|) \\ &= \frac{\hbar}{2}(e^{-i\delta_1}|S_z; +\rangle\langle S_z; -| - e^{i\delta_1}|S_z; -\rangle\langle S_z; +|) \\ &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\delta_1} \\ -e^{i\delta_1} & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Der Operator ist, wie es die Axiome fordern, selbstadjungiert. In voller Analogie kann man nun die  $x$ -Richtung behandeln

$$|S_x; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z; +\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_2}|S_z; -\rangle.$$

Es ist wegen der Forderung, daß die  $|S_x; \pm\rangle$  auf die  $|S_z; \pm\rangle$  senkrecht stehen müssen, und wegen der Wahrscheinlichkeit 1/2, die wechselseitigen Komponenten zu finden,  $\delta_1 - \delta_2 = \pm\pi/2$ . Man wählt  $\delta_1 = -\pi/2$ ,  $\delta_2 = 0$ . Der Operator ist gegeben durch

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_x &= \frac{\hbar}{2}(|S_z; +\rangle\langle S_z; -| + |S_z; -\rangle\langle S_z; +|) \\ &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{S}_y &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Die Matrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

heißen Pauli-Matrizen. Durch sie kann ein Zweizustandssystem wie der Spin vollständig beschrieben werden. Man kann aus den Pauli-Matrizen noch einen weiteren wichtigen Operator konstruieren:

$$\vec{\mathbf{S}}^2 = \mathbf{S}_x^2 + \mathbf{S}_y^2 + \mathbf{S}_z^2 = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Dieser gibt das Quadrat des Gesamtpins an, der hier immer erhalten ist.

## 1.6 Drehungen im Spinraum\*

Man kann auch Operatoren einführen, die Drehungen des Spins beschreiben. Solche Operatoren drehen den Spinzustand in eine andere Raumrichtung. Der einer  $\vartheta$ -Drehung um die  $z$ -Achse entsprechende Operator ist

$$\mathbf{D}_z(\vartheta) = e^{-i\vartheta\mathbf{S}_z/\hbar} = e^{-i\vartheta\sigma_z/2}.$$

Der Operator bewirkt folgendes

$$\begin{aligned}\mathbf{D}_y(\vartheta)|S_y; +\rangle &= e^{-i\vartheta\mathbf{S}_y/\hbar}\frac{1}{\sqrt{2}}(|S_z; +\rangle + i|S_z; -\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-i\vartheta/2}|S_z; +\rangle + ie^{i\vartheta/2}|S_z; -\rangle\right).\end{aligned}$$

Wir gehen einige Fälle durch:

1.  $\vartheta = 4\pi$ : Es ändert sich durch die Drehung nichts

$$\mathbf{D}_y(\vartheta)|S_y; +\rangle = |S_y; +\rangle.$$

2.  $\vartheta = 2\pi$ : Es ändert sich durch nur das Vorzeichen

$$\mathbf{D}_y(\vartheta)|S_y; +\rangle = -|S_y; +\rangle.$$

3.  $\vartheta = \pi$ : Es ändert sich durch die Drehung die Orientierung und ein Faktor  $i$  taucht auf.

$$\mathbf{D}_y(\vartheta)|S_y; +\rangle = -i|S_y; -\rangle.$$

4.  $\vartheta = \pi/2$ : Es ändert sich neben dem Vorfaktor der  $y$ -Spinvektor zu einem  $x$ -Spinvektor.

$$\mathbf{D}_y(\vartheta)|S_y; +\rangle = e^{-i\pi/4}|S_x; -\rangle.$$

Dieses Verhalten ist sonderbar: Normalerweise erwartet man bei einer Drehung um  $2\pi$  keine Veränderungen, das gilt für diesen Spin aber erst nach zweimaliger Drehung ( $4\pi$ ). Deswegen spricht man vom Spin 1/2, der sich dadurch ausdrückt, daß die Eigenwerte zu den Operatoren  $\mathbf{S}_i$  nicht  $\pm\hbar$ , sondern  $\pm\hbar/2$  sind. Es gibt aber auch Objekte mit Spin 1, sie nach einer Drehung von  $2\pi$  wieder so aussehen (d. h. im selben Zustand sind), wie vor der Drehung. Ein Spin 2 bedeutet, daß ein entsprechendes Objekt schon nach einer Drehung um  $\pi$  wieder so aussieht wie vor der Drehung, es ist also drehungssymmetrisch.

Es soll noch die Wahrscheinlichkeit berechnet werden, daß ein Eigenzustand ein bestimmtes Meßergebnis in einer beliebigen anderen Richtung liefert. Sei  $|\psi\rangle$  ein Eigenvektor zum Operator, den man durch Drehung um  $\vartheta$  um die  $z$ -Achse aus dem Operator  $\mathbf{S}_z$  erhält, mit Eigenwert –

$$|\psi\rangle = e^{-i\vartheta\sigma_z/2}|S_x, -\rangle.$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß man an einem solchen Zustand den Eigenwert  $+$  in der  $x$ -Richtung mißt, ist nach unseren Axiomen gegeben durch

$$\begin{aligned} & \left| \langle S_x, + | e^{-i\vartheta\sigma_z/2} | S_x, - \rangle \right|^2 = \\ &= \frac{1}{2} \left| \langle S_x, + | e^{-i\vartheta\sigma_z/2} (|S_z; +\rangle - |S_z; -\rangle) \right|^2 \\ &= \frac{1}{4} \left| \langle S_z, + | e^{-i\vartheta/2} | S_z; +\rangle - \langle S_z, - | e^{i\vartheta/2} | S_z; -\rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{4} \left| e^{-i\vartheta/2} + e^{i\vartheta/2} \right|^2 \\ &= \left| \sin \frac{\vartheta}{2} \right|^2 \end{aligned}$$

## 1.7 Unschärferelation

Zuerst halten wir fest, daß für einen Operator, für den gilt  $\mathbf{C} = -\mathbf{C}^\dagger$  der Ausdruck

$$\langle \psi | \mathbf{C} | \psi \rangle = \langle \psi | (\mathbf{C} | \psi \rangle) = [(\langle \psi | \mathbf{C}^\dagger) | \psi \rangle]^* = -\langle \psi | \mathbf{C} | \psi \rangle^*$$

eine rein imaginäre Zahl sein muß.

Sei  $\mathbf{A}$  ein selbstadjungierter Operator. Dann ist auch der Operator

$$\Delta_A := \mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle$$

selbstadjungiert. Man berechnet den Erwartungswert seines Quadrates zu

$$\langle \Delta_A^2 \rangle = \langle \mathbf{A}^2 - 2\mathbf{A}\langle \mathbf{A} \rangle + \langle \mathbf{A} \rangle^2 \rangle = \langle \mathbf{A}^2 \rangle - \langle \mathbf{A} \rangle^2.$$

Der Ausdruck  $\langle \Delta_A^2 \rangle$  gibt uns Aufschluß über die mittlere Ungenauigkeit, mit der die Messung der Observablen  $\mathbf{A}$  behaftet ist. Manchmal spricht man auch von *Unschärfe*. Man kann aus den Axiomen, die der Quantenmechanik zugrunde liegen, fundamentale Eigenschaften dieser Größe ableiten. Die Auswirkungen solcher Ungenauigkeiten wurde schon bei den Stern-Gerlach-Versuchen beobachtet, als es nicht gelungen ist, gleichzeitig die Spinkomponente in  $z$ -Richtung und einer beliebigen anderen Richtung exakt zu bestimmen.

Man setzt nun in die Cauchy-Schwarz-Ungleichung  $|\langle v | w \rangle|^2 \leq \langle v | v \rangle \langle w | w \rangle$  die Vektoren  $\Delta_A |\psi\rangle$  und  $\Delta_B |\psi\rangle$  ein und erhält

$$|\langle \Delta_A \Delta_B \rangle|^2 \leq \langle \Delta_A^2 \rangle \langle \Delta_B^2 \rangle.$$

Man schreiben nun

$$\Delta_A \Delta_B = \frac{1}{2} [\Delta_A; \Delta_B] + \frac{1}{2} (\Delta_A \Delta_B + \Delta_B \Delta_A)$$

Die zweite große Klammer ist ein selbstadjungierter Operator, also einer, dessen Erwartungswert reell ist. Die erste Klammer ist

$$\begin{aligned} -[\Delta_A; \Delta_B]^\dagger &= (\Delta_B \Delta_A)^\dagger - (\Delta_A \Delta_B)^\dagger \\ &= \Delta_A^\dagger \Delta_B^\dagger - \Delta_B^\dagger \Delta_A^\dagger \\ &= [\Delta_A; \Delta_B]. \end{aligned}$$

Deswegen ist der Erwartungswert dieser Klammer gänzlich imaginär. Also gilt

$$\langle \Delta_A \Delta_B \rangle = \frac{1}{2} \langle [\Delta_A; \Delta_B] \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta_A \Delta_B + \Delta_B \Delta_A \rangle.$$

Dabei ist der erste Term der rechten Seite rein imaginär, der zweite Term rein reell. Deswegen kann man termweise den Betrag nehmen und quadrieren.

$$|\langle \Delta_A \Delta_B \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\langle [\Delta_A; \Delta_B] \rangle|^2 + \frac{1}{4} |\langle \Delta_A \Delta_B + \Delta_B \Delta_A \rangle|^2.$$

Da beide Terme größer als Null sind, kann man in die obige Ungleichung einsetzen:

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} |\langle [\Delta_A; \Delta_B] \rangle|^2 &\leq \frac{1}{4} |\langle [\Delta_A; \Delta_B] \rangle|^2 + \\ &\quad + \frac{1}{4} |\langle \Delta_A \Delta_B + \Delta_B \Delta_A \rangle|^2 \\ &\leq \langle \Delta_A^2 \rangle \langle \Delta_B^2 \rangle. \end{aligned} \tag{1}$$

Außerdem ist

$$[\Delta_A; \Delta_B] = [\mathbf{A}; \mathbf{B}].$$

Damit kann man schreiben

$$\frac{1}{4} |\langle [\mathbf{A}; \mathbf{B}] \rangle|^2 \leq \langle \Delta_A^2 \rangle \langle \Delta_B^2 \rangle.$$

Diese Beziehung heißt *Heisenbergsche Unschärferelation*. Sie besagt, daß man die Größen  $\mathbf{A}$  und  $\mathbf{B}$  je nur so genau bestimmen kann, daß das Produkt der Ungenauigkeit größer ist, als der Erwartungswert des Kommutators geteilt durch 4. Dieses Ergebnis ist unabhängig vom Zustand  $|\psi\rangle$ , über den keine Annahmen gemacht wurde.

Wenn der Kommutator zweier Operatoren gleich Null ist, so gibt die Unschärferelation keine Beschränkung einer möglichen Messung. Die Operatoren  $\mathbf{S}_z$  und  $\mathbf{S}^2$  vertauschen zum Beispiel, während  $[\mathbf{S}_x; \mathbf{S}_y] = -\frac{\hbar}{i} \mathbf{S}_z$ , also nicht gleichzeitig genau bestimmbar sind.

## 1.8 Verschränkte Zustände

Wenn wir zwei Spinsysteme ( $A$  und  $B$ ) gleichzeitig betrachten, so können wir diese üblicherweise als getrennte bzw. trennbare Systeme auffassen, man sagt auch, die Systeme seien *separabel*. Das Gesamtsystem drücken wir durch ein Produkt von Spins aus

$$|\mu\rangle_g = |\psi\rangle_A |\varphi\rangle_B.$$

Dies bedeutet, der Zustand des Gesamtsystems (gekennzeichnet durch den Zusatz  $g$ ) ist gegeben durch die Zustände der beiden Teilsysteme  $A$  und  $B$ , eben  $|\psi\rangle$  und  $|\varphi\rangle$ . So gibt es zum Beispiel folgende Zustände

$$\begin{aligned} |e_1\rangle_g &= |+\rangle_A |+\rangle_B \\ |e_2\rangle_g &= |+\rangle_A |-\rangle_B \\ |e_3\rangle_g &= |-\rangle_A |+\rangle_B \\ |e_4\rangle_g &= |-\rangle_A |-\rangle_B. \end{aligned}$$

Wendet man nun das Superpositionsprinzip (Axiom 1) an auf das gesamte System beschrieben durch die beiden

Komponenten  $A$  und  $B$ , so findet man, daß jede Kombination der vier Vektoren  $|e_i\rangle_g$  wieder ein möglicher Zustand des Gesamtsystems sein kann, z. B.

$$\begin{aligned} |\xi\rangle_g &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_2\rangle_g - |e_3\rangle_g) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_A|-\rangle_B - |-\rangle_A|+\rangle_B). \end{aligned} \quad (2)$$

Dieser Zustand ist in keiner Basis darstellbar als das Produkt<sup>4</sup> zweier Einzelzustände der Systeme  $A$  und  $B$ , was für die meisten Kombinationen gilt. Also sind  $A$  und  $B$  nicht mehr separabel, wenn das Gesamtsystem durch den Zustand  $|\xi\rangle_g$  beschrieben wird. Es gibt sehr viel mehr solche Kombinationen als Produktzustände der Form  $|\psi\rangle_A|\varphi\rangle_B$ . Es erscheint daher plausibel anzunehmen, daß diese *verschränkten Zustände* eher die Regel als die Ausnahme bilden.

Die Operatoren, die auf die verschränkten Zustände wirken, sind Kombinationen der Operatoren auf zu den einzelnen Zuständen. Es gibt z. B. den Zustand, der einer Messung des Spins in  $z$ -Richtung am System  $A$  entspricht

$$\mathbf{S}_z \otimes \mathbf{1}_B.$$

Der erste Operator wirkt auf den ersten Vektor, der zweite auf den zweiten Vektor, also

$$\begin{aligned} (\mathbf{S}_z \otimes \mathbf{1}_B)|\xi\rangle_g &= (\mathbf{S}_z \otimes \mathbf{1}_B) \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_A|-\rangle_B - |-\rangle_A|+\rangle_B) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [(+1)|+\rangle_A|-\rangle_B - (-1)|-\rangle_A|+\rangle_B] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_A|-\rangle_B + |-\rangle_A|+\rangle_B) \end{aligned}$$

Wie verhält sich nun ein solcher verschränkter Zustand, wenn Messungen vorgenommen werden? Man kann beispielsweise im Zustand  $|\xi\rangle_g$  den Spin des Systems  $A$  in  $z$ -Richtung messen. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, für diese Spinkomponente den Eigenwert  $+\hbar/2$  zu messen?

Die Bornsche Regel erlaubt es uns, die Wahrscheinlichkeit zu berechnen für das Auftreten eines bestimmten Ergebnis bei einer Messung des Gesamtsystems. Wenn wir nun nur die Wahrscheinlichkeit ausrechnen wollen, für das Auftreten von  $|+\rangle_A$ , so müssen wir die Wahrscheinlichkeiten berechnen, für alle möglichen Meßergebnisse am Gesamtsystem, bei denen der  $A$ -Spin den Wert  $+\hbar/2$  liefert. Eine Möglichkeit dafür ist, zu berechnen, wie groß die Wahrscheinlichkeit ist, das System im Zustand  $|+\rangle_A|+\rangle_B$  wiederzufinden, und diese mit der Wahrscheinlichkeit für  $|+\rangle_A|-\rangle_B$  zu addieren. Dies liegt daran, daß sich die Ereignisse  $|+\rangle_B$  und  $|-\rangle_B$  eine Basis des Spinraums von System  $B$  bilden.

Man berechnet also die Wahrscheinlichkeiten aus der Bornschen Regel (Axiom 3) und mit Gleichung (2)

$$\begin{aligned} P_1 &= |\langle +|_A \langle +|_B |\xi\rangle_g|^2 \\ &= \left| \langle +|_A \langle +|_B \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_A|-\rangle_B - |-\rangle_A|+\rangle_B) \right|^2 \\ &= \left| \langle +|_B \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle_B \right|^2 \\ &= 0 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} P_2 &= |\langle +|_A \langle -|_B |\xi\rangle_g|^2 \\ &= \left| \langle +|_A \langle -|_B \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_A|-\rangle_B - |-\rangle_A|+\rangle_B) \right|^2 \\ &= \left| \langle -|_B \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle_B \right|^2 \\ &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

so daß sich für die Wahrscheinlichkeit insgesamt ergibt

$$P_{ges} = P_1 + P_2 = \frac{1}{2}.$$

Dieses Ergebnis hätten wir auch mit völlig anderen Basisvektoren für den  $B$ -Raum erhalten.

## 1.9 Dynamik\*

In den Axiomen wird bereits geschrieben, daß der Operator, der der Observablen *Energie* zu geordnet ist, auch die Grundlage ist, um die Zeitentwicklung eines Systems zu beschreiben. Sei  $|\psi, t=0\rangle$  der Zustand eines Systems, dann gilt für den Zustand im Zeitpunkt  $t$

$$|\psi, t\rangle = \mathbf{U}_t |\psi, t=0\rangle.$$

Das bedeutet, die Veränderung der Zustände eines Systems wird durch den zugehörigen Zeitentwicklungsoperator beschrieben. Er ist, gemäß unseren Axiomen gegeben durch

$$\mathbf{U}_t = e^{-i\mathbf{H}t/\hbar}.$$

Der Hamiltonoperator  $\mathbf{H}$  ist der Operator zur Observablen Energie. Allgemein kann man an dieser Stelle eine Differentialgleichung ableiten, die uns die zeitliche Änderung eines Zustandes beschreibt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle = \mathbf{H} |\psi, t\rangle.$$

Dies ist die sogenannte Schrödingergleichung, die man aus dem Axiom über die Zeitentwicklung abgeleitet hat. Tatsächlich ist die Schrödingergleichung zu diesem Axiom äquivalent, hätte man also die Schrödingergleichung an den Anfang gesetzt, so hätte man den Zeitentwicklungsoperator daraus ableiten können. In diesem Sinne gibt es bislang keinen theoretischen Überbau, der es ermöglichen würde, die Bewegungsgleichungen der Quantenmechanik abzuleiten.

## 1.10 Nichtlokalität: Bellsche Ungleichungen

Die Aussagen der Quantenmechanik haben heftige Kritik ausgelöst, besonders die Konsequenzen der Verschränkung. Diese sieht nämlich Kopplungen zweier Teilsysteme zu einem Gesamtsystem vor, die in beliebiger Entfernung voneinander lokalisiert sind. Ein namhafter Gegner dieser Idee war Albert Einstein. Er hielt es für ausgeschlossen, daß Systeme über weite Strecken unmittelbar

<sup>4</sup>Mathematisch nennt man die Kombination zweier Vektorräume in der beschriebenen Weise ein *Tensorprodukt*.

miteinander wechselwirken. Seine Vorstellung war, daß die Physik eine lokale Theorie ist, bei der nur die direkte Umgebung (in Raum und Zeit) ein Ereignis beeinflussen kann. Wechselwirkungen breiten sich Einstein zufolge nur mit Lichtgeschwindigkeit aus.

Die Kopplung zwischen den beiden Spins in der Quantenmechanik ist jedoch instantan, also nicht die Folge eines Informationsaustausches bei oder nach der Messung. Deswegen schlug Einstein vor, daß solcherlei Systeme uns nur zufällig *erscheinen*. Tatsächlich gebe es *verborgene Variablen*, die die Meßergebnisse in alle drei Raumrichtungen exakt festlegen. Es wurde sogar ein Gedankenexperiment von Einstein vorgeschlagen, das unter dem Namen *Einstein-Podolski-Rosen-Paradoxon* berühmt geworden ist und das genau solche *Verschränkungen* als widersinniges Ergebnis der Quantenmechanik beschreibt. Einstein schloß daraus, die Quantenmechanik müsse erweitert oder verändert werden, um derartig sinnlose Aussagen zu vermeiden. Er schreibt selbst kurz vor seinem Tod 1955<sup>5</sup>:

Für die weitere Diskussion denke ich mir zwei Physiker *A* und *B*, die bezüglich des durch die  $\Psi$ -Funktion beschriebenen realen Zustandes eine verschiedene Auffassung vertreten.

A. Das einzelne System hat (vor der Messung) einen bestimmten Wert von  $q$  (bzw.  $p$ ) für alle Variablen des Systems, und zwar *den* Wert, der bei einer Messung dieser Variablen festgestellt wird. Ausgehend von dieser Auffassung wird er erklären: Die  $\Psi$ -Funktion ist keine erschöpfende Darstellung des realen Zustandes des Systems, sondern eine unvollständige Darstellung; sie drückt nur dasjenige aus, was wir auf Grund früherer Messungen über das System wissen.

B. Das einzelne System hat (vor der Messung) keinen bestimmten Wert von  $q$  (bzw.  $p$ ). Der Meßwert kommt unter Mitwirkung der ihm vermöge der  $\Psi$ -Funktion eigentümlichen Wahrscheinlichkeit erst durch den Akt der Messung zustande. Ausgehend von dieser Auffassung wird (oder wenigstens darf) er erklären: Die  $\Psi$ -Funktion ist eine erschöpfende Darstellung des realen Zustandes des Systems.

Nun präsentieren wir diesen beiden Physikern folgenden Fall. Es liege ein System vor, das zur Zeit  $t$  unserer Betrachtung aus zwei Teilsystemen  $S_1$  und  $S_2$  bestehe, die zu dieser Zeit räumlich getrennt und (im Sinne der klassischen Physik) ohne erhebliche Wechselwirkung sind. Das Gesamtsystem sei durch eine bekannte  $\Psi$ -Funktion  $\Psi_{12}$  im Sinne der Quantenmechanik vollständig beschrieben. Alle Quantentheoretiker stimmen nun im Folgenden überein. Wenn ich eine vollständige Messung an  $S_1$  mache, so erhalte ich aus den Meßresultaten und aus  $\Psi_{12}$  eine völlig bestimmte

$\Psi$ -Funktion  $\Psi_2$  des Systems  $S_2$ . Der Charakter von  $\Psi_2$  hängt dann davon ab, was *für eine Art* Messung ich an  $S_1$  vornehme. Nun scheint es mir, daß man von dem realen Sachverhalt des Teilsystems  $S_2$  sprechen kann. Von diesem realen Sachverhalt wissen wir vor der Messung an  $S_1$  von vornherein noch weniger als bei einem durch die  $\Psi$ -Funktion beschriebenen System. Aber an *einer* Annahme sollten wir nach meiner Ansicht unbedingt festhalten: Der reale Sachverhalt (Zustand) des Systems  $S_2$  ist unabhängig davon, was mit dem von ihm räumlich getrennten System  $S_1$  vorgenommen wird. Je nach Art der Messung, welche ich an  $S_1$  vornehme, bekomme ich aber ein andersartiges  $\Psi_2$  für das zweite Teilsystem ( $\Psi_2^1, \Psi_2^2, \dots$ ). Nun muß aber der Realzustand von  $S_2$  unabhängig davon sein, was an  $S_1$  geschieht. Für denselben Realzustand von  $S_2$  können also (je nach Wahl der Messung an  $S_1$ ) verschiedenartige  $\Psi$ -Funktion gefunden werden. (Diesem Schlusse kann man nur dadurch ausweichen, daß man entweder annimmt, daß die Messung an  $S_1$  den Realzustand von  $S_2$  (telepathisch) verändert, oder aber, daß man Dingen, die räumlich voneinander getrennt sind, unabhängige Realzustände überhaupt abspricht. Beides scheint mir ganz unakzeptabel.)

Wenn nun die Physiker *A* und *B* diese Überlegungen als stichhaltig annehmen, so wird *B* seinen Standpunkt aufgeben müssen, daß die  $\Psi$ -Funktion eine vollständige Beschreibung des realen Sachverhalts sei. Denn es wäre in diesem Falle unmöglich, daß demselben Sachverhalt (von  $S_2$ ) zwei verschiedenartige  $\Psi$ -Funktionen zugeordnet werden könnten.

Der Zustand zweier verschränkter Teilchen mit Spin kann in der Quantenmechanik wie oben angegeben (Gl. 2) aufgeschrieben werden als

$$|\xi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |+\rangle_A |-\rangle_B - |-\rangle_A |+\rangle_B \},$$

wobei  $|\pm\rangle$  die Eigenvektoren zu einer festgewählten Spinrichtung sind. Da aber keine Spinrichtung durch den Zustand ausgezeichnet sein soll, zeigt sich, daß dieser Zustand dieselbe Form bezüglich *jeder beliebigen* Koordinatenachse besitzt.

Der Ausdruck (2) bedeutet: Mißt man den Spin in einer Richtung an Teilchen *A*, so wird eine Messung in der gleichen Richtung an Teilchen *B* immer den entgegengesetzten Spinwert ergeben. Insgesamt kann man aber mit je 50% annehmen, daß *A* in  $|+\rangle_A$  oder  $|-\rangle_A$  ist. Dieser Zusammenhang ist unabhängig davon wie weit Teilchen *A* von *B* entfernt ist, vorausgesetzt, sie haben einmal den verschränkten Zustand  $|\xi\rangle$  angenommen!

Man faßt die möglichen Situationen zusammen, wobei man annimmt, daß ein Beobachter *A* das System (Teilchen) mit Index *A* beobachten möge und umgekehrt ein Beobachter *B* das Teilchen *B* beobachte.

<sup>5</sup>ALBERT EINSTEIN: *Autobiographisches*, hrsg. von A. Schilpp, La Salle and Chicago 1979.

1. Wenn  $A$  nicht mißt, sind die Ergebnisse von  $B$  völlig zufällig.
2. Wenn  $A$  in  $z$ -Richtung mißt, sind die Ergebnisse von  $B$  in  $z$ -Richtung immer genau entgegengesetzt.
3. Wenn  $A$  in  $z$ -Richtung mißt, sind die Ergebnisse von  $B$  in  $x$ - und  $y$ -Richtung völlig zufällig.

Es werden alle möglichen Situationen gezeigt, wenn die beiden nur in  $z$ - und  $x$ -Richtung messen.

A		B	
Richtung	Ergebnis	Richtung	Ergebnis
z	+	x	+
z	+	x	-
z	+	z	-
z	-	x	+
z	-	x	-
z	-	z	+
x	+	x	-
x	+	z	+
x	+	z	-
x	-	x	+
x	-	z	+
x	-	z	-

Es zeigt sich hierbei, daß die Wahrscheinlichkeiten dessen, was der Beobachter  $B$  mißt davon abhängen, ob und welche Messung  $A$  vornimmt. Das Teilchen  $B$  „weiß“ also, was  $A$  mißt. Die quantenmechanische Interpretation dieses Sachverhaltes ist, daß eine Messung an einem verschränkten Zustand immer eine Messung am Gesamtsystem bedeutet. Dieses ist nicht zerlegbar in einzelne Teile. Dies ist eine fundamentale Abkehr von der klassischen Physik, deren Annahme der Lokalität in Raum und Zeit auch eine Voraussetzung für die *reduktionistische Methode* ist: Nach dem Weltbild der klassischen Physik ist die Welt verstehbar, in dem man sie in immer kleinere und übersichtlichere Teile zerlegt. Diese Vorgehensweise hat sich in der Tat vielfältig bewährt, stößt jedoch in der Quantenmechanik an ihre Grenzen. Im übrigen gab es auch im Rahmen der klassischen Physik die Erkenntnis, daß der Reduktionismus seine Schwächen hat. Diese Einsicht verbindet sich mit der *Chaostheorie*, die jedoch am Beginn des 20. Jahrhunderts nur in einigen wenigen Fällen ihre Wirkung zeigte und in ihrer Problematik erst nach 1950 erkannt wurde.

Die Forderung Einsteins, Physik müsse in jedem Fall eine lokale Beschreibung der Welt ermöglichen, war langezeit als ein rein philosophischer Vorbehalt betrachtet worden. 1964 gelang es jedoch J. S. Bell, aus der Annahme der Lokalität die nach ihm benannten *Bellschen Ungleichungen* abzuleiten, die eine experimentelle Überprüfung der Annahmen Einsteins zulassen. Im Beispiel mit einem Paar Teilchen, die bei einer Elementarteilchenreaktion erzeugt werden und deren Gesamtspin Null ist, hat das folgende Konsequenzen.

Nimmt man an, es könne jedes Teilchen bezüglich seiner Komponenten in  $x$ - und  $z$ -Richtung klassifiziert werden. Ein Teilchen der Art  $(x+, z-)$  ergibt bei Messung von  $S_x$  mit Sicherheit  $+$ , bei Messung von  $S_z$  mit Sicherheit  $-$ . Dies ändert nichts daran, daß man immer nur eine

Komponente wirklich messen kann, da in der Messung die Information über die andere Komponente durch den Meßvorgang verloren geht. Da der Gesamtspin von Teilchen  $A$  und  $B$  Null sein soll, müssen sich folgende Paare bilden lassen

$$\begin{array}{ll}
 A & B \\
 (x+, z+) & \leftrightarrow (x-, z-) \\
 (x+, z-) & \leftrightarrow (x-, z+) \\
 (x-, z+) & \leftrightarrow (x+, z-) \\
 (x-, z-) & \leftrightarrow (x+, z+)
 \end{array}$$

Da keine Richtung bevorzugt werden soll, nimmt man an, daß diese Teilchenpaare je mit der Wahrscheinlichkeit von 25% auftreten. In dieser Formulierung ist bereits die wichtigste Eigenschaft der Argumentation Einsteins angelegt: Unter der Bedingung, daß jedes Teilchen zu einer der hier aufgeführten Klassen gehört, ist das Messergebnis von  $B$  unabhängig davon, welche Messung  $A$  durchgeführt hat. Dies ermöglicht es, auf eine Verbindung der Teilchen zu einem Gesamtsystem zu verzichten.

Nun können der Beobachter  $A$  und  $B$  nicht nur in Richtung der Koordinatenachsen messen. Sie können auch in beliebigen Raumrichtungen messen, wir nennen diese hier  $a, b$  und  $c$ . Durch diese drei Raumrichtungen, die nicht senkrecht aufeinander stehen müssen, können die Teilchen nun wieder charakterisiert werden, zum Beispiel das  $A$ -Teilchen als  $(a+, b-, c+)$ , was bedeutet, daß eine Spinnmessung in  $a$ -Richtung das Ergebnis  $+$  liefern wird, eine Messung in  $b$ -Richtung aber das Ergebnis  $-$ . Wegen des Gesamtspins Null muß auf jeden Fall aber  $B$  vom Typ  $(a-, b+, c-)$  sein. Man nimmt nun an, daß man viele Teilchenpaare ( $N$  Stück) hat, die so charakterisiert werden können und schreibt jeweils die Anzahl  $N_i \leq N$  auf, mit der dieser Typ Teilchen vertreten ist.

Anzahl	Teilchen A	Teilchen B
$N_1$	$(a+, b+, c+)$	$(a-, b-, c-)$
$N_2$	$(a+, b+, c-)$	$(a-, b-, c+)$
$N_3$	$(a+, b-, c+)$	$(a-, b+, c-)$
$N_4$	$(a+, b-, c-)$	$(a-, b+, c+)$
$N_5$	$(a-, b+, c+)$	$(a+, b-, c-)$
$N_6$	$(a-, b+, c-)$	$(a+, b-, c+)$
$N_7$	$(a-, b-, c+)$	$(a+, b+, c-)$
$N_8$	$(a-, b-, c-)$	$(a+, b+, c+)$

Nimmt man nun an, Beobachter  $A$  mißt in  $a$  Richtung ein  $+$ , Beobachter  $B$  in  $b$ -Richtung ebenfalls ein  $+$ . Dann war das entsprechende Teilchen vom Typ 3 oder 4. Die Wahrscheinlichkeit dieses Meßergebnisses ist

$$P(a+, b+) = \frac{N_3 + N_4}{N}.$$

Da alle  $N_i > 0$  sind, gilt

$$N_3 + N_4 \leq (N_3 + N_7) + (N_4 + N_2),$$

damit folgt

$$P(a+, b+) \leq P(a+, c+) + P(c+, b+),$$

die *Bellsche Ungleichung*.

Diese Ungleichung basiert auf der Klassifizierung der Zustände mit festgelegten Eigenschaften. Die Quantenmechanik beschreibt das System jedoch anders, nämlich mit dem Zustand (2):

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_A |-\rangle_B - |-\rangle_A |+\rangle_B).$$

Daraus lassen sich die Wahrscheinlichkeiten, die in der Bellschen Ungleichung auftauchen, im Rahmen der Quantentheorie berechnen, wie es oben bereits getan wurde (1). Man nimmt an,  $a, b, c$  liegen in einer Ebene. Der Winkel zwischen der  $a$ - und der  $c$ -Richtung sei  $\vartheta$ , der zwischen  $b$  und  $c$  sei ebenfalls  $\vartheta$ , der zwischen  $a$  und  $b$  ist dann  $2\vartheta$ . Ein Teilchen, das von  $A$  + gemessen wurde, ist im Eigenzustand  $|a; +\rangle$ . Wegen der Spinsumme ist das Teilchen  $B$  dann im Zustand  $|a; -\rangle$ .

$$P(a+, b+) = \frac{1}{2} \sin^2(\vartheta)$$

in Abwandlung von (1). Der Faktor  $1/2$  trägt der Wahrscheinlichkeit Rechnung, daß  $A$  in  $a$ -Richtung + mißt. Und

$$P(a+, c+) = P(c+, b+) = \frac{1}{2} \sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right).$$

Für  $0 < \vartheta < \frac{\pi}{2}$  ist die Bellsche Ungleichung im Rahmen

der Quantenmechanik verletzt

$$\sin^2(\vartheta) \leq 2 \left(\frac{\vartheta}{2}\right),$$

zum Beispiel für  $\vartheta = \pi/4$

$$0,5 \stackrel{?}{\leq} 0,3$$

Dieser Widerspruch wird auch experimentell bestätigt: Tatsächlich wird dazu meist die Polarisation von Photonen betrachtet, da diese leichter meßbar ist als der Spin. In allen Experimenten wurde eine Verletzung der Bellschen Ungleichung festgestellt. Daraus kann man schließen, daß die Argumentation, die zur Bellschen Ungleichung führte, fehlerhaft ist. Freilich kann man dann an unterschiedlichen der gemachten Annahmen zweifeln. Der übliche und verbreitetste Schluß ist die Annahme der Lokalität zu „opfern“: Das quantenmechanische System ist nicht zerlegbar, sondern ein Gesamtsystem. Dies bedeutet aber nicht, daß die Teile des Systems auf verborgene Weise miteinander kommunizieren, wie es die Bohmsche Theorie formulieren würde. Vielmehr gibt man die Vorstellung auf, das System enthalte mehr Eigenschaften, als die Quantenmechanik erfaßt. Das bedeutet, man schränkt die Vorstellung von objektiv vorliegenden Eigenschaften ein.