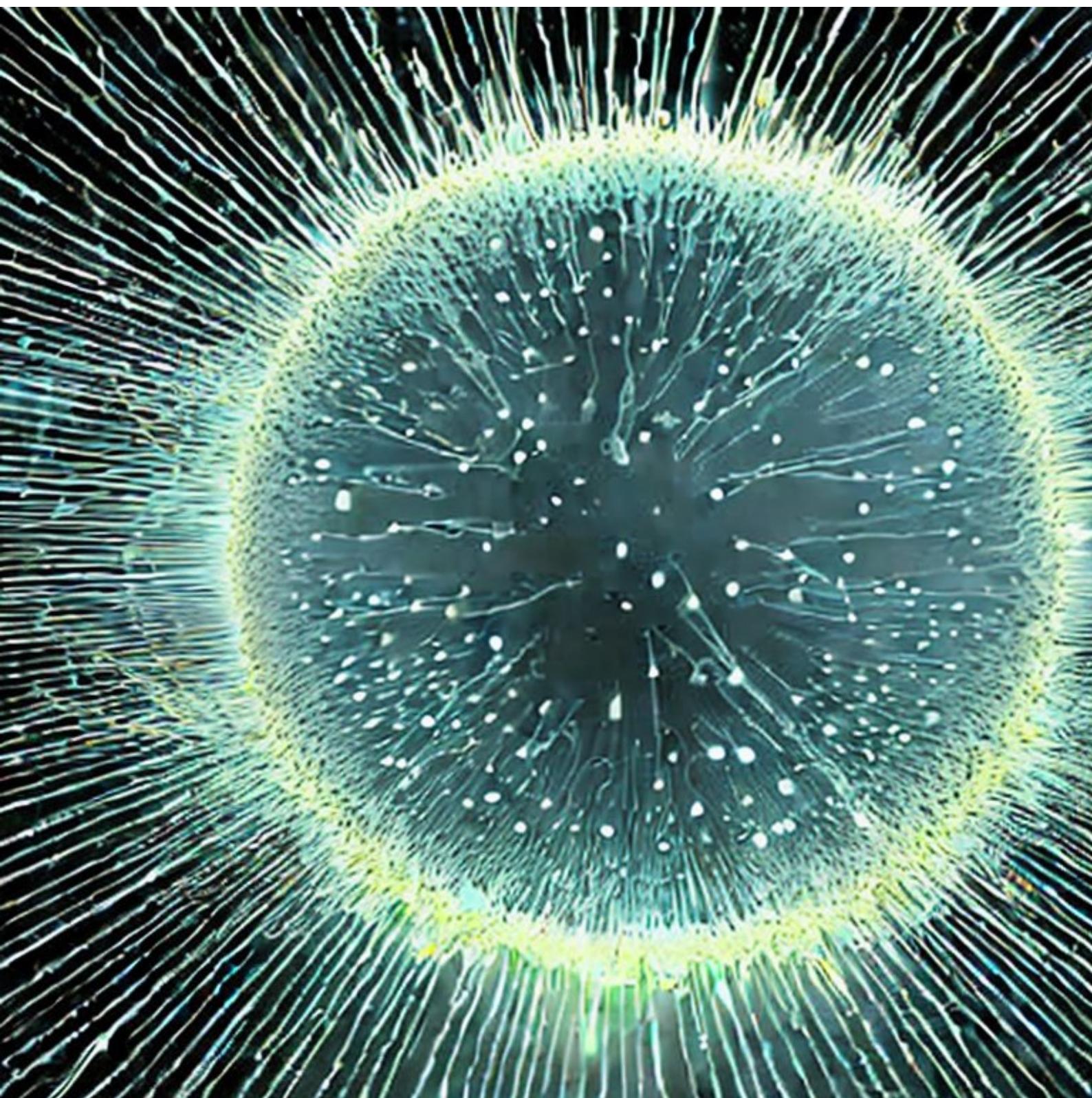


Stochastische Mechanik und Quantenmechanik

Kompendium der stochastischen Interpretation der Quantenmechanik



Michael Rudschuck

michael.rudschuck@vde.com / Version: 18. Juli 2025, Rev. 0.5

STOCHASTISCHE MECHANIK UND QUANTENMECHANIK 0.5

Dr. Michael Rudschuck
michael.rudschuck@vde.com

Copyright © Michael Rudschuck 2010 – 2025

Aktuelle Updates dieses Dokuments finden sich unter:

<https://github.com/Rudschuck/Stochastic-Mechanics-and-Quantum-Mechanics/>

Dieses Werk steht unter der CCPL-Lizenz (<http://de.creativecommons.org/>):

Sie dürfen: das Werk bzw. den Inhalt vervielfältigen, verbreiten und öffentlich zugänglich machen Abwandlungen und Bearbeitungen des Werkes bzw. Inhaltes anfertigen das Werk kommerziell nutzen

Zu den folgenden Bedingungen: *Namensnennung* — Sie müssen den Namen des Autors/Rechteinhabers in der von ihm festgelegten Weise nennen.

Weitergabe unter gleichen Bedingungen — Wenn Sie das lizenzierte Werk bzw. den lizenzierten Inhalt bearbeiten oder in anderer Weise erkennbar als Grundlage für eigenes Schaffen verwenden, dürfen Sie die daraufhin neu entstandenen Werke bzw. Inhalte nur unter Verwendung von Lizenzbedingungen weitergeben, die mit denen dieses Lizenzvertrages identisch oder vergleichbar sind.

Wobei gilt: *Verzichtserklärung* — Jede der vorgenannten Bedingungen kann aufgehoben werden, sofern Sie die ausdrückliche Einwilligung des Rechteinhabers dazu erhalten.

Public Domain (gemeinfreie oder nicht-schützbare Inhalte) — Soweit das Werk, der Inhalt oder irgendein Teil davon zur Public Domain der jeweiligen Rechtsordnung gehört, wird dieser Status von der Lizenz in keiner Weise berührt.

Sonstige Rechte — Die Lizenz hat keinerlei Einfluss auf die folgenden Rechte:

- Die Rechte, die jedermann wegen der Schranken des Urheberrechts oder aufgrund gesetzlicher Erlaubnisse zustehen (in einigen Ländern als grundsätzliche Doktrin des fair use etabliert);
- Das Urheberpersönlichkeitsrecht des Rechteinhabers;
- Rechte anderer Personen, entweder am Lizenzgegenstand selber oder bezüglich seiner Verwendung, zum Beispiel für Werbung oder Privatsphärenschutz.

Hinweis — Im Falle einer Verbreitung müssen Sie anderen alle Lizenzbedingungen mitteilen, die für dieses Werk gelten.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1-1
2 Stochastische Mechanik	2-1
3 Kernaussagen und Interpretationen der Quantenmechanik	3-1
3.1 Erkenntnistheorie und Interpretationen	3-6
3.2 Interpretationen der Quantenmechanik	3-11
3.2.1 Stochastische Mechanik	3-21
4 Einführung	4-1
4.1 Geschichtlicher Abriß der Quantenmechanik	4-1
5 Herleitung der Quantenmechanik aus der Theorie statistischer Systeme	5-1
5.1 Beschreibung stochastischer klassischer Systeme von Punktmassen	5-1
5.1.1 Definition eines stochastischen Systems	5-2
5.1.2 Einsteins Gesetz für das mittlere Verschiebungsquadrat einer Punktmasse unter Wirkung stochastischer Kräfte eines Einbettungs-Mediums endlicher Zähigkeit	5-2
5.1.3 Die Fokker-Planck-Gleichung	5-11
5.1.4 Die Navier-Stokes-Gleichung	5-18
5.2 Übergang zur Quantenmechanik — Herleitung der zeitabhängigen Schrödingergleichung	5-26
5.2.1 Die Ehrenfestschen Sätze	5-36
6 Systematischer Aufbau der Quantenmechanik	6-1
6.1 Postulate der Quantenmechanik	6-1
6.1.1 Korpuskularstatistische Deutung	6-1
6.2 Das Prinzip extremaler Gesamtenergie und die zeitunabhängige Schrödingergleichung	6-6
6.3 Die Impulsdarstellung der Schrödingergleichung	6-10
6.4 Das Wasserstoffatom	6-13
6.4.1 Gebundene Zustände des Wasserstoffatoms	6-13
6.4.2 Zur Entartung der Wasserstoff-Eigenzustände	6-33
6.5 Das quantenmechanische Einteilchensystem bei Anwesenheit eines Magnetfeldes	6-83
6.5.1 Das Wasserstoffatom im homogenen Magnetfeld	6-91
7 Der Teilchenspin	7-1
7.0.1 Die Cayley-Kleinschen Parameter und die Paulischen Spinmatrizen	7-5
8 Quantenmechanik nichtrelativistischer Mehrteilchensysteme	8-1
8.1 Die Schrödingergleichung für N wechselwirkende nichtrelativistische Teilchen	8-1
8.2 N nichtwechselwirkende Teilchen	8-1
8.3 Das Pauli-Prinzip	8-1

8.4 Das Hartreesche Näherungsverfahren zur Bestimmung der N-Teilchen-Wellenfunktion	8-1
8.5 Antisymmetrisierung der Wellenfunktion. Slater-Determinante und Entwicklungen nach Slater-Determinanten (CI-Entwicklung)	8-1
8.6 Das Näherungsverfahren von Hartree und Fock	8-2
8.7 Zusammenhang zwischen der Gesamtenergie und den Einteilchenenergien	8-2
8.8 Das Theorem von Koopmans	8-2
9 Störungstheorie	9-1
9.1 Diracsche Störungstheorie. Fermis „Goldene Regel“ der Quantenmechanik	9-1
9.2 Zeitabhängige Störungsrechnung 2. Ordnung	9-1
9.3 Schrödingersche (zeitunabhängige) Störungstheorie	9-1
9.4 Zeitunabhängige Störungstheorie bei Anwesenheit von Entartungen	9-1
9.5 Aufspaltung von zwei miteinander entarteten Zuständen in einem Störpotential	9-1
10 Das statistische Atommodell von Thomas und Fermi	10-1
10.1 Die Thomas-Fermi-Dirac-Methode	10-1
11 Das Periodensystem der Elemente	11-1
11.1 Die Greensche-Funktion einer linearen Differentialgleichung 2. Ordnung und das Additivitätstheorem der Kugelflächenfunktionen	11-1
11.2 Der Schalenaufbau der Atome	11-1
12 Elastische Streuung (Potentialstreuung) von Teilchen an Streuzentren	12-1
12.1 Die Bornsche Reihe	12-1
12.2 Entwicklung einer ebenen Welle nach Kugelwellen steigender Ordnung	12-1
12.3 Die Faxen-Holtsmark-Formel für die Streuung eines Teilchens an einem Potential endlicher Reichweite	12-1
12.4 Totaler und differentieller Wirkungsquerschnitt eines Streupotentials	12-1
12.5 Streuphasen	12-1
12.6 Streuung am Yukawa-Potential — Die Rutherford-Formel	12-2
13 Die Feinstruktur der optischen Spektren	13-1
13.1 Der Effekt der Spin-Bahnkopplung — Optische Dubletts	13-1
13.2 Der anormale Zeeman-Effekt	13-1
13.3 Der Paschen-Back-Effekt	13-1
14 Phänomeologische Physik des Vakuums	14-1
14.1 Einleitung	14-1
14.2 Exkurs — Klassisches Vakuum	14-2
14.2.1 Die Entdeckung des Vakuums	14-2
14.3 Physikalisches Vakuum	14-3
14.3.1 Vakuumfluktuationen	14-3
14.3.2 Klassische Theorie der Hohlkörperstrahlung	14-6
15 Einführung in die Stochastik	15-1
15.1 Physikalische Messungen	15-1
15.1.1 Messunsicherheiten	15-4

15.2 Brownsche Molekularbewegung	15-8
15.2.1 Beschreibung der Diffusion nach Einstein	15-9
15.2.2 Beschreibung der Diffusion nach Langevin	15-11
15.3 Einige Begriffe und Definitionen aus der Wahrscheinlichkeitsrechnung	15-13
15.4 Grundlagen der Wahrscheinlichkeitsrechnung	15-18
15.4.1 Axiome der wahrscheinlichkeitsrechnung	15-19
15.4.2 Zufallsvariablen	15-19
15.4.3 Multivariante und bedingte Wahrscheinlichkeiten	15-20
15.4.4 Momente und momente-erzeugende Funktionen	15-21
15.5 Einige wichtige Verteilungsfunktionen	15-23
15.5.1 Die Gaußsche Verteilung	15-23
15.6 Ergodische Prozesse	15-28
15.7 Markow-Prozesse	15-30
15.8 Homogenität und Stationarität	15-34
15.9 Autokorrelationsfunktionen	15-35
15.9.1 Lineares Regressionstheorem	15-35
15.10 Beispiele für differenzielle Chapman-Kolmogorow-Gleichungen	15-36
15.10.1 Sprungprozesse	15-36
15.10.2 Die Fokker-Planck-Gleichung	15-37
15.11 Wiener-Prozess	15-38
15.11.1 Autokorrelationsfunktion	15-40
15.12 Ornstein-Uhlenbeck-Prozess	15-40
15.13 Stochastische Differentialgleichungen	15-42
15.13.1 Gaussian Weißes Rauschen	15-42
15.13.2 Itô-Stochastische Differentialrechnung	15-45
15.14 Implizite und explizite stochastische Gleichungen	15-47
15.14.1 Nicht-Gaussches nicht-weißes Rauschen	15-47
15.15 Stochastische Differentialgleichungen	15-53
15.15.1 Die Verbindung zur Fokker-Planck-Gleichung	15-53
15.16 Ausgewählte Beispiele	15-54
15.16.1 Lineares, weißes Rauschen	15-54
15.16.2 Multiplikatives lineares weißes Rauschen	15-55
15.17 Der Ornstein-Uhlenbeck-Prozess	15-56
15.17.1 Multivariater Ornstein-Uhlenbeck-Prozess	15-57
16 Sprungprozesse	16-1
16.1 Zufallsbewegung in einer Dimension	16-1
16.1.1 Kontinuierlicher Raum- und Zeitgrenzwert	16-2
16.2 Poisson-Prozess	16-2
16.3 Geburt-Tod-Mastergleichungen	16-3
16.4 Näherungsmethoden für große Systeme	16-4
16.4.1 Mastergleichung für viele Spezies	16-4
16.4.2 Fokker-Planck-Näherung	16-5
16.4.3 Ornstein-Uhlenbeck-Näherung	16-6
16.4.4 Ein Beispiel	16-7

17 Antworten zu ausgewählten Themen	17-1
17.0.1 Determinismus und Indeterminismus	17-1
17.1 Verschränkung	17-2
17.1.1 Kopplung an die Umgebung	17-5
17.1.2 Stabilität von Atomen	17-5
17.1.3 Zusammenhang zwischen den statistischen Vakuumkräften und den Schwankungen der Energie um ihren klassischen Erhaltungswert	17-13
17.1.4 Tunneleffekt	17-19
17.1.5 Wellenförmige Struktur der Wahrscheinlichkeitsdichten für Teilchen in Potentialen	17-19
17.1.6 Teilchen in der Quantenmechanik	17-21
17.1.7 Identische Teilchen in der Quantenmechanik	17-22
17.1.8 Der Spin – Phänomenologische Beschreibung	17-22
17.1.9 Hydrodynamische Analoga der Quantenmechanik	17-39
17.1.10 Obervablen	17-43
18 Kritik an der Stochastischen Mechanik	18-1
18.1 Die Stochastische Mechanik als phänomenologische Theorie	18-1
19 Quantencomputing	19-1
19.1 Die Ontologie des Quantencomputings	19-3
19.2 Quantencomputer auf Basis des „Quantum Annealing“	19-6
19.3 Paradigmenwechsel	19-9
19.3.1 Physikalische Probleme des Quantencomputings	19-10
19.3.2 Technologische Barrieren	19-11
20 Giftschrank der Quantenmechanik	20-1
20.1 Schrödinger Katze	20-7
20.2 Vakuumenergiemaschinen	20-8
21 Literatur	21-1
21.0.1 Weiterführende Literatur	21-1
Stichwortverzeichnis	21-28

Vorwort:

Die vorliegende Zusammenfassung *Stochastische Mechanik* beruht auf einer Vorlesungsmitschrift der Vorlesungen *Quantenmechanik I* und *Quantenmechanik II*, im WS 95 und SS 96 an der TU Clausthal von Prof. Dr. Lothar Fritzsche gehalten wurden. Im Rahmen dieser Vorlesung wurde die Quantenmechanik über die klassische Mechanik hergeleitet.

Dieses Skript zeigt wertfrei die Herleitung der Quantenmechanik aus der klassischen Mechanik als eine von vielen Ansätzen.

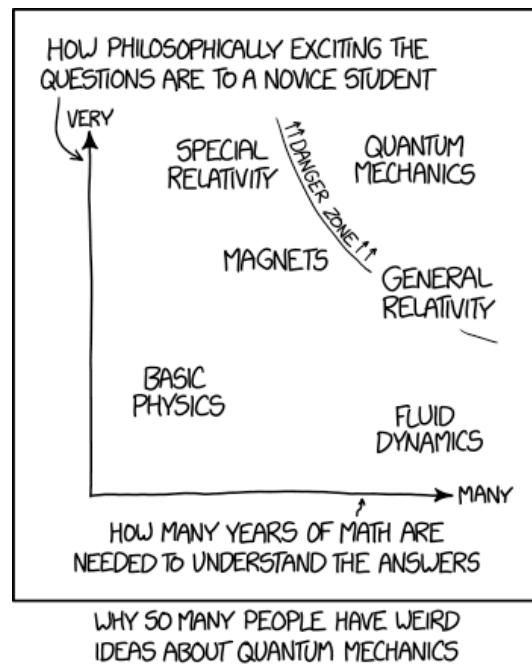
Die stochastische Mechanik ist eine Interpretation der Quantenmechanik. Interessanterweise wird dabei aber nur eine Annahme zu ihrer Herleitung benötigt. Dies ist die Existenz von Fluktuationen des elektromagnetischen Feldes im Vakuum. Setzt man solche Fluktuationen voraus, so lassen sich die Ergebnisse der Quantentheorie reproduzieren, ohne Quantentheorie zu benutzen. So lässt sich zum Beispiel mit der stochastischen Mechanik der Partikelspin ebenso erklären wie die Lage der Energieniveaus der H̄llenelektronen in der Atomphysik. Weiterhin wird hier ebenso das lange bekannte Problem der Strahlungsemission der bewegten Elektronen gelöst. Alle aus der Quantenmechanik bekannten Aussagen lassen sich im Rahmen der stochastischen Mechanik direkt reproduzieren, ohne den Formalismus der Quantenmechanik zu bemühen.

Fairerweise muss man allerdings auch sagen, dass die Stochastische Mechanik nur eine von vielen Interpretationen der Quantenmechanik ist. Allerdings besticht sie zur einen sehr intuitiven Zugang über die klassische Mechanik.

Ich möchte die Gelegenheit nutzen, um meinen aufrichtigen Dank an all diejenigen auszusprechen, die zur Entwicklung dieses Kompendiums beitragen. Ja, der Präsenz ist gewollt. Dieses Kompendium ist nicht abgeschlossen, sondern wird von mir kontinuierlich weitergeführt. Ziel ist es nicht ein allumfassendes Lehrbuch zu erschaffen, sondern meine Ideen, Anmerkungen, Kritiken zur Stochastischen Mechanik zu bündeln.

Rüsselsheim, 2025

Michael Rudschuck



Der obligatorische xkcd [\(link\)](#).

1 Einleitung

Die Quantenmechanik ist zweifellos eine der faszinierendsten und herausforderndsten Theorien in der Physik. Seit ihrer Entwicklung zu Beginn des 20. Jahrhunderts hat sie unser Verständnis der Natur auf fundamentalste Weise verändert und zahlreiche technologische Innovationen ermöglicht, die unser tägliches Leben prägen. Von der Elektronik über die Medizin bis hin zur Kryptographie hat die Quantenmechanik in fast jedem Bereich der Wissenschaft und Technologie Anwendungen gefunden.

Dieses Kompendium bietet eine umfassende Einführung in die Grundlagen der Quantenmechanik sowie fortgeschrittene Konzepte und Anwendungen. Es richtet sich an Studenten und Wissenschaftler, die sich mit den grundlegenden Prinzipien und mathematischen Methoden der Quantenmechanik vertraut machen möchten, sowie an Ingenieure und Techniker, die ein tieferes Verständnis für die zugrunde liegende Physik benötigen, um moderne Technologien zu entwickeln und zu verbessern.

Wir beginnen mit einer historischen Einführung, die die Entwicklung der Quantenmechanik von ihren Anfängen bis hin zu ihren modernen Anwendungen beleuchtet. Dabei werden wichtige Experimente und Entdeckungen diskutiert, die zur Entstehung dieser Theorie geführt haben, sowie die Schlüsselkonzepte und Denkweisen der Pioniere wie Max Planck, Albert Einstein, Niels Bohr, Werner Heisenberg, Erwin Schrödinger und anderen.

Anschließend behandeln wir die mathematischen Grundlagen der Quantenmechanik, einschließlich der Wellenfunktion, der Schrödinger-Gleichung und ihrer Lösungsmethoden. Wir erklären die Bedeutung von Observablen, Operatoren und Eigenwerten und zeigen, wie diese Konzepte in der Quantenmechanik angewendet werden, um physikalische Größen zu beschreiben und zu messen.

Keine andere physikalische Theorie hat eine vergleichbare Dringlichkeit für eine Interpretation wie die Quantenmechanik, weder heute noch in der Vergangenheit. Ähnlich intensiv wie bei der Quantenmechanik wurde nur bei der Speziellen Relativitätstheorie versucht, den Inhalt durch erklärende Deutungen zu ergänzen. Im Gegensatz zur Relativitätstheorie gibt es jedoch eine Vielzahl von Interpretationsschulen für die Quantenmechanik, die sich mit den ungewöhnlichen Konsequenzen auseinandersetzen.

Die besondere Rolle der Quantenmechanik ergibt sich aus mehreren Gründen:

- Die fundamentale Bedeutung für das physikalische Weltbild vonheute.
- Die Notwendigkeit, den Formalismus interpretativ zu erschließen, aufgrund des grundlegenden, mathematischen Charakters der Quantentheorie.
- Die Existenz verschiedener, parallel existierender Interpretationsansätze, die den besonderen Charakter der Quantenmechanik ausmachen.

Dabei machen die folgenden Punkte den besonderen Charakter der Quantenmechanik bzw. der entsprechenden Interpretationen aus:

- Ein hoher mathematischer Abstraktionsgrad, der bereits in der Verwendung von Grundbegriffen der Quantenmechanik deutlich wird, welche der Alltagswelt neu oder zumindest ungewohnt sind. Dazu gehören Konzepte wie Zustand und Zustandsfunktion sowie Observable, die in ihrem Verständnis von der klassischen Physik abweichen.
- Die Quantenmechanik erfordert einen umfangreichen mathematischen Apparat, ohne den sie nicht adäquat formuliert werden kann. Dies beinhaltet den funktionalanalytischen Hilbert-Raum-Kalkül, der es ermöglicht, Vektoren oder Strahlen als Zustandsfunktionen und Zustände zu repräsentieren, während lineare Operatoren die Observablen darstellen.
- Die Aussagen und Ergebnisse, die aus dem quantenmechanischen Kalkül abgeleitet werden können, sind mitunter eingeschränkt. Dies manifestiert sich vor allem in ihrer Natur als Wahrscheinlichkeitsaussagen. Die damit verbundenen Unschärferelationen und der Welle-Teilchen-Dualismus stellen einen deutlichen Bruch mit den grundlegenden Konzepten der klassischen Physik dar und sind teilweise schwer intuitiv erfassbar, was eine vertiefte Erklärung erforderlich macht.

2 Stochastische Mechanik

Die stochastische Mechanik kann als eine Art Verallgemeinerung des theoretischen Schemas der klassischen Mechanik betrachtet werden. Die klassischen deterministischen Trajektorien werden durch zufällige Trajektorien gut definierter stochastischer Prozesse ersetzt. Unter geeigneten Bedingungen und für eine große Klasse von dynamischen Systemen zeigen die Grundgleichungen der stochastischen Mechanik eine überraschende Verbindung zu den Grundgleichungen der Quantenmechanik. Dann ist es möglich, ein geeignetes Schema der physikalischen Interpretation zu entwickeln, so dass der phänomenologische Inhalt der stochastischen Mechanik mit dem phänomenologischen Inhalt der Quantenmechanik übereinstimmt, soweit alle experimentell beobachtbaren Effekte betroffen sind. Die stochastische Mechanik bietet also einen Ansatz zur Quantisierung dynamischer Systeme, der auf Methoden der Wahrscheinlichkeitstheorie und stochastischer Prozesse beruht. Dieser Ansatz unterscheidet sich völlig von dem traditionellen Ansatz, der auf Operatormethoden beruht. Vom physikalischen Standpunkt aus ist er jedoch völlig gleichwertig, wenn das richtige physikalische Interpretationsschema verwendet wird.

Die Grundlagen der stochastischen Mechanik wurden 1966 von Edward Nelson gelegt, ausgehend von früheren Ideen von Fenyves, Weizel und anderen. Die ursprüngliche Formulierung von Nelson beruht auf zwei Grundhypthesen. Die erste geht davon aus, dass die Trajektorien des dynamischen Systems durch eine zugrunde liegende Brownsche Bewegung gestört werden. Bewegung gestört werden. Die zweite ist eine besondere Form des zweiten Prinzips der Dynamik, bei der die klassische Beschleunigung durch eine geeignete Form der stochastischen Beschleunigung ersetzt wird. Weiterentwicklungen der Theorie zeigen, dass die Grundgleichung der stochastischen Mechanik aus Variationsprinzipien abgeleitet werden kann, und zwar in volliger Analog zur klassischen Mechanik kann die Grundgleichung der stochastischen Mechanik aus Variationsprinzipien abgeleitet werden, die auf derselben klassischen Aktion basieren, aber stochastisch gestörte Trajektorien als Versuchstrajektorien verwenden. Unter Aus dieser Sicht ist die stochastische Mechanik als eine Art stochastische Verallgemeinerung eng mit der klassischen Mechanik verwandt.

Andererseits können die Grundgleichungen der stochastischen Mechanik, d.h. eine Kontinuitätsgleichung und eine Gleichung vom Typ Hamilton-Jacobi (Madelung-Gleichung), können unmittelbar mit der Schrödinger-Gleichung der Quantenmechanik verbunden werden, indem man eine einfache Transformation vom Typ der von De Broglie eingeführt wurde. Außerdem lässt sich die gesamte Operatorstruktur der quantenmechanischen Algebra der Beobachtungsgrößen leicht aus der allgemeinen Struktur der stochastischen Mechanik ableiten. Daher gibt es auch eine

starke Verbindung zwischen der stochastischen Mechanik und der Quantenmechanik. Unter diesem Gesichtspunkt kann die stochastische Mechanik als eine Art probabilistische Simulation der Quantenmechanik betrachtet werden.

In der ursprünglichen Formulierung von Nelson aus dem Jahr 1966 finden sich auch die Grundzüge der Äquivalenz zwischen der stochastischen Mechanik und der Quantenmechanik, bis hin zu den Auswirkungen der physikalischen Interpretation. Diese Äquivalenz ist durch die Forschung der letzten Jahre bestätigt worden. Es sollte jedoch angemerkt werden, dass die stochastische Mechanik einige Merkmale aufweist, die im Prinzip innerhalb des vorgeschlagenen theoretischen Schemas potenziell beobachtbar sind, die aber keine Entsprechung in der Struktur der effektiven physikalischen Beobachtbarkeit im Rahmen der konventionellen Interpretation der Quantenmechanik keine Entsprechung finden. Daher scheint es völlig offen das Problem, zu entscheiden, ob die besondere Struktur der stochastischen Mechanik einen effektiven Wert hat, im Sinne einer physikalischen Theorie, die detaillierter ist als die gewöhnliche Formulierung der Quantenmechanik. Andernfalls müsste die reichere Struktur der *Beobachtbarkeit* in der stochastischen Mechanik auf rein mathematischen Begriffen beruhen rein mathematischen Begriffen beruhen, ohne ein empirisch beobachtbares physikalisches Gegenstück. Unter diesem Gesichtspunkt wäre es äußerst wichtig, eine Art physikalische Motivation für die zugrunde liegende Brownsche Bewegung zu finden, die allen Trajektorien stochastischen Charakter verleiht.

Die Methoden der stochastischen Mechanik haben in Verbindung mit der euklidischen Formulierung der Quantenfeldtheorie, wie sie von Schwinger, Symanzik und anderen eingeführt wurde, auch eine teilweise Erweiterung auf dynamische Systeme mit einer unendlichen Anzahl von Freiheitsgraden (stochastische Feldtheorie) erfahren. Daher ist das allgemeine theoretische Schema der stochastischen Mechanik a posteriori auch als die zugrundeliegende grundlegende Motivation für den großen Erfolg der probabilistischen Methoden in der Quantenfeldtheorie interpretiert werden, und zwar sowohl unter dem Gesichtspunkt einer strengen mathematischen Kontrolle (konstruktive Quantenfeldtheorie), als auch im Hinblick auf die der praktischen Berechnung physikalischer Größen (numerische Computersimulationen).

Der Charme der Stochastischen Mechanik besteht darin, dass sie einen nahtlosen Übergang zwischen der Quantenmechanik und der klassischen Mechanik ermöglicht. Viele zwischen der Quantenmechanik und der klassischen Mechanik inkompatiblen Konzepte wie Teilchenspin, Welle-Teilchen-Dualismus, Tunneneffekt u. a., können durch die Stochastische Mechanik auf eine sehr einfache, elegante Art hergeleitet werden. In diesem Zusammenhang kann ein Zitat von Sheldon Goldstein [218] gebracht werden:

„I wish to describe a theory, stochastic mechanics, which answers all the questions just raised, and many more; and does so in a way that is so simple and natural that the first reaction of the reader, after understanding the argument, should be that there must be a mistake somewhere, that it cannot all be so simple. As of yet, have found no mistake.“

Wie schon gesagt ist die Stochastische Mechanik nur eine von vielen Interpretationen der Quantenmechanik. Aus diesem Grund muss sie sich daran messen lassen, wie gut sie verschiedene klassische Experimente bzw. Effekte der Quantenmechanik beschreiben kann. Die nachfolgende Tabelle beinhaltet eine solche Aufstellung mit den Verlinkungen zu den entsprechenden Kapiteln dieses Kompendiums:

Herleitung der Schrödinger Gleichung und hieraus abgeleitete Fragestellungen		
Herleitung der Schrödinger Gleichung	✓	Kap. 5
Wellenfunktion	✓	17.1.5
Doppelspalteperiment	✓	
Tunneleffekt	✓	17.1.4
Nullpunktenergie	✓	17.1.3,17.1.5
Zeitabhängige Dirac-Gleichung	✓	
Herleitung des Spins		
Spin	✓	7
Stern-Gerlach-Experiment	✓	
Das Bohrsche Magneton	✓	
Spinpräzession in einem magnetischen Feld	✓	
Magnetische Spinresonanz	✓	
Strahlungsemission		
Wasserstoffatom	✓	
Spontane Emission	✓	
Plancksches Gesetz	✓	
Stabilität von Atomen	✓	17.1.2
Anwendungen Quantenmechanik		
van der Waals-Wechselwirkung	✓	
Sonstiges und offene Punkte		
Determinismus	(-) ¹	
Schrödingers Katze	(-) ²	Abschnitt 20.1
Geisterhafte Fernwirkung	—	
Quantumcomputing	—	
Makroskopische Analogien		
Hydrodynamische Analoga der Quantenmechanik	✓	17.1.9

¹Hinweis: Die stochastische Mechanik versagt nicht beim Determinismus, sondern setzt über den stochastischen Ansatz einen Indeterminismus voraus (siehe die Anmerkungen in Abschnitt).

²Keine Relavanz, siehe Anmerkungen in Abschnitt 20.1

Die Interpretationen der Quantenmechanik gehen dabei sehr weit auseinander und sind keineswegs kompatibel. Aus diesem Grund gibt es ideologische Grabenkriege, die sich in teilweise in sehr drastischen Aussagen wiederspiegeln:

Nobody understands quantum theory.³ Richard Feynman

Es ist kaum anzunehmen, daß die provozierende Wirkung dieser Überschrift unbeabsichtigt war. [184]

Das hohe Ansehen der Gründer der Quantenmechanik und Schöpfer der *Kopenhagener Interpretation*, allen voran Heisenberg, Born, Jordan, Dirac und Bohr, hat bis heute eine grundlegende Diskussion über die Grundlagen auf breiter Basis verhindert.

Shut up and calculate. N. David Mermin

[The theory] makes absolutely no sense. Roger Penrose

[...] each of the interpretations leaves at least one element unexplained.

Es ist einigermaßen hart, zu sehen, daß wir uns immer noch im Stadium der Wickelkinder befinden
[...]

Does anyone doubt that quantum mechanics is right Edward Nelson
and stochastic mechanics is wrong?

Wenn diese Quantenspringerei nicht aufhrt tut es mir leid, mich jemals damit befasst zu haben.

In quantum mechanics, when the wave function is known everything is known – that is the most complete description possible in quantum mechanics. But in stochastic mechanics that is just the starting point: We ask what the diffusion looks like.

New interpretations appear every year. None ever disappear.

Geschichtliche Entwicklung der Stochastischen Mechanik

Die Arbeit von Edward Nelson aus den 1960er Jahren [?] bildet den eigentlichen Ursprung der Stochastischen Mechanik. Allerdings müssen hier an dieser Stelle auch weitere Physiker genannt werden, die den Grundstein der Theorie gelegt haben: Erwin Madelung, Imre Fenyves und Walter Weizel.

Diese hatten das Ziel, die quantenmechanische Bewegungsgleichung auf die *klassische* Streuung kleinster Teilchen im Vakuum zurückzuführen. Aber erst Nelson war es gelungen, die reibungsfreie Brownsche Bewegung kleinster Teilchen schlüssig zu formulieren und daraus die Schrödinger-Gleichung konsequent herzuleiten. Leider wurden einige Fragen bei der Herleitung der Schrödinger-Gleichung in dieser ersten Arbeit durch Nelson noch nicht beantwortet oder blieben unklar [?]. Nelson versuchte jedoch nicht, auf diese Fragen einzugehen, sondern begann durch die Kritik einiger Kollegen letztlich selbst an seiner Arbeit zu zweifeln [?]. Unglücklicherweise mangelte es ihm zu seiner Zeit an Unterstützung, wozu wohl auch beitrug, dass seine Ursprungsarbeit recht schwer durchschaubar ist. So nahm seine Theorie letztlich den Status eines mathematischen Kuriosums ein.

Erst Fritsche gelang es später, Nelsons Theorie deutlich einfacher und vollständiger zu formulieren, wobei er an Gebeleins Überlegungen zur Herleitung der Navier-Stokes-Gleichung aus der Theorie der stochastischen Teilchenbewegung aus dem Jahre 1935 anknüpfte (siehe Abschnitt ??). Unter seiner Anleitung entstand eine Staatsexamensarbeit von Jutta Aschenbach [?], in der vor allem wichtige Beziehungen, die bei Nelson *vom Himmel* fallen, konsistent begründet werden. In anschließenden Arbeiten geht Fritsche dann wesentlich über Nelsons ersten Ansatz hinaus, indem er die Quantenmechanik weiter ausbaut und wichtige offene Fragen, zum Beispiel nach dem Spin, beantwortet (siehe zum Beispiel [?] und [?]).

Nelson ist also zwar als *Urvater* der Stochastischen Mechanik zu sehen. Wesentliche Aspekte und Einsichten blieben Nelson jedoch verborgen, da er sich selbst von seiner Arbeit distanzierte.

3 Kernaussagen und Interpretationen der Quantenmechanik

Für ein grundlegende Verständnis der Quantenmechanik sind zunächst die Grundannahmen aufzuzeigen. Diese sind prinzipiell für alle **Interpretationen** mehr oder weniger gültig und stellen den Grundkonsenz dar.

Diese zunächst popularwissenschaftliche Einführung soll klarmachen, daß dabie nicht die Quantenmechanik selbst mysteriös ist, sondern höchstens einige ihrer Interpretationen. Wichtig ist, dass die folgenden Kernaussagen verinnerlicht werden, da sie zum gesamtheitlichen Verständnis der Quantenmechanik beitragen.

Wofür wird die Quantenmechanik benötigt?

Die klassische Mechanik erlaubt es, die Bewegung makroskopischer Körper wie Billardkugeln, Gewehrgeschosse, Planeten, Kreisel oder Pendel aus der Kenntnis der auf sie einwirkenden Kräfte vorherzusagen. Bei sogenannten Mikroteilchen, beispielsweise Elektronen oder Protonen, versagt diese Theorie jedoch: Sie kann das Linienspektrum des Wasserstoffatoms nicht beschreiben. Hier greift erst die Quantenmechanik.

Konsequent müßte man eine Gewehrkugel als gekoppeltes System von circa 10^{23} Mikroteilchen (Eisenatome) behandeln, doch liegen die Differenzen der Vorhersagen der Quantenmechanik von denen der Klassischen Mechanik in der Regel weit unterhalb der Meßgenauigkeit. In diesem Sinne kann man die Klassische Mechanik als makroskopischen Grenzfall der Quantenmechanik bezeichnen.

Was ist die Quantenmechanik?

Obwohl die Anfänge der Quantenmechanik bis in die 20er Jahre (Bohr, Sommerfeld) zurückreichen, gehen bis heute die Auffassungen auseinander über die sogenannte *Interpretation der Quantenmechanik*. Um Mißverständnisse zu vermeiden, sollte daher nicht von der Quantenmechanik gesprochen werden sondern stets dazu gesagt sein, welche Interpretation gemeint ist; beispielsweise die der Kopenhagener Schule (siehe S. 3.2 ff.), diejenige von David Bohm (siehe S. 3.2 ff.), die Schrödingersche Materiewellen-Theorie

To Do 1 (Link fehlt.): (siehe S. ?? ff.)

oder die Bornsche Interpretation.

To Do 2 (Link fehlt.): (siehe S. ?? ff.)

In diesem Kompendium liegt der Schwerpunkt auf der Stochastischen Mechanik nach Edward Nelson, die die Quantenmechanik als Ursache von Fluktuationen des Vakuums erklärt [4].

Was ist die Quantenmechanik nicht?

Quantenmechanik ist eine statistische Theorie und macht nur sehr wenig Aussagen über Einzelsysteme. Insbesondere macht es keinen Sinn, von der „Wellenfunktion eines Schwarzen Lochs“ oder gar der „Wellenfunktion des Universums“ zu reden.

Ebensowenig besagt die Heisenbergsche Unschärferelation, man könne Ort und Impuls eines Teilchens nicht gleichzeitig messen.

Es gibt keine Energie-Zeit-Unschärfe: Da t keine Observable sondern ein Parameter ist.

To Do 3 (Link fehlt.): (siehe S. ?? ff.)

Ein Teilchen ist niemals eine Materiewelle. Der sogenannte **Welle-Teilchen-Dualismus** bezieht sich auf statistische Gesamtheiten von Mikroobjekten.

Schwachpunkte der Quantenmechanik

Die Quantenmechanik ist keine *echte* Quantentheorie in dem Sinne, daß man die Existenz von Teilchen hineinsteckt. Sie beschreibt lediglich, wie sich (*statistische Gesamtheiten von*) Teilchen verhalten; aber warum es Teilchen gibt, sagt sie nicht. Dies ist ein sehr subtiler Unterschied, der häufig vergessen wird.

Insbesondere kann sie keine Erzeugung oder Vernichtung (z.B. zerfällt das freie Neutron nach $1/2h$) von Teilchen erklären.

Bei der Aufstellung des Hamiltonoperators wird man von der Quantenmechanik einigermaßen im Stich gelassen: Sie nimmt ihn als gegeben an.

Ist ein Elektron jetzt ein Teilchen oder eine Welle?

Welle-Teilchen-Dualismus : Ein Elektron ist keine klassische Billardkugel, deren zukünftige Bahn aus ihrem jetzigen Bewegungszustand sich vorausberechnen lässt. Es ist aber auch keine oszillierende gaußförmige Dichtewolke, die mit der Zeit (Dispersion) auseinanderfließt. Während viele Interpretationen der Quantenmechanik Materie gleichzeitig Welle- und Teilcheneigenschaften zuordnen, löst sich dieser Widerspruch bei der hier dargestellten stochastischen Mechanik auf (siehe Kapitel 5 und 14).

Was ist die Unbestimmtheit einer physikalischen Größe?

Um dies zu klären muss man sich einmal klarmachen, was die **Unbestimmtheit** nicht bedeutet

Die Unbestimmtheit ist/sind *nicht*:

- Schwankungsbereiche an sich bestimmter Messgrößen
- Bereiche der (subjektiven) Unkenntnis („Ungewissheiten“)
- Mess-Ungenauigkeiten / „Unschärfen“

Die Unbestimmtheit sind Bereiche, in denen bei einer Messung im betreffenden Zustand Messwerte komplementärer Messgrößen überwiegend realisiert werden, obwohl sie nicht gleichzeitig Eigenschaften des Systems sein können.

Durch die Vakuumfluktuationen, die der stochastischen Mechanik zugrunde gelegt werden, wird dieser Zusammenhang offensichtlich (siehe Kapitel 5 und 14).

Was sind die Wellenfunktionen?

Die Wellen der Quantentheorie (**Wellenfunktion**) sind keine realistischen Wellen im uns umgebenden Anschauungsraum, sondern abstrakte Wellen in einem abstrakten Konfigurationsraum. Konsenz ist, dass der Wellenfunktion keine physikalische Bedeutung zugemessen wird, sondern nur ihrem Quadrat, das als eine Wahrscheinlichkeitsdichte (z. B. **Aufenthaltswahrscheinlichkeit**, ???) interpretiert wird.

To Do 4 (Link fehlt.): ... siehe: ??

Graphische Darstellung und didaktische Diskussion: Es besteht die Gefahr, dass die graphische Darstellung der **Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion** $|\psi|^2$ mit einer graphischen Darstellung des Elektrons verwechselt wird. Dieses wolkenartige Gebilde ist eine Darstellung von $|\psi_{(x,y,z)}|^2$ in zwei Dimensionen. Die Graustufe an jedem Punkt ist ein Maß für die Dichte der Detektionswahrscheinlichkeit.

Wellenfunktion , Zustandsfunktion , ψ -Funktion	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
<ul style="list-style-type: none">• Ist die Lösung der Schrödingergleichung.• Ist in der Regel nicht reellwertig.• Kann nicht direkt gemessen werden.	<ul style="list-style-type: none">• Ist das Betragsquadrat $\psi ^2$.• Ist reellwertig• Kann gemessen werden.

Eine häufig gemachte Fehlinterpretation der **Wellenfunktion** ist, dass man fälschlicherweise annimmt, dass die reale Wellen im Anschauungsraum sind. Diese vereinfachte Annahme ist allerdings falsch. Aus dieser häufig gemachten falschen Annahme resultieren häufig unpräzise Aussagen. Von dieser falschen historischen Annahme kommen Bezeichnungen wie ¹

- der **Welle-Teilchen-Dualismus** (mit dem häufig suggeriert wird, dass man unter gewissen Umständen Teilchen auch als Wellenpakete im Anschauungsraum sehen könne),
- der **Wellencharakter** bzw. **Teilchencharakter** eines Elektrons oder Photons,
- **Materiewellen** (für die Wellenfunktionen, die sich angeblich im Anschauungsraum ausbreiten sollten),
- **Elektronenbeugung** (so als könnten Elektronen an den elektromagnetischen Feldern eines Linsensystems oder an den Atomen eines Kristalls im Anschauungsraum gebeugt werden),
- **Elektronenwolken/Ladungswolken** im Atom (so als seien die Wellen der einzelnen Elektronen im Atom über das Atomvolumen *verschmiert*),
- **verschmierte** Elektronen (so als sei die elektrische Ladung eines Elektrons über einen endlichen Raumbereich verteilt),
- eine Vorstellung, dass sich Elektronen oder Photonen hinter dem Doppelspalt als Wellen ausbreiten, aber als Teilchen auf dem Schirm oder im Detektor nachgewiesen werden".

Hinter diesen Begriffen stehen zwar reale Effekte, jedoch suggerieren sie eine veraltete Interpretation und manchmal auch falsche Vorstellungen. Seit der Etablierung der gegenwärtigen Quantentheorie seit den 1930er Jahren weiß man, dass die Wellenfunktionen der Quantentheorie Wellen in abstrakten Konfigurationsräumen (Orts- oder Impulsräumen) sind. Nur im Fall von Einteilchen-Zuständen sind diese auch dreidimensional wie der Anschauungsraum, in dem sich

¹Quelle: <https://www.forphys.de/overview.html>

die Teilchen bewegen. Im Fall von Zwei-Teilchen-Zuständen sind die Konfigurationsräume bereits sechs-dimensional. Es gibt viele Gründe, warum die Annahmen des „Geburtsfehlers“ als falsch gelten. Zwei-Teilchen-Zustände und auch kohärente Zustände sind dabei die überzeugendsten Indizien.

Seitdem haben Diskussionen darüber, ob ein Teilchen durch den linken oder rechten Spalt oder durch beide gelaufen ist oder links vom Baum oder rechts davon oder auf beiden Wegen (wie bei einer Welle), keinen Sinn mehr. Heute wissen wir genauer:

Solche Wellen sind nicht realistisch aufzufassen. Sie dienen ausschließlich zur Berechnung von Wahrscheinlichkeiten.

Dies ist im Einklang mit dem Zitat von Zeilinger:

... Die Annahme, dass sich diese Wahrscheinlichkeitswellen tatsächlich im Raum ausbreiten, ist also nicht notwendig - denn alles, wozu sie dienen, ist das Berechnen von Wahrscheinlichkeiten. Es ist daher viel einfacher und klarer, die Wellenfunktion ψ nicht als etwas Realistisches zu betrachten, das in Raum und Zeit existiert, sondern lediglich als mathematisches Hilfsmittel, mit Hilfe dessen man Wahrscheinlichkeiten berechnen kann. Zugespitzt formuliert, wenn wir über ein bestimmtes Experiment nachdenken, befindet sich ψ nicht da draußen in der Welt, sondern nur in unserem Kopf.

Anton Zeilinger

In der Schrödingerschen Formulierung der **Quantenmechanik** dient eine Wellenfunktion als Werkzeug zur Berechnung von Wahrscheinlichkeiten, die angeben, mit welcher Wahrscheinlichkeit bestimmte Messergebnisse für Zustände mit einer festen Anzahl von Teilchen ($n = 1, 2, 3, \dots$) auftreten werden.

Die Wellenfunktion im einfachsten Fall für ein Ein-Teilchen-Problem in einer Dimension hat z. B. folgende Form: $\psi_{(x,t)}$. Nimmt man dieses sehr einfache System, so muss darauf hingewiesen werden, was die Bedeutung von x ist.

x darf nicht als eine Teilchenkoordinate interpretiert werden. x definiter eine Ortskoordinate, an dem Wahrscheinlichkeiten berechnet oder Messungen durchgeführt werden sollen.

Dies ist ein sehr subtiler Unterschied, der aber so häufig nicht herausgestellt wird.

Vor einer Ortsmessung, wie zum Beispiel der Bestimmung des Ortes eines Teilchens, ist der Ort in der Regel völlig unbestimmt. Das bedeutet, dass die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen an einer beliebigen Stelle im Raum zu finden, im Allgemeinen von Null verschieden ist. Wenn jedoch

bei einer Messung das Teilchen in der Nähe eines bestimmten Ortes gefunden wird, muss die Wahrscheinlichkeit, es an anderen Stellen zu finden, Null werden. In diesem Moment ändert sich die Wellenfunktion instantan überall im Raum, selbst hinter den entferntesten Galaxien. Wenn solche Wellen oder Wellenfunktionen realistisch wären, müsste die Information „Teilchen hier und nirgendwo sonst“ mit Überlichtgeschwindigkeit durch den gesamten Raum transportiert werden, was unmöglich ist.

Diese plötzliche Veränderung der Wellenfunktion im gesamten Raum wird als *Kollaps der Wellenfunktion* bezeichnet. Dieser Prozess gibt einige Rätsel auf und ist immer noch umstritten. Wenn man jedoch die Wellenfunktion nicht als etwas Reales ansieht, das sich bei einer Messung im Raum *real* bzw. *materiell* verändert, sondern lediglich als mathematisches Werkzeug zur Berechnung von Wahrscheinlichkeiten, verliert das Phänomen jegliche Geheimnisvolle und erscheint sogar als eine logische Notwendigkeit.

Nachfolgend wird noch einmal zusammengefasst, wie und wie nicht die Wellenfunktion zu interpretieren ist:

- In der Schrödinger-Gleichung für n -Teilchen sind die Lösungen *Wellen* in einem $(3 \times n)$ -dimensionalen Raum, sofern der Elektronenspin vernachlässigt wird. Diese *Wellen* existieren nicht im Anschauungsraum, sondern sind lediglich mathematische Konstrukte.
- Die Werte der Wellenfunktionen sind in der Regel komplexe Zahlen, während Messgrößen immer reelle Zahlen sind.
- Eine Wellenfunktion kann im Allgemeinen nicht direkt gemessen werden, da sie eine komplexwertige Größe ist.
- Die Wellenfunktionen als physikalische Lösungen der Schrödinger-Gleichung haben nur einen Zweck: Vorhersagen über die Wahrscheinlichkeit bestimmter Messwerte zu machen.

3.1 Erkenntnistheorie und Interpretationen

Interpretationen: Die Quantenmechanik ist zweifellos eine der herausforderndsten physikalischen Theorien, wenn es darum geht, sie zu interpretieren. Sowohl in der Vergangenheit als auch heute ist kein anderes Gebiet der Physik von vergleichbarer Intensität in dieser Hinsicht betroffen. Dies war bereits in den zwanziger Jahren des letzten Jahrhunderts offensichtlich, als die Theorie entwickelt wurde und insbesondere im berühmten Dialog zwischen Bohr und Einstein zum Ausdruck kam. Die kontroversen Diskussionen über die Quantenmechanik dauern bis heute unvermindert fort. Nur Diskussionen zur Speziellen Relativitätstheorie haben ein ähnliches Ausmaß angenommen, um ihren Inhalt und ihre Aussagen durch eine erklärende Deutung zu ergänzen - wenn man unter dem Begriff Theorie den (mathematischen) Formalismus und die daraus direkt abgeleiteten Aussagen versteht. Im Gegensatz zur Speziellen Relativitätstheorie gibt es

für die Quantenmechanik eine Vielzahl von unterschiedlichen Ansätzen zur Interpretation oder „Interpretations-Schulen“. Dabei geht es jedoch nicht darum, ungewohnte Konsequenzen für den Alltagsverstand zu veranschaulichen, sondern um eine tiefere Deutung der Theorie selbst.

Es gibt viele Gründe, warum die Quantenmechanik eine besondere Rolle in Bezug auf die Interpretation ihrer Theorie einnimmt. Einer der wichtigsten ist sicherlich die enorme Bedeutung der Quantentheorie für das heutige physikalische Weltbild. Der grundlegende und fundamentale Charakter der Theorie unterstreicht die Notwendigkeit einer interpretativen Auseinandersetzung mit dem Formalismus. Es gibt jedoch auch drei weitere Aspekte, die den besonderen Charakter der Quantenmechanik ausmachen:

- Erstens ist der hohe Abstraktionsgrad zu nennen, der sich bereits in der Verwendung von quantenmechanischen Grundbegriffen widerspiegelt, die der Alltagswelt fremd oder zumindest ungewohnt sind, wie z. B. Zustand und Zustandsfunktion oder Observable.
- Zweitens ist die Notwendigkeit eines aufwendigen mathematischen Apparats zu erwähnen, ohne den die Quantenmechanik nicht formulierbar wäre. Hierzu zählt der funktionalanalytische Hilbert-Raum-Kalkül, in dem Vektoren bzw. Strahlen Zustandsfunktionen und Zustände sowie lineare Operatoren die Observablen repräsentieren.
- Drittens ist der mitunter eingeschränkte Charakter der Aussagen und Ergebnisse zu nennen, die aus dem quantenmechanischen Kalkül abgeleitet werden können. Dies zeigt sich vor allem in der Tatsache, dass es sich um reine Wahrscheinlichkeitsaussagen handelt. Die damit verbundenen Unschärferelationen und der sog. *Welle-Teilchen-Dualismus* brechen mit grundlegenden Konzepten der klassischen Physik und sind teilweise schwer intuitiv nachvollziehbar. Deshalb ist eine weitergehende Erklärung notwendig².

Trotz des Einwandes von Richard Feynman, dass niemand die Quantentheorie verstehe, haben sich zahlreiche Forscher bemüht, eine bessere Interpretation der Quantenmechanik zu finden. Dabei geht es nicht nur um die Anwendung des Formalismus, sondern um eine Integration der neuen Konzepte in ein physikalisches Weltbild. Ziel ist es, eine Sinngebung oder Deutung der Quantenmechanik zu erreichen und damit auch die Entwicklung eines physikalischen Weltbildes zu fördern. Für diese Forscher ist eine physikalische Theorie mehr als nur eine Rezeptur zur Lösung bestimmter Rechenaufgaben. John S. Bell brachte es auf den Punkt: Ohne Interpretation ist Quantenmechanik gut FAPP, also good for all practical purposes für alle praktischen Zwecke.
³

Anforderungen an Interpretationen der Quantenmechanik

Zunächst stellt sich die Frage, was eine Interpretation der Quantenmechanik eigentlich bedeutet und was sie umfasst. Wenn man den Begriff *Interpretation* durch *Sinngebung* oder *Deutung* des

²Teaser zur Stochastischen Mechanik

³Shut up and calculate!

mathematischen Formalismus ersetzt, wird die Herausforderung, diese Frage zu beantworten, noch deutlicher. Analog zur Interpretation eines Textes, die eine kritische Auseinandersetzung mit Inhalten, Voraussetzungen und Implikationen beinhaltet, kann man den Begriff in Bezug auf die Quantenmechanik als Reflexion des mathematischen Formalismus der Theorie verstehen. Im Allgemeinen erwartet man von einer umfassenden physikalischen Theorie mehr als nur eine Anleitung zur Lösung von Problemen. Im Falle der Quantenmechanik geht es also um mehr als nur die Berechnung von Bohrschen Atomradien, Spektrallinien oder ähnlichem. Aber man muss sich zunächst fragen, was macht die „Erklärungskraft“ der Quantenmechanik ausmacht.

Gehört dazu zum Beispiel ein Modell der mikrophysikalischen Welt, das über den quantenmechanischen Formalismus hinausgeht? Diese Fragen sind sehr grundsätzlich und im weitesten Sinne philosophisch. Die Antwort hängt von der individuellen philosophischen Überzeugung ab und bestimmt auch die Beurteilung der Frage nach der Abgeschlossenheit oder Vollständigkeit der Quantenmechanik. Die Beantwortung dieser Fragen entscheidet über den Status, den die Quantenmechanik einnimmt. Sind die Paradoxien der Quantenmechanik eine implizite Aufforderung, nach einer weiterführenden, deterministischen oder zumindest kausalen Theorie der Mikrowelt zu suchen? Die Antwort auf diese Frage bleibt offen und stellt eine Herausforderung für die Physik und die Philosophie dar.

Eine ernsthafte und wissenschaftlich fundierte Auseinandersetzung mit den grundlegenden Konzepten der Quantenmechanik und ihrer Interpretation sollte nicht nur die mathematischen Formalismen berücksichtigen, sondern auch die experimentellen Ergebnisse und Beobachtungen, die der Quantenmechanik zugrunde liegen. Es ist wichtig zu verstehen, dass die Quantenmechanik nicht nur ein mathematisches Modell ist, sondern eine Beschreibung der Realität auf subatomarer Ebene. Daher muss jede Interpretation der Quantenmechanik auch unsere grundlegenden Vorstellungen von Raum, Zeit und Kausalität⁴ in Frage stellen und möglicherweise revidieren. Eine erfolgreiche Interpretation der Quantenmechanik sollte auch dazu beitragen, die verschiedenen Interpretationen, die derzeit existieren, zu klären und zu vereinheitlichen. Es sollte dabei auch die Möglichkeit berücksichtigt werden, dass es möglicherweise keine eindeutige Interpretation der Quantenmechanik gibt und dass unsere Vorstellung von der Realität auf subatomarer Ebene möglicherweise immer unvollständig bleiben wird.

Insgesamt ist die Frage nach der Interpretation der Quantenmechanik ein äußerst wichtiges Unterfangen, das uns helfen kann, ein besseres Verständnis der Natur und unserer Welt zu erlangen.

- Es ist notwendig, zu erklären, wie der Übergang von der Mikrophysik, die die Makrowelt aufbaut, zur klassischen Physik erfolgt. In ähnlicher Weise muss auch der Übergang von der Quantenmechanik zur Newtonschen Mechanik erläutert werden. Eine Möglichkeit, dies zu erreichen, besteht darin, dass man den klassischen Konzepten und Begriffen einen Vorrang einräumt und einen „Mechanismus“ bereitstellt, der die ungewöhnlichen Aussagen und Ergebnisse der Quantenmechanik erklärbare macht, beispielsweise durch die Einführung durch

⁴Teaser: Stochastische Mechanik

stochastische Prozesse. Ein weiteres Weg, der in letzter Zeit intensiv verfolgt wird, versucht das Entstehen „klassischen“ Verhaltens durch Auflösung der Problematik verschrankter Zustände durch umgebungsinduzierte Superauswahlregeln zu erklären. Diese Interpretation wird durch den Begriff der Dekohärenz (Kohärenz) umrissen.⁵

- Die Quantisierung bedeutet, dass die Zustände eines physikalischen Systems nicht mehr kontinuierlich, sondern nur noch diskret möglich sind. Das heißt, dass die Quantenmechanik die Idee von Objekten und Eigenschaften, die kontinuierlich variiert werden können, in Frage stellt und durch diskrete Zustände ersetzt. Diese diskreten Zustände werden bei den meisten Interpretationen als Wellenfunktionen beschrieben werden, die die Wahrscheinlichkeiten angeben, mit denen ein Teilchen in bestimmten Zuständen gefunden werden kann. Die Quantisierung stellt eine fundamentale Veränderung der Art und Weise dar, wie wir uns physikalische Systeme vorstellen und beschreiben können. Sie erfordert eine Neuinterpretation der grundlegenden Konzepte der klassischen Physik. Daher ist es notwendig, Modelle zu entwickeln, die sowohl die quantenmechanischen als auch die klassischen Phänomene erklären können.
- Innerhalb eines Minimalprogramms einer Quantenmechanik-Interpretation sollten grundlegende Fragen beantwortet werden, die den Bruch zur klassischen Physik aufzeigen. Einige dieser Fragen betreffen die Grundbegriffe der Theorie:
 - Was ist die Bedeutung der Zustandswellenfunktion ψ ?
 - Wie sind die dynamischen Variablen, Observablen und Eigenwerte zu verstehen?
 - Wie kann man den quantenmechanischen Messprozess und die Reduktion des Wellenpakets erklären?
 - Braucht es ein Projektionspostulat, wie es von Neumann formuliert hat?
 - Was ist die Natur und Ursache der Heisenbergschen Unschärferelation?
 - Wie kann man die durch die Quantenmechanik beschriebenen Mikrosysteme verstehen – handelt es sich um Teilchen, Wellen oder etwas völlig Neues?
 - Wie lassen sich grundlegende quantenmechanische Phänomene wie der Tunneleffekt erklären?

Eine umfassende Interpretation der Quantenmechanik sollte zumindest auf diese Fragen Antworten geben können. Allerdings gibt es noch viele weitere Aspekte, die in eine Interpretation einbezogen werden können, wie zum Beispiel die Frage nach der Quantenverschränkung und ihrer Bedeutung, oder die Beziehung zwischen Quantenmechanik und der Relativitätstheorie. Je nach Fokus und Zielsetzung der Interpretation können also auch weitere Fragen relevant sein.

⁵Wird hier im weiteren nicht betrachtet.

Die Interpretation der Quantenmechanik ist besonders herausfordernd, da sie mit den grundlegenden Annahmen der klassischen Physik bricht und zu ungewöhnlichen Ergebnissen führt. Die Doppelspalt-Versuche, Experimente zum EPR-Paradoxon und der quantenmechanische Messprozess sind besonders geeignet, um die besonderen Eigenschaften der Quantenmechanik zu demonstrieren. Darüber hinaus wurden auch sogenannte Paradoxien der Quantenmechanik formuliert, wie Schrödingers Katze, Wigners Freund und das Quanten-Zenon-Paradoxon, die zu Widersprüchen und unklaren Ergebnissen führen. Diese Paradoxien bieten jedoch auch Möglichkeiten, um die Interpretation der Quantenmechanik zu vertiefen und zu verbessern. Insgesamt erfordert die Interpretation der Quantenmechanik eine sorgfältige und gründliche Auseinandersetzung mit diesen Phänomenen, um ein umfassendes Verständnis zu erreichen.

Die genannten Gründe für die Schwierigkeiten bei der Interpretation der Quantenmechanik haben jeweils ihre eigene Konsequenz. Die erste Herausforderung, dass das Beobachtungssystem in die Quantenmechanik einbezogen werden muss, führt dazu, dass die Interpretation der Theorie nicht einfach auf den reinen Formalismus beschränkt werden kann. Die zweite Herausforderung, dass die Quantenmechanik mit klassischen Konzepten brechen kann, erfordert die Entwicklung neuer Konzepte und Vorstellungen, um die Quantenphänomene zu beschreiben und zu erklären. Die dritte Herausforderung, dass die Quantenmechanik zu unklaren oder sogar widersprüchlichen Ergebnissen führen kann, bedeutet, dass möglicherweise neue theoretische Ansätze erforderlich sind, um die Theorie zu erklären oder zu erweitern. Insgesamt erfordert die Interpretation der Quantenmechanik eine gründliche Auseinandersetzung mit den grundlegenden Konzepten und eine offene Haltung gegenüber neuen Ideen und Ansätzen.

- Aufgrund des hohen Abstraktionsgrads der Quantenmechanik besteht oft Unklarheit oder Uneinigkeit darüber, was die quantenmechanischen Begriffe eigentlich bedeuten oder worauf sie sich beziehen dürfen. Zum Beispiel ist nicht klar, ob ein (bewusster) Beobachter in die quantenmechanischen Berechnungen einbezogen werden sollte oder ob es eine obere Grenze dafür gibt, auf welche Systeme die Zustandsfunktion angewendet werden kann. Es ist auch unklar, ob die Zustandsfunktion auf das gesamte Universum angewendet werden kann oder ob es hierfür Einschränkungen gibt. Diese Fragen sind Gegenstand intensiver Debatten in der Philosophie der Quantenmechanik und können unterschiedliche Interpretationen und Ansätze zur Erklärung erfordern.
- Die quantenmechanischen Theorien sind stark von mathematischen Konzepten geprägt, die einerseits Grenzen vorgeben, andererseits aber auch zur Erklärung der Quantennatur der Mikrowelt beitragen können. Ein Beispiel für die Grenzen des Formalismus sind die so genannten „no-go-Theoreme“, wie die Bellschen Ungleichungen, das Gleasonsche Theorem oder das Kochen-Specker-Theorem, welche die Entwicklung von Theorien mit verborgenen Parametern einschränken oder in Verbindung mit anderen Prinzipien wie der Lokalität sogar verbieten. Andererseits können Analysen der Quantenlogik und des mathematischen Formalismus dazu beitragen, die Quantennatur der Mikrowelt besser zu verstehen. Insbesondere beim Übergang von klassischen zu quantenmechanischen Theorien spielen diese Betrachtungen eine entscheidende Rolle. Allerdings ist die Bedeutung von Quantisierung

bislang nur auf formaler Ebene erklärt, wie beispielsweise durch die Ersetzung von Poisson-Klammern durch Kommutatoren. Auch die Rückgewinnung der klassischen Theorie durch Grenzübergänge von Parametern, wie das Wirkungsquantum $\hbar \rightarrow 0$ oder Quantenzahlen $n \rightarrow \infty$, gelingt oft nur unvollständig.

- Die Charakterisierung der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsaussagen lässt Raum für unterschiedliche Interpretationen. Einerseits gibt es Ansätze wie die Ensemble-Interpretationen, die einen Vorrang der Wahrscheinlichkeiten einräumen. Andererseits gibt es die Vielwelten-Theorie, die die Wahrscheinlichkeiten als Ausdruck einer absoluten Realität sieht. Eine weitere Interpretation, die in der Kopenhagener Deutung postuliert wird, ist die Einschränkung der Erkenntnis durch die Wahrscheinlichkeitsaussagen. Die Kopenhagener Deutung geht davon aus, dass die quantenmechanischen Zustände nur durch Wahrscheinlichkeiten beschrieben werden können und dass es keine Möglichkeit gibt, die zugrunde liegende Realität direkt zu erfassen. Daher sind die Wahrscheinlichkeiten eine Einschränkung dessen, was tatsächlich gewusst werden kann. Diese unterschiedlichen Interpretationen sind eng verbunden mit der Frage nach der Natur der quantenmechanischen Zustände und der Realität, die diesen zugrunde liegt.

3.2 Interpretationen der Quantenmechanik

Dennoch ist die Frage oder der Wunsch nach einer Interpretation der Quantenmechanik kein rein philosophisches Unterfangen. Bei der Formulierung jeder Theorie fließt ein gewisses Vorverständnis grundlegender Konzepte ein, das heißt, bestimmte Prinzipien werden als allgemein gültig akzeptiert. Zu diesen Prinzipien gehören beispielsweise Kausalität, Lokalität, Separabilität und andere. Der Bruch, den die Quantenmechanik mit vielen dieser Prinzipien oder Konzepten der klassischen Physik herbeigeführt hat, erforderte und erfordert weiterhin eine intensive Auseinandersetzung. Von einer Interpretation der Quantenmechanik darf daher Folgendes erwartet werden:

- Der Übergang von der Mikrowelt (Quantenphysik) zur Makrowelt (NEWTONSche Physik) erfordert eine „Erklärung“. Eine Möglichkeit besteht darin, klassischen Konzepten und Begriffen Vorrang zu geben und einen *Mechanismus* zu konzipieren, der die ungewöhnlichen und fremdartigen Aussagen und Ergebnisse der Quantenmechanik erklären kann. Dies ist genau der Ansatz dem die hier beschriebene Stochastische Mechanik [218] folgt.
- Eine Anforderung an eine Interpretation der Quantenmechanik erfordert, dass oft die Gültigkeit der in der klassischen Physik wesentlichen — und somit uns aus der Alltagswelt vertrauten — physikalischen Konzepte hinterfragt und oft revidiert werden. Oder es muss ein Modell entwickelt werden, das einerseits grundsätzlich quantenmechanischer Natur ist, aber andererseits alle Ergebnisse der klassischen Physik in einem geeigneten Grenzübergang reproduziert.

Tabelle 3.1: Interpretationen der Quantenmechanik ([Link](#))

Interpretation												
Ensemble Interpretation (S. 3.2)	1926	Max Born	./.	nein	ja	./.	nein	nein	nein	nein	nein	nein
Kopenhagener Interpretation (orthodoxe Interpretation) (S. 3.2)	1927 –	Bohr, Heisenberg	nein	teilweise ¹	ja	nein	teilweise ²	nein ^{3 4}	ja	nein	nein	nein
De-Broglie-Bohm-Theorie (S. 3.2)	1927 – 1952	de Broglie, Bohm	ja ⁶	ja ⁷	ja	ja	nein ⁸	nein	ja	ja		
Quantenlogik (S. 3.2)	1936	Birkhoff	./.	./.	ja ⁹	nein	nein	./. ¹⁰	./.	nein	nein	nein
Zeitsymmetrische Theorien (S. 3.2)	1955	Watanabe	ja	nein	ja	ja	nein	nein ¹¹	nein	nein	ja	
Weiter auf der nächsten Seite.												

⁶Nach dieser Theorie existieren Partikel und Wellenfunktion gleichzeitig und haben eine reale Bedeutung.⁷Eindeutige Teilchengeschichte, aber mehrere Wellenverläufe.⁸Phänomenologische Theorie⁹Aber die Quantenlogik ist in ihrer Anwendbarkeit begrenzter als die kohärenten Historien.¹⁰Interpretativ: Die Quantenmechanik wird als eine Methode zur Vorhersage von Beobachtungen oder als eine Theorie der Messung betrachtet.¹¹[?]

Interpretation	Veröffentlichung	Autoren	Determinismus	Wellenfunktion	Eindeutige Vergangenheit	Verborgene Variablen	der Wellenfunktionson	Lokalität	Beobachter notwendig Kollaps	Kontrafaktische Bestimmtheit	Universelle Welfunktion
Many-worlds interpretation (S. 3.2)	1957	Everett	ja	ja	nein	nein	nein	ja	./. 12	ja	ja
Von Neumann-Wigner- Interpretation (S. ??)	1961 – 1993	von Neumann, Wigner, Stapp	nein	ja	ja	nein	ja	ja	nein	nein	ja
Stochastische Mechanik	1966	Nelson	nein	nein	ja	ja	nein	nein	nein	ja	nein
Many-minds interpretation (S. 3.2)	1970	Zeh	ja	ja	nein	nein	nein	./. 14	ja	./. 15	ja
Consistent histories (S. 3.2)	1984	Griffiths	nein	nein	nein	nein	nein	ja	nein	ja	ja
Transactional interpretation (S. 3.2)	1986	Cramer	nein	ja	ja	nein	ja	nein	nein 16	ja	nein 17

¹²Unzureichend.

¹³Kausaler Zusammenhang.

¹⁴ Interpretativ: Die Beobachter trennen die universelle Wellenfunktion in orthogonale Gruppen von Erscheinungen.

¹⁵Unzureichend.

¹⁶In der TI wird der Zusammenbruch des Zustandsvektors als Abschluss der Transaktion zwischen Emitter und Absorber interpretiert.

¹⁷Die TI ist ausdrücklich nicht-lokal.

Interpretation											
Universelle Wellenfunktion											
Kontraktionsche Bestimmtheit											
Lokalitat											
Beobachter notwendig Kollaps der Wellenfunkti-											
on											
Verborgene Variablen											
Eindeutige Vergangenheit											
Wellenfunktion											
Determinismus											
Autoren											
Veroffentlichung											

¹⁸[?]¹⁹Der Vergleich von Historien zwischen Systemen hat in dieser Interpretation keine klar definierte Bedeutung.²⁰Jede physikalische Interaktion wird als ein Kollapsereignis in Bezug auf die beteiligten Systeme behandelt, nicht nur fur makroskopische oder bewusste Beobachter.²¹Der Zustand des Systems ist beobachterabhangig, d. h., der Zustand ist spezifisch fur den Bezugsrahmen des Beobachters.²²[?]²³Eine Wellenfunktion kodiert lediglich die Erwartungen eines Akteurs fur zukunftige Erfahrungen. Sie ist nicht realer als eine Wahrscheinlichkeitsverteilung im Bayesianismus.²⁴Die Quantentheorie ist ein Instrument, das jeder Akteur nutzen kann, um seine Erwartungen zu steuern. Die Vergangenheit kommt nur insofern ins Spiel, als die individuellen Erfahrungen und das Temperament eines Agenten seine Vorannahmen beeinflussen.²⁵Obwohl der QBismus diese Terminologie vermeiden wurde. Eine anderung der Wellenfunktion, die ein Akteur einem System aufgrund einer Erfahrung zuschreibt, stellt eine anderung seiner Uberzeugungen uber weitere Erfahrungen dar, die er machen kann. Siehe Doxastische Logik.²⁶Intrinsisch: Beobachter, oder besser gesagt, Interakteure, sind fur den Formalismus ebenso wichtig wie die Systeme, mit denen sie interagieren.²⁷Keine kausale Beziehung.

1. [178] Diese Lösung des EPR-Paradoxons, die Rosen später als Bedingung bezeichnete, dass *die physikalische Realität das ist, was die Quantenmechanik zu beschreiben vermag*, wurde von Bohrs engen Mitarbeitern für ihre Klarheit gelobt. Heisenberg, Klein und Kramers gefiel besonders die Reduktion des EPR-Gedankenexperiments auf das bekannte Problem des „diaphragm with holes“. Die vielleicht interessantesten Reaktionen kamen von Bohrs altem Freund, dem Physiker C. W. Oseen, und dem Physiker und Philosophen Philipp Frank. Oseen hatte verstanden, was Bohr die ganze Zeit gesagt hatte: Vor einer Messung ist der Zustand eines Atoms in Bezug auf die gemessene Größe undefiniert. Frank sah, dass Bohr das EPR tatsächlich auf eine wesentliche Zweideutigkeit fixiert hatte. Was Frank am meisten gefiel, war die Folgerung, dass Physiker den Begriff und das Konzept der physikalischen Realität“ vermeiden sollten. Er verstand Bohr so, dass die Komplementarität die Messverfahren charakterisiert, nicht die gemessenen Dinge. Bohr räumte ein, dass er genau das gemeint hatte.
2. [264] Zitat: „*For a start, discussions of the Copenhagen interpretation in the literature are ambiguous between two different views of the wave function, both of which of course accept the Born interpretation. 5 Sometimes the Copenhagen (and Bohr) interpretation is associated with the epistemic view of the quantum state, according to which the quantum state is but a representation of our knowledge of the physical system, and thus not a real existing entity in itself. On this view the „collapse“ of the wave function is not a physical process, and it just reflects an update of our information about the system; see e.g. Zeilinger (1999). By contrast, the Copenhagen interpretation has also been associated with an ontological view of the quantum state, in which the wave function somehow describes a real wave, and the collapse is a real physical process - presumably induced by the observer. This ontological view is usually attributed to von Neumann in his 1932 textbook exposition of quantum mechanics; see e.g. Henderson (2010). [...] Thus, for Bohr, the wave function is a representation of a quantum system in a particular, classically described, experimental context. Three important points need to be made regarding this contextuality: 1) When a measurement is performed (that is, when an irreversible recording has been made; see below), then the context changes, and hence the wave function changes. This can formally be seen as a collapse of the wave function, with the square quotes indicating that we are not talking about a physical process in which a real wave collapses.*
3. [?] Zitat: „Of course it is entirely justified to imagine this transition, from the possible to the actual, moved to an earlier point of time, for the observer himself does not produce the transition; but it cannot be moved back to a time when the compound system was still separate from the external world, because such an assumption would not be compatible with the validity of quantum mechanics for the closed system. We see from this that a system cut off from the external world is potential but not actual in character, or, as BOHR has often expressed it, that the system cannot be described in terms of the classical concepts. We may say that the state of the closed system represented by a Hilbert vector is indeed objective, but not real, and that the classical idea of objectively real things must here, to this extent, be abandoned.“
4. [180] Zitat: „The description of atomic phenomena has in these respects a perfectly objective character, in the sense that no explicit reference is made to any individual observer and that therefore, with proper regard to relativistic exigencies, no ambiguity is involved in the communication of information.“
5. Bei der stochastischen Interpretation ist es nicht möglich, Geschwindigkeiten für die Teilchen zu

definieren, d. h. die Pfade sind nicht glatt (durch stochastische Prozesse überlagert, Zitterbewegung). Außerdem muss man den Markov-Prozess kennen, um die Bewegung der Teilchen zu jedem Zeitpunkt zu kennen. Wenn man jedoch die genauen Anfangsbedingungen und den Markov-Prozess kennt, ist die Theorie eine realistische Interpretation der Quantenmechanik.

6. In der Interpretation der konsistenten Geschichten ist der Kollaps ein legitimes Berechnungsverfahren, um die Präparation eines Quantenzustands zu beschreiben, aber er ist nicht mehr als eine bequeme Methode zur Berechnung von bedingten Wahrscheinlichkeiten.
7. Die Wellenfunktion fasst die möglichen Ergebnisse zusammen, wie z. B. die Quoten für ein Pferderennen. Das ist so, als würde man nach dem ontischen Status der Gewinnchancen eines Pferdes fragen, während das Rennen läuft. Existieren die Quoten? Ja. Haben sie irgendeinen Einfluss auf das, was das Pferd tut? Nein. Werden sie durch das Ergebnis bestätigt? Natürlich, denn sie fassen mögliche Ergebnisse zusammen.
8. Die Quantenmechanik liefert keine Details aus der Zeit vor dem „Kollaps“, wie z. B. die genaue Position einer Spin-Achse oder wie viel Grad die Polarisationsrichtung eines Photons von der Horizontalen abweicht. Zwei Photonen mit identischen Eigenschaften können unter denselben Testbedingungen unterschiedliche Ergebnisse liefern, weil
 - a) die Tests ungenau sind (wenn wir Leute bitten, „alle“ Fahrzeuge, die sie in einer Stunde sehen, entweder als Autos oder Busse einzustufen, wie werden sie dann Lastwagen, Krankenwagen und Motorräder einstufen?),
 - b) die Ergebnisse stochastisch sind und
 - c) die Tests die Eigenschaften der getesteten Gegenstände verändern können (wenn man ein Auto zu einem Mechaniker schickt und es gut läuft, bedeutet das, dass es gut lief, bevor man es in die Werkstatt brachte?)
9. In Analogie zu den Gewinnchancen bei einem Pferderennen ist der Zusammenbruch abgeschlossen, wenn das vorletzte Pferd die Ziellinie überquert, d. h. man braucht nicht mehr von Gewinnchancen zu sprechen, weil das, was vorher unbestimmt war, nun eine feststehende Tatsache ist.
10. Um auf die Analogie zu den Quoten für ein Pferderennen zurückzukommen, kann man keine „Gewissheit“ darüber haben, wie das Rennen ausgegangen ist, wenn man nur die Quoten vor dem Rennen kennt, aber andererseits braucht man vielleicht keine Gewissheit, um in der Welt „oft genug“ Erfolg zu haben.
11. Dies ist rein theoretisch. Allerdings ist nicht es nicht praktisch (oder wissenschaftlich) bei der quasi unendlichen Anzahl von „Dingen“, die im Spiel sind und die sich jeden Moment ändern, von einer universellen Wellenfunktion zu sprechen. Außerdem wäre die Gleichung für die universelle Wellenfunktion selbst ein Teil des Universums, so dass der Versuch, sie aufzustellen, wahrscheinlich zu einer kontraproduktiven Rekursionsschleife führen würde.

Übersicht über gängige Interpretationen

Die nachfolgenden Abschnitte listen weitere Interpretationen der Quantenmechanik auf.²⁸

Diese Interpretationen bieten verschiedene Perspektiven darauf, wie die Quantenmechanik die Natur der Realität beeinflusst. Jede Interpretation hat ihre eigenen Vor- und Nachteile und löst, je nach Standpunkt, verschiedene philosophische und methodologische Fragen *aus* oder *auf*.

Ensemble Interpretation: ;

Ensamble Interpretation [\(Wiki\)](#)

Die Ensemble-Interpretation betrachtet die Wellenfunktion eines Quantensystems nicht als Beschreibung eines einzelnen Systems, sondern als statistische Verteilung über ein Ensemble ähnlicher Systeme. Die Messergebnisse werden dann durch statistische Eigenschaften des Ensembles erklärt, anstatt durch individuelle Systeme.

Kopenhagener Interpretation: ;

Kopenhagener Interpretation [\(Wiki\)](#)
(Orthodoxe Interpretation)

Diese Interpretation, die von Physikern wie Niels Bohr und Werner Heisenberg entwickelt wurde, betont die Rolle des Beobachters bei der Messung quantenmechanischer Systeme. Sie besagt, dass ein Quantensystem in einem Zustand von Überlagerung existiert, bis es gemessen wird, und dass die Messung den Zustand des Systems kollabieren lässt.

Die Kopenhagener Interpretation ist die älteste der Interpretationen. Sie basiert auf Bohrs Begriff der *Komplementarität*. Bohr vertrat die Auffassung, dass das klassische und das quantenmechanische Modell zwei komplementäre Ansätze für die Physik sind, die beide notwendig sind. Bohr war der Ansicht, dass eine experimentelle Beobachtung die Wellenfunktion kollabieren oder zerreißen lässt (sic), um ihre künftige Entwicklung mit dem, was wir experimentell beobachten, in Einklang zu bringen. Bohr war sich darüber im Klaren, dass es keine Möglichkeit gab, den genauen Punkt zu bestimmen, an dem der Kollaps stattfand. Jeder Versuch, dies zu tun, würde eher zu einer anderen Theorie als zu einer Interpretation der bestehenden Theorie ergeben. Nichtsdestotrotz war er der Meinung, dass es mit der bewussten Beobachtung verbunden, da dies das ultimative Kriterium ist, an dem wir wissen, dass eine bestimmte Beobachtung stattgefunden hat.

Es ist wichtig hier anzumerken, dass es sich hier um die verbreitetste Interpretation handelt und den größten Konsens hat.

²⁸ Aufgrund der Vielzahl von Interpretationen, wird vor allem auf die sehr guten Wikipedia-Artikel verlinkt.

De-Broglie-Bohm-Theorie: ;

De-Broglie-Bohm-Theorie (Pilotwellen-Theorie)

Die De-Broglie-Bohm-Theorie (auch Pilotwellen-Theorie genannt) postuliert, dass Quantenteilchen sowohl eine materielle Teilchenkomponente als auch eine begleitende Pilotwelle haben. Die Pilotwelle determiniert die Bewegung der Teilchen, während die Teilchen selbst quantenmechanisch sind. Dies erklärt die scheinbare Unvorhersagbarkeit der Quantenmechanik aufgrund des Einflusses der verborgenen Pilotwelle.

Speziell die Bohmsche Sichtweise betrachtet Quantenteilchen als deterministisch und lokal, wobei verborgene Variablen die Ergebnisse von Messungen beeinflussen. Sie postuliert, dass Quantenteilchen eine wohldefinierte Position und Impuls haben, die jedoch aufgrund der Nichtlokalitat der Pilotwelle nicht direkt beobachtet werden konnen.

Bohms Interpretation ist ein explizit nichtlokales mechanistisches Modell. So wie Bohr das philosophische Prinzip der Komplementarität, als etwas ansah, das über die Quantenmechanik hinausgeht, sah Bohm eine tiefe Beziehung zwischen der Verletzung der Lokalität und der Ganzheit oder Einheit von allem, was existiert. Bohm war vielleicht der erste, der eine nichtlokale Natur der Quantenmechanik hervorhob.

Die stochastische Mechanik, wie sie hier dargestellt wird, hat viel mit der von David Bohm vorgeschlagenen kausalen Interpretation der Quantenmechanik gemeinsam. [218] An dieser muss man allerdings nur auf zwei wichtige Unterschiede hinweisen. Erstens ist die Theorie von Bohm vollständig deterministisch. Dies kann sowohl als Vorteil, als auch als Nachteil angesehen werden. Zweitens ist zu berücksichtigen, dass nur die stochastische Mechanik als eine völlig natürliche Verallgemeinerung der klassischen Mechanik auf Prozesse mit *intrinsischer Zufälligkeit* betrachtet werden kann. Dies kann von Bohms Interpretation der Quantenmechanik so nicht gesagt werden.

Quantenlogik: ;

Quantenlogik (Wiki)

Viele-Welten-Interpretation:

Viele-Welten-Interpretation (Wiki)

Die Viele-Welten-Interpretation, die von Hugh Everett vorgeschlagen wurde, postuliert, dass bei jeder Quantenmessung das Universum in alle möglichen Ergebnisse verzweigt. Es gibt daher unendlich viele Paralleluniversen, in denen jede mögliche Realität existiert. Diese Theorie wird

kontrovers bis negativ diskutiert und ist nach wie vor in der populärwissenschaftlichen Literatur präsent.

Die Verfechter der Viele-Welten-Interpretation der Quantenmechanik behaupten, dass ihre Interpretation die Einzige ist, die allein mit der Schrödinger-Gleichung ohne zusätzliche (Mess)-Postulate vereinbar ist. Nach dieser Interpretation führen *Messungen* dazu, dass sich das Universum in so viele Kopien *verzweigt*, wie die Wellenfunktion *Komponenten* hat. [218]

Abgesehen von ihrem bizarren Charakter leidet diese Interpretation an zwei sehr schwerwiegenden Mängeln:

- Die *Verzweigung* sollte von der Wahl der Basis abhängen,
- und ihre Ableitung der Wahrscheinlichkeitsinterpretation von $|\psi|^2$ in Situationen, in denen die verschiedenen „Ergebnisse“ nicht gleich wahrscheinlich sind, impliziert die Zirkularität der Behauptung, dass kleine $|\psi|^2$ kleine „Weltenfragmente“ bedeuten.

Um diese Schwierigkeiten zu überwinden, müsste man die Positionskoordinaten als etwas Besonderes betrachten und folgende Interpretationshypothese aufstellen:

Dass die *Anzahl der Welten* proportional zum Quadrat der Amplitude ist.

Dies kommt der stochastischen Mechanik schon sehr nahe. Nimmt man die Verzweigung in der Viele-Welten-Interpretation ernst, d. h. verlangt man von der Theorie, dass sie die Entwicklung einer einzelnen Welt durch Zeit und Verzweigung identifiziert, dann könnte man auch einfach sagen, dass die Positionskoordinaten einem stochastischen Prozess folgen, dessen marginale Einzelzeitverteilungen durch $|\Psi|^2$ gegeben sind. Die stochastische Mechanik liefert dann eine natürliche Beschreibung des Gesamtprozesses, der allerdings nicht vollständig durch die zeitlichen Randbedingungen allein bestimmt ist.

Von-Neumann-Wigner-Interpretation: ;

Many minds interpretation: ;

Many-minds-interpretation [\(Wiki\)](#)

Consistent histories: ;

Consistent histories [\(Wiki\)](#)

Transactional interpretation: ;

Transactional interpretation [\(Wiki\)](#)

Die Transactionale Interpretation, die von John G. Cramer entwickelt wurde, interpretiert Quantenereignisse als Wechselwirkungen zwischen fortlaufenden *Transaktionswellen*, die sowohl in die Vergangenheit als auch in die Zukunft reichen. Sie bietet eine alternative Sichtweise auf die Quantenmechanik, die die Rolle der Zeit in der Quantenphysik hervorhebt.

Theorie des objektiven Kollaps: ;

Theorie des objektiven Kollaps [\(Wiki\)](#)

Diese Interpretation postuliert, dass die Wellenfunktion eines Quantensystems bei der Messung spontan kollabiert, wodurch das System in einen bestimmten Zustand gebracht wird. Der Prozess des Kollapses wird jedoch nicht vollständig verstanden und bleibt eine der umstrittensten Aspekte der Quantenmechanik.

Relationale Quantenmechanik: ;

Relationale Quantenmechanik [\(Wiki\)](#)

Relationale Interpretation betont die Beziehung zwischen einem Quantensystem und dem Beobachter sowie zwischen verschiedenen Quantensystemen. Sie argumentiert, dass die Realität in Bezug auf diese relationalen Eigenschaften definiert ist, anstatt unabhängig von ihnen zu existieren.

Bayessche Quantenwahrscheinlichkeit: ;

[\(Wiki\)](#)

QBism (en: Quantum Bayesianism) betrachtet die Quantenmechanik aus einer subjektiven Bayesschen Perspektive, wobei die Wellenfunktion als subjektive Wahrscheinlichkeit interpretiert wird, die das Wissen oder den Glauben eines Beobachters über das System repräsentiert. Die Messung aktualisiert dann die persönliche Wahrscheinlichkeit des Beobachters über den Zustand des Systems.

Weitere: ;

weitere
[\(Wiki\)](#)
[\(Wiki\)](#)

Diese zusätzlichen Interpretationen bieten weitere Einblicke in die Natur der Quantenmechanik und zeigen die Vielfalt der philosophischen Ansätze, mit denen die Theorie interpretiert werden kann. Jede Interpretation hat ihren eigenen Ansatz, um die Eigenschaften der Quantenmechanik zu erklären.

3.2.1 Stochastische Mechanik

Herleitung der Schrödinger-Gleichung aus der klassischen Mechanik — Geschichtliche Entwicklung

Obwohl seit den 1960er Jahren bekannt ist, dass sich die Quantenmechanik sauber aus der klassischen Mechanik ableiten lässt, fristet diese Interpretation der Quantenmechanik immer noch ein Schattendasein. Vielen Experten ist die Herleitung der Grundgleichung der Quantenmechanik, also der Schrödinger-Gleichung, aus der klassischen Mechanik unbekannt. Sie steht zwangsläufig im Widerspruch zur allgemein akzeptierten *Kopenhagener Interpretation* der Quantenmechanik. Diese besagt, dass eine physikalische Beschreibung der mikroskopischen Welt als objektiv real existierend ohne Einbeziehung des Beobachters zwangsläufig zu Widersprüchen führt und daher falsch ist.

Die *Kopenhagener Schule* betrachtet gerade die Einbeziehung des Beobachters in eine Theorie des Verhaltens mikroskopischer Systeme als den entscheidenden neuen Gedanken, mit dem die Quantenmechanik über das traditionelle Denkschema der klassischen Physik hinausgeht und zu einer angemessenen Beschreibung des zweifellos nichtklassischen Verhaltens atomarer Systeme gelangt. Diese Auffassung steht in so deutlichem Widerspruch zur gewohnten *Physik des gesunden Menschenverstandes*, dass seit den Anfängen der Quantenmechanik bis heute unaufhörliche Versuche unternommen wurden, diesen eigenartigen *ideologischen Ballast* abzuschütteln, was sich bis heute in einer Unzahl von Interpretationen zur Quantenmechanik äußert.

Wie in [137], [184] beschrieben ist insbesondere die *Kopenhagener Schule*, die als kleinster Konsens der Quantenmechanik angesehen werden kann nicht unproblematisch, was die grundlegenden Annahmen angeht. Dies ist hier, die mathematische Umsetzung eines Konzepts der Einbeziehung eines Beobachters in eine Theorie. Überall dort, wo die physikalische Begründung des mathematischen Apparats unklar bleibt, wird mantraartig wiederholt, dass die Quantenmechanik per se unanschaulich sei - ein weiteres zentrales Dogma der *Kopenhagener Schule* – und daher könne man nicht die naiven Argumentationsweisen der klassischen Physik erwarten.

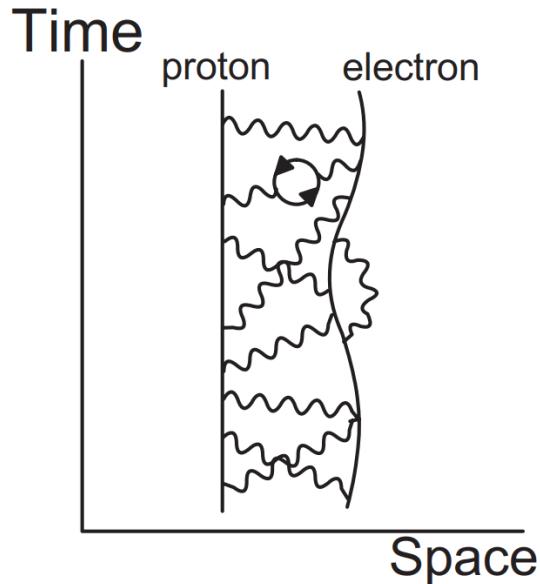


Abbildung 3.1: H-Atom: Proton und Elektron tauschen Photonen aus. Das schwere Proton ist praktisch stationär und hält das Elektron auf einer „zitterigen“ Bahn fest. Vakumpolarisation: Wenn das Austauschquant ein Elektron-Positron Paar bildet ist der Effekt eine Reduktion der effektiven Ladung. Das virtuelle Photonenfeld verhält sich wie ein Plasma.

Die Konzeption einer Erklärung der Quantenmechanik basierend auf *nichtdissipativer Diffusion* ist beinahe so alt wie das Konzept der Quantenmechanik selbst. Erstmals wies Schrödinger [189] auf die Möglichkeit und die Konsequenzen einer *Zitterbewegung* des Elektrons hin (Abb. 3.2.1 und 3.2.1). Der Begriff *SCHRÖDINGERSche Zitterbewegung* wird noch heute verwendet und im Kontext der Eigenwerte der Geschwindigkeitsoperatoren in Diracs relativistischer Elektronentheorie diskutiert (vgl. z.B. [191]). Jedoch wurde dieser Ansatz von Schrödinger den Gedanken nicht in aller Konsequenz quantitativ ausgearbeitet. Die potenzielle Verbindung zwischen Quantenmechanik und der Theorie der BROWNSchen Molekularbewegung wurde von Fürth [192] im Jahr 1933 ausführlich erörtert. Nach dem Krieg erfuhr diese Diskussion durch eine Reihe von Arbeiten erneut reges Interesse (vgl. Feynman [193]).

Eine konkretere Form erhielten die Bemühungen um eine stochastisch-mechanische Begründung der Quantenmechanik erst durch die Arbeiten von Weizel [194], [195], [196] und Fényes [197]. Weizel postulierte die Existenz von *Zeronen*, die – ähnlich wie bei der Feldtheorie der Elementarteilchen – durch Nullpunktsschwankungen aus dem Vakuumgrundzustand in Form virtueller Teilchen aller Art entstehen können. Diese Zeronen stoßen mit dem betrachteten Teilchen zusammen, ähnlich wie ein Kolloideteilchen mit den Molekülen einer Flüssigkeit, in der es eine Brownsche

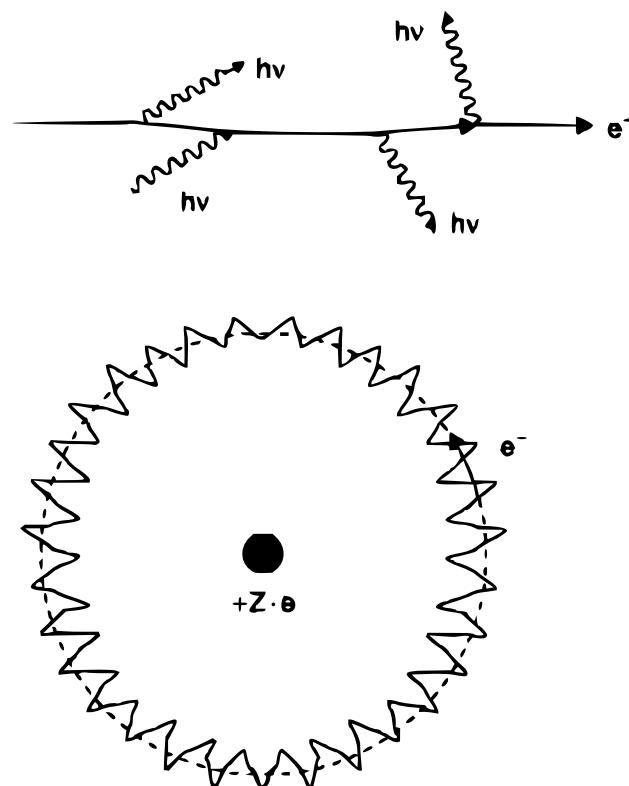


Abbildung 3.2: Illustration der Zitterbewegung eines Elektrons aufgrund der Emission und Absorption virtueller Photonen.

Bewegung ausführt. Erst durch die Veröffentlichung von Nelson [3], [4] erhielt dieses Konzept eine transparentere Gestalt. Daneben gab es zahlreiche weitere Beiträge zu diesem Thema, von denen hier nur die bedeutendsten von Bohm [198], [200], de Broglie [201], Landé [202], Comisar [203], Santos [204] und de la Persa Auerbach [205] genannt werden.

Die Arbeit von Bopp [207] strebt zwar ebenfalls eine korpuskularstatistische Begründung der Quantenmechanik an, kann sich jedoch nicht zu der radikalen Auffassung der Weizel-Fényes-Nelson-Theorie durchringen, wonach die in der Quantenmechanik realisierten statistischen Gesamtheiten im Prinzip nichts mit der Einwirkung irgendeiner Messanordnung zu tun haben. Aus diesem Grund fehlt dieser Arbeit die Überzeugungskraft des ünmittelbar verständlichen "Konzepts.

Selbst offensichtliche Widersprüche in der *Kopenhagener Interpretation* haben bisher nicht zu grundlegenden Korrekturen geführt. Im Gegenteil: Lehrbücher über Quantenmechanik, die seit ihrer Einführung in zahlreicher Fülle verfasst wurden, befinden sich in einem festen ideologischen Abhängigkeitsverhältnis zueinander. Zum Beispiel stellt Dirac in seinem 1930 veröffentlichten Buch "Quantum Mechanicsfest:

"... jedes Ergebnis einer Messung einer realen dynamischen Größe ist einer seiner Eigenwerte."

Diese Aussage findet sich inhaltlich in jedem modernen Lehrbuch der Quantenmechanik wieder. Zunächst scheint sie nur eine Definition des Begriffs **Eigenwert** als Ergebnis einer Messung zu sein. Innerhalb der Theorie wird jedoch diesem Begriff eine präzise mathematische Bedeutung zugeschrieben. Es besteht jedoch kein Zweifel daran, dass solche Eigenwerte grundsätzlich nicht direkt messbar sind. In Wirklichkeit können nur Differenzen zwischen Eigenwerten bestimmt werden. Die Messung dieser Differenzen ist jedoch immer mit einer gewissen Ungenauigkeit verbunden, die von der Kopplung des Systems an das Messgerät oder an einen *Informationsüberträger* (z.B. Strahlung) abhängt. Die Linien in den Spektren leuchtender atomarer Gase sind hierfür das bekannteste Beispiel: Diese Linien stellen die einzigen messbaren Informationen über die Energiestrukturen eines Atoms dar, aber sie entsprechen Differenzen zwischen den Energie-eigenwerten des betreffenden Atoms und nicht den Eigenwerten selbst. Darüber hinaus haben diese Linien eine gewisse Breite, sodass die Differenzen zwischen den Eigenwerten nicht absolut genau gemessen werden können.

Überall dort, wo die physikalische Begründung des mathematischen Apparats unklar bleibt, wird mantraartig wiederholt, dass die Quantenmechanik per se unanschaulich sei – ein weiteres zentrales Dogma der *Kopenhagener Schule* – und daher könne man nicht die naiven Argumentationsweisen der klassischen Physik erwarten.

4 Einführung

4.1 Geschichtlicher Abriß der Quantenmechanik

Die erste Anwendung der PLANCKSchen *Energie-Quantisierung* $E_n = n \cdot h\nu$ für einen Oszillator der Frequenz ν ergab sich in der Theorie der spezifischen Wärme (1907-1912 durch EINSTEIN, DEBYE, NERNST). BOHR konnte aus seiner Theorie vorhersagen, daß die PICKERING-Serie *keine* Wasserstoffserie, sondern eine Serie des He^+ ist (ganz geringe Abweichungen durch Kernbewegungen, *reduzierte Masse*).

Licht hat drei Eigenschaften:

- Frequenz/Energie
- Polarisation
- Intensität

Die *Verschärfung* des BOHR'schen Korrespondenzprinzips führt zur Quantenmechanik. Der Name Quantenmechanik stammt von M. BORN.

To Do 5 (Abriss ist noch unvollständig.):

5 Herleitung der Quantenmechanik aus der Theorie statistischer Systeme

Bevor auf die konkrete Herleitung der stochastischen Mechanik eingegangen wird, kann man die hier kurz die Herleitungen der Quantenmechanik und der stochastischen Mechanik vergleichen [218]:

- In der einfachen Herleitung der Quantenmechanik wird die **Poisson-Klammer** der klassischen Mechanik durch den **Kommutator** ersetzt. In Schrödingers Herleitung werden Energie und Impuls durch geeignete Differentialoperatoren in der Energiegleichung ersetzt. Hier ist zu erwähnen, dass die Ableitungen rein formal sind.
- Um die stochastische Mechanik abzuleiten, betrachten allgemeine Diffusionsprozesse, d. h. Prozesse, die eine allgemeine Drift besitzen. Die stochastische Mechanik führt dann zu Lösungen $\rho_{t(r)} = |\Psi_{t(r)}|^2$. Dies ergibt sich aus den stochastischen Varianten von:
 1. Kraft = Masse \times Beschleunigung
 2. und dem Lagrangeschen Variationsprinzip.

Anmerkung 1:

Die stochastische Mechanik entsteht also nicht nur auf formale Weise, sondern als natürliche Erweiterung der klassischen Mechanik auf Prozesse mit *intrinsischer Zufälligkeit*.

5.1 Beschreibung stochastischer klassischer Systeme von Punktmassen

Im folgenden wird die Quantenmechanik auf eine reine Beschreibung stochastischer, klassischer Systeme von Punktmassen zurückgeführt. Eine tiefergehende Einführung in die **Stochastik** findet sich im Abschnitt 15.

5.1.1 Definition eines stochastischen Systems

Ein physikalisches System heißt *stochastisch*, wenn sein Zustand zu irgendeiner Zeit t nicht eindeutig aus dem Zustand zur Zeit $t - \Delta t$ ($\Delta t > 0$) berechnet werden kann, sondern die Zustandsänderung im Zeitintervall Δt Zufallsgesetzen unterworfen ist, so daß nur Wahrscheinlichkeitsaussagen für die Zustandsänderungen möglich sind. In Praxi ist häufig in guter Näherung eine spezielle Klasse von stochastischen Systemen realisiert:

Definition 1:

Wenn die Wahrscheinlichkeit für die Zustandsänderung mit dem Zeitintervall $(t, t + \Delta t)$ (mit $\Delta t \rightarrow 0$) nur vom Zustand des Systems zur Zeit t abhängt, dagegen nicht vom Systemzustand vor diesem Zeitpunkt, dann nennt man ein solches System eine *MARKOFFSche Kette*.

5.1.2 Einsteins Gesetz für das mittlere Verschiebungsquadrat einer Punktmasse unter Wirkung stochastischer Kräfte eines Einbettungs-Mediums endlicher Zähigkeit

Ein Teilchen, das sich unter Wirkung von Stößen anderer Teilchen aus seiner Umgebung in einem Medium endlicher Zähigkeit bewegt, erfährt Kräfte, die es zu einer unregelmäßigen Bewegung veranlassen. Diese Kräfte bewirken im Mittel über viele Stöße eine Abbremsung des Teilchens, wenn es zu irgendeiner Zeit in diesem Medium eine mittlere Geschwindigkeit hatte. Für die Beschreibung des Bewegungsverhaltens des Teilchens ist es daher zweckmäßig, die Kraft, welche es in jedem Augenblick vom umgebenden Medium erfährt, in eine mittlere Bremskraft zu zerlegen, die dem Betrag der Teilchengeschwindigkeit proportional ist, und in eine Kraft \vec{F}_s , die Zufallsgesetzen gehorcht und deren Zeitmittel Null ist.

Man betrachte ein Teilchen der Masse m_0 , das sich unter der Wirkung der Stöße umgebender Teilchen in einem Medium endlicher Zähigkeit bewegt. Die stochastische Kraft $\vec{F}_s = (F_{1s}, F_{2s}, F_{3s})$ die am Teilchen m_0 angreift, hat die folgende *Wahrscheinlichkeitsdichte*:

$$\wp_{(F_{is})} = \frac{1}{\sqrt{\pi} F_{s0}} \cdot e^{-\frac{F_{is}^2}{F_{s0}}} \quad i = 1, 2, 3 \quad (5.1)$$

mit

$$F_{s0} = \frac{1}{\tau_s} \cdot \sqrt{m_0 \cdot k_b T} \quad (5.2)$$

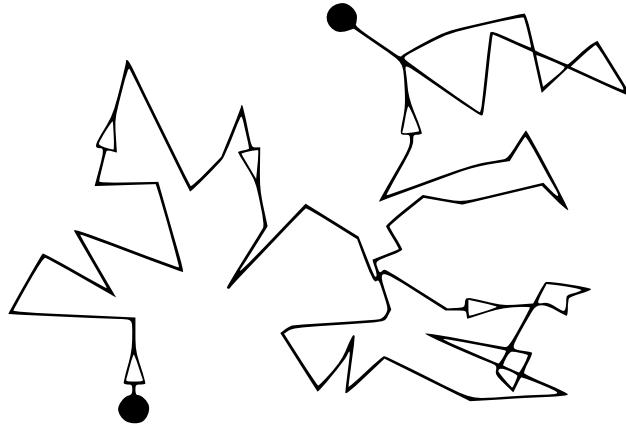


Abbildung 5.1: Bewegung eines Teilchens unter Wirkung einer stochastischen Kraft (Brownsche Bewegung).

$$\tau_s = \text{mittlere Stoßzeit} \quad (5.3)$$

$$k_b = \text{Boltzmann-Konstante} \quad (5.4)$$

$$T = \text{thermodynamische Temperatur} \quad (5.5)$$

Der mittlere Impulsübertrag pro Stoß ergibt sich als

$$\Delta P_i = F_{so} \cdot \tau_s \quad (i = 1, 2, 3) \quad (5.6)$$

und die mittlere kinetische Energie des *Aufteilchens* m_0 :

$$\left\langle \frac{(\Delta P_i)^2}{2m_0} \right\rangle = \frac{(F_{so}\tau_s)^2}{2m_0} \quad (5.7)$$

hieraus folgt

$$\frac{\langle (\Delta P_i)^2 \rangle}{2m_0} = \frac{k_b T}{2m_0} \quad (\text{Gleichverteilungssatz}) \quad (5.8)$$

Es ergibt sich außerdem

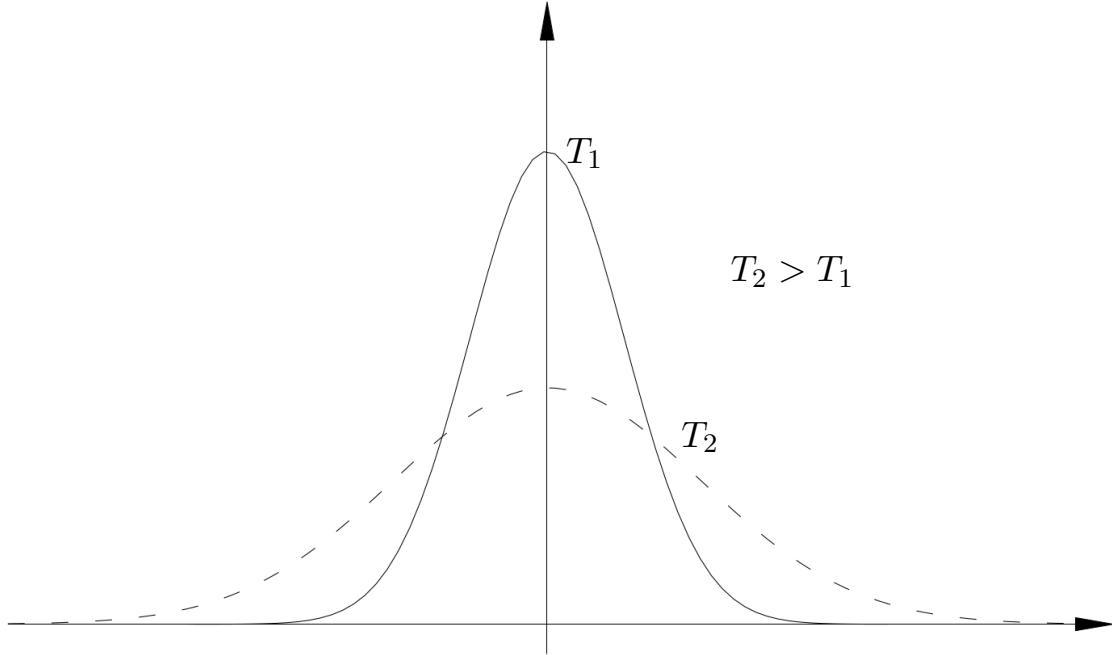


Abbildung 5.2: Wahrscheinlichkeitsdichte für verschiedene Temperaturen

$$\frac{1}{2m_0} \langle P_i \rangle^2 = \frac{1}{2m_0} \int P_i^2 \tilde{w}_{(P_i)} dP_i \quad (i = 1, 2, 3) \quad (5.9)$$

mit $P_i = F_{is} \cdot \tau_s$ und $\tilde{w}_{(P_i)} = w_{(F_{is})} = w_{(F_{is})}$

$$\langle P_i \rangle = \int P_i \tilde{w}_{(P_i)} dP_i = 0 \quad (5.10)$$

To Do 6 (Fehler): $P_i \tilde{w}_{(P_i)}$ ist eine ungerade Funktion von P_i

mit einer ungeraden Funktion von P_i folgt:

$$\langle (\Delta P_i)^2 \rangle = \langle P_i^2 \rangle - \langle P_i \rangle^2 = \langle P_i^2 \rangle \quad (5.11)$$

$$\frac{1}{2m_0} \langle P_i^2 \rangle = \frac{k_b T}{2} \quad (5.12)$$

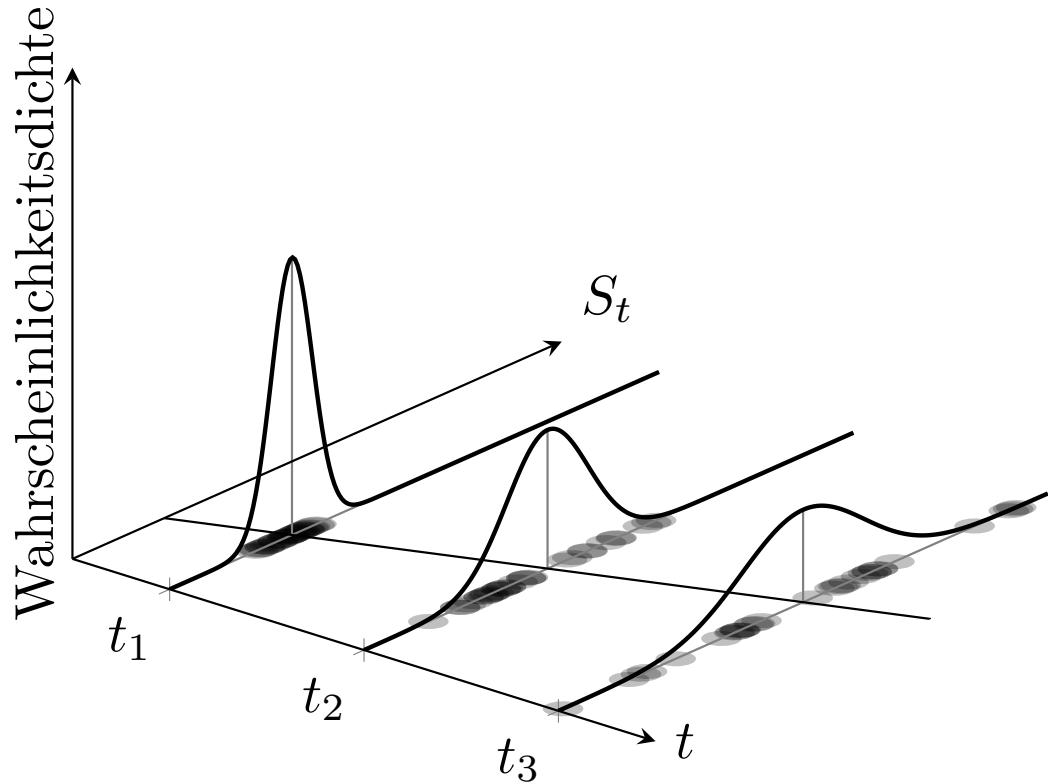


Abbildung 5.3: Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte über Zeit und Ort.

Zur Berechnung des mittleren Verhaltens eines Teilchens konstruiere man sich ein Ensamble von N identischen, vollständig unabhängigen (d.h. weit voneinander getrennten) Systemen. In jedem System liege das gleiche Kraftfeld $\vec{F}_{(r)}$ vor, in dem sich ein Teilchen (der selben Art) bewegen soll.

Die Position des Teilchens im ν -ten System ($\nu = 1, 2, 3, \dots, N$) zur Zeit t sei $\vec{r}_\nu(t)$. Betrachtet man eine Stelle \vec{r} im Inneren eines Teilvolumens ΔV des Gesamtvolumens V . Man definiere:

$$\epsilon_{\nu(\vec{r}, t)} = \int_{\Delta V_{V_0}} \delta_{(\vec{r} - \vec{r}')^3} d^3 r' = \begin{cases} 1 & \text{wenn } \vec{r}_\nu(t) \text{ in } \Delta V \\ 0 & \text{wenn } \vec{r}_\nu(t) \text{ nicht in } \Delta V \end{cases} \quad (5.13)$$

Scharmittel für das Antreffen des Aufteilchens im Teilvolumen

$$\Delta V : \frac{\Delta N}{N} = \frac{1}{N} \sum_{\nu=1}^N \epsilon_{\nu}(\vec{r}, t) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{} \mathcal{W}_{(\vec{r}, t)} \quad (5.14)$$

Entsprechend ist die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$w_{(\vec{r}, t)} = \varrho(\vec{r}, t) \quad (5.15)$$

$$= \lim_{\begin{array}{l} \Delta V \rightarrow 0 \\ \delta N \rightarrow \infty \end{array}} \frac{\mathcal{W}_{(\vec{r}, t)}}{\Delta V} \quad (5.16)$$

$$(5.17)$$

es gilt

$$\int \varrho_{(\vec{r}, t)} d^3 r = 1 \quad (5.18)$$

Sind $\{\vec{v}_{(\vec{r}, t)}\}$ die Geschwindigkeiten des Teilchens zur Zeit t , so wird der Ausdruck

$$\vec{v}_{(\vec{r}, t)} = \lim_{\begin{array}{l} \Delta V \rightarrow 0 \\ \delta N \rightarrow \infty \end{array}} \frac{\sum_{\nu=1}^N \epsilon_{\nu}(\vec{r}, t) \cdot \vec{v}_{\nu}(t)}{\sum_{\nu=1}^N \epsilon_{\nu}(\vec{r}, t)} \quad (5.19)$$

das Scharmittel der Geschwindigkeit genannt. Sei $\vec{\sigma}_{\nu(t)}$ der *Verschiebungsstrom* des ν -ten Teilchens, d. h. des *Aufteilchens* im ν -ten System.

$$\vec{\sigma}_{\nu} = (\sigma_{1\nu}, \sigma_{2\nu}, \sigma_{3\nu}) \quad (5.20)$$

Dann gilt

$$m_0 \ddot{\sigma}_{i\nu} + \frac{m_0}{\tau} \dot{\sigma}_{i\nu} = F_i + F_{is\nu}(t) \quad (i = 1, 2, 3) \quad (5.21)$$

Diese Gleichung wird als **Langevin-Gleichung** bezeichnet. Mit $\vec{F} = (F_1, F_2, F_3)$ und $F_i = -\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_i}$ die von außen angreifende Kraft ergibt sich:

$$\ddot{\sigma}_{i\nu} + \frac{1}{\tau} \cdot \dot{\sigma}_{i\nu} = f_i + f_{is\nu} \quad (5.22)$$

mit

$$f_i = \frac{F_i}{m_0} \quad (5.23)$$

und

$$f_{is\nu} = \frac{F_{iso(t)}}{m_0} \quad (5.24)$$

Sei $\ddot{\sigma}_{s\nu}$ der Teil der Teilchenverrückung $\dot{\sigma}_\nu$, der durch die Anwesenheit der statistischen Kraft zusätzlich auftritt und $\ddot{\sigma}_{\nu c}$ die Teilchenverrückung bei Abwesenheit von $\vec{F}_{\nu s}$, dann zerlege nun in $\sigma_{i\nu} = \sigma_{ci\nu} + \sigma_{si\nu}$ (Index c: übliche Kraft (*convective*), s: stochastische Kraft) mit:

$$\ddot{\sigma}_{si\nu} + \frac{1}{\tau} \cdot \dot{\sigma}_{si\nu} = f_{iso(t)} \quad (5.25)$$

$$\ddot{\sigma}_{ci\nu} + \frac{1}{\tau} \cdot \dot{\sigma}_{ci\nu} = f_{icr(t)} \quad (5.26)$$

und bilde $\sigma_{sj\nu}$

$$\sigma_{sj\nu} \cdot \ddot{\sigma}_{sj\nu} + \frac{1}{\tau} \sigma_{sj\nu} \cdot \dot{\sigma}_{sj\nu} = \sigma_{sj\nu} \cdot f_{iso(t)} \quad (5.27)$$

Nun ist

$$\frac{d}{dt} (\sigma_{sj\nu} \cdot \dot{\sigma}_{si\nu}) = \sigma_{sj\nu} \cdot \ddot{\sigma}_{si\nu} + \dot{\sigma}_{sj\nu} \cdot \dot{\sigma}_{si\nu} \quad (5.28)$$

Als Lösung von 5.26 (partikuläre Lösung) ergibt sich:

To Do 7 (nächste Formel falsch):

$$\dot{\sigma}_{si\nu}(t) = e^{-\frac{t}{\tau}} \cdot \int \infty^t f_{is\nu}(\tilde{u}) e^{\frac{\tilde{u}}{\tau}} d\tilde{u} \quad (5.29)$$

Dies ist das sog. **Duhamel-Integral**.

Denn die Ableitung nach t ergibt:

$$\dot{\sigma}_{si\nu}(t) = -\frac{1}{\tau} \cdot \dot{\sigma}_{si\nu}(t) + f_{si\nu}(t)$$

also ist 5.26 erfüllt.

Man substituiere: $t - \tilde{u} = t' \rightarrow \tilde{u} = t - t'$, $d\tilde{u} = -dt'$

$$\dot{\sigma}_{si\nu}(t) = \int_0^\infty f_{is\nu}(t - t') e^{-\frac{t'}{\tau}} dt' \quad (5.30)$$

Dies ist das sog. *Nachwirkungsintegral*.

Wegen

$$\sigma_{si\nu}(t) = \int_{-\infty}^t \dot{\sigma}_{si\nu}(t'') dt'' \quad (5.31)$$

(Bildung des Scharmittels) ist¹

$$\langle \sigma_{si\nu}(t) f_{si\nu}(t) \rangle = \int_0^\infty e^{-\frac{t'}{\tau}} \left[\int_{-\infty}^t \langle f_{si\nu}(t'') \cdot f_{is\nu}(t) \rangle dt'' \right] dt' \quad (5.32)$$

Der Teil in der eckigen Klammer ist dabei Null:

$$\left[\int_{-\infty}^t \langle f_{si\nu}(t'') \cdot f_{is\nu}(t) \rangle dt'' \right] = 0$$

weil $f_{si(t'')}$ ² und $f_{si(t)}$ für $t''' \neq t$ statistisch unabhängig ist (Spezielle Folge der MARKOFF-Kette).

Also gilt $\langle \sigma_{si\nu} f_{si\nu} \rangle = 0$ Analog gilt:

$$\langle \dot{\sigma}_{sj\nu}(t) \dot{\sigma}_{si\nu}(t) \rangle = \delta_{ij} \dot{\sigma}_{si}^2(t) \quad (5.33)$$

mit $\dot{\sigma}_{si}^2 = \langle \dot{\sigma}_{si\nu}^2 \rangle$

Ist T die Temperatur des *Einbettungsmediums*, so gilt nach dem Gleichverteilungssatz:

$$\dot{\sigma}_{si}^2 = \frac{1}{m_0} k_b T \quad (i = 1, 2, 3) \quad (5.34)$$

¹Im folgenden ist statt $f_{is\nu}$: $f_{si\nu}$ geschrieben

²da: $t''' = t'' - t'$

Anmerkung 2:

Die Geschwindigkeitskomponenten für unterschiedliche Raumrichtungen sind statistisch unabhängig.

Bildet man das **Scharmittel** von $\sigma_{si\nu}$ (Gl. 5.26) so erhält man:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\sigma_{sj}\dot{\sigma}_{si}) + \frac{1}{\tau} (\sigma_{sj}\dot{\sigma}_{si}) = \frac{1}{m_0} k_b T \delta_{ij} \quad (5.35)$$

Anmerkung 3:

Man beachte: Nach der Scharmittelbildung wird $\sigma_{si}(t)$ zusätzlich ortsabhängig, und deshalb steht $\frac{\partial}{\partial t}$ statt $\frac{d}{dt}$

Die Lösung der zur obigen Differentialgleichung gehörigen homogenen Differentialgleichung lautet:

$$\sigma_{sj}\dot{\sigma}_{si} = g_{(\vec{r})} \cdot e^{-\frac{t}{\tau} \cdot (t - t_0)} \quad (5.36)$$

mit $g_{(\vec{r})}$: beliebige, stetige Funktion von \vec{r} . Partikuläre Lösung der inhomogenen Differentialgleichung ist:

$$\sigma_{sj}\dot{\sigma}_{si} = \frac{\tau}{m_0} k_b T \delta_{ij} \quad (5.37)$$

Die allgemeine Lösung von 5.35 ist die Summe von 5.36 und 5.37:

$$\sigma_{sj}\dot{\sigma}_{si} = \frac{\tau}{m_0} k_b T \delta_{ij} + g_{(\vec{r})} \cdot e^{-\frac{t}{\tau} \cdot (t - t_0)} \quad (5.38)$$

Damit wird für $\Delta t = t - t_0 \gg \tau$:

$$\sigma_{sj}\dot{\sigma}_{si} = \frac{\tau}{m_0} k_b T \delta_{ij} \quad (5.39)$$

Wegen $\delta_{ij} = \delta_{ji}$ ist $\dot{\sigma}_{sj}\sigma_{si} = \dot{\sigma}_{si}\sigma_{sj}$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\sigma_{sj} \dot{\sigma}_{si}) = \frac{\tau}{m_0} k_b T \delta_{ij} \quad (5.40)$$

Bildet man nun auf beiden Seiten $\int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} (\dots) dt'$ mit der Anfangsbedingung $\sigma_{si(t_0)} = 0$ ($i = 1, 2, 3$) und schreibe die \vec{r} -Abhangigkeit von σ explizit.

$$\sigma_{sj(\vec{r}, t_0 + \Delta t)} \sigma_{si(\vec{r}, t_0 + \Delta t)} = 2\nu \sigma_{ij} \Delta t \quad (5.41)$$

mit

$$\nu = \frac{\tau}{m_0} k_b T \quad (\text{kinematische Zahigkeit/Viskositat}) \quad (5.42)$$

Die Gleichungen 5.41, 5.42 heien EINSTEINSche Relation [212]. Die ubliche Kurzform von 5.41 ist:

$$\bar{\Delta X}_i^2 = 2\nu \Delta t \quad (i = 1, 2, 3) \quad (5.43)$$

Die Gleichung 5.41 lasst sich noch in einer anderen Form schreiben:

Sei $\rho_{\Delta t}(\vec{r}, \vec{\sigma}, t) d^3\sigma$ die Wahrscheinlichkeit dafur, da ein Teilchen, das mit Sicherheit zur Zeit t an der Stelle \vec{r} war, nach Ablauf der Zeit Δt im Volumen $d^3\sigma$ in der Umgebung der Stelle $\vec{r} + \vec{\sigma}$ anzutreffen. Dann gilt (siehe Gl. 5.19 mit $\sigma_{sj\nu} \sigma_{si\nu}$ statt \vec{v}_ν und $t + \delta t$ statt t)

$$\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \Delta V \rightarrow 0}} \left[\frac{1}{\sum \nu = 1^N \epsilon_\nu} \sum_{\nu=1}^N \epsilon_\nu \cdot \sigma_{sj\nu} \cdot \sigma_{si\nu} \right] = \sigma_{sj(\vec{r}, t + \Delta t)} \sigma_{si(\vec{r}, t + \Delta t)} \quad (5.44)$$

$$= \int \sigma_{sj} \cdot \sigma_{si} \rho_{\Delta t}(\vec{r}, \sigma_s, t) \cdot d^3\sigma_s \quad (5.45)$$

ber alle $\vec{\sigma}_s$.

Man kann im folgenden stets nur die von $f_{si}(t)$ erzeugten Verschiebungen σ betrachten. Deshalb wird im folgenden bei $\sigma_{...}$ der Index $_s$ weggelassen.

Damit lässt sich 5.41 schreiben als (mit t statt t_0):

$$\int \sigma_j \sigma_i \rho_{\delta t_{(\vec{r}, \vec{\sigma}, t)}} d^3 \sigma = 2\nu \Delta t \sigma_{ij} \quad (5.46)$$

Man beachte:

$$\int \rho_{\delta t_{(\vec{r}, \vec{\sigma}, t)}} d^3 \sigma = 1 \quad (5.47)$$

5.1.3 Die Fokker-Planck-Gleichung

(Wiki: [Fokker-Planck-Gleichung](#))

us der oben gegebenen Definition von $\rho_{\Delta t_{(\vec{r}, \vec{\sigma}, t)}}$ folgt sofort der nachstehende Zusammenhang zwischen der Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Aufteilchens an der Stelle $\vec{r} - \vec{\sigma}$ zur Zeit t , $\rho_{(\vec{r} - \vec{\sigma}, t)}$, und der Dichte seiner Aufenthaltswahrscheinlichkeit an der Stelle \vec{r} zur Zeit $t + \Delta t$, $\rho_{(\vec{r}, t + \Delta t)}$:

Man schreibe im folgenden für $\rho_{(\vec{r}, t)}$ stets $\rho_{(\vec{r}, t)}$. Es gilt:

$$\rho_{(\vec{r}, t + \Delta t)} = \int \rho_{(\vec{r} - \vec{\sigma}, t)} \rho_{\Delta t_{(\vec{r} - \vec{\sigma}, \vec{\sigma}, t)}} d^3 \sigma \quad (5.48)$$

Anmerkung 4:

Die Energieerhaltung ist nicht zwangsläufig gewährleistet $1MeV$ pro e^+ / e^- -Paar \rightarrow Verletzung der Energie lokal bei $\Delta E \Delta t = \hbar$. Vakuumfluktuationen deshalb Streuung bei der Bewegung.^a

^aEdward Nelson, Derivation of the Schrödinger equation from the Newtonian mechanics (1966) Phys. Rev.

Zur Erinnerung: Man betrachte ein Elementarvolumen $d^3 r$ um die Stelle \vec{r} herum und frage danach, wie groß die Zahl der Teilchen pro Volumeneinheit an dieser Stelle zur Zeit $t + \Delta t$ ist, wenn durch Streuung aus anderen Volumina $d^3 r$ um die Stelle $\vec{r} - \vec{\sigma}$ herum Teilchen aus dem *Aufvolumen* $d^3 r$ von \vec{r} gelangen.

Wenn die Wahrscheinlichkeitsdichte in diesem anderen Volumina zur Zeit t $\rho_{(\vec{r} - \vec{\sigma}, t)}$ ist und die Übergangswahrscheinlichkeit von $\vec{r} - \vec{\sigma}$ innerhalb der Zeit Δt mit $\rho_{\Delta t_{(\vec{r} - \vec{\sigma}, \vec{\sigma}, t)}}$ bezeichnet wird. Dann gilt:

$$\rho_{(\vec{r}, t + \Delta t)} = \int \rho_{(\vec{r} - \vec{\sigma}, t)} \rho_{\Delta t_{(\vec{r} - \vec{\sigma}, \vec{\sigma}, t)}} d^3 \sigma \quad (5.49)$$

Diese Gleichung wird als [Smoluchowski-Gleichung](#) oder als [Smoluchowski-Chapman-Emshog](#) bezeichnet.

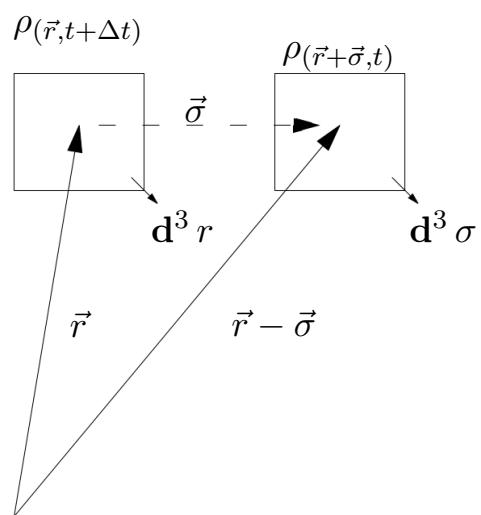


Abbildung 5.4: Skizze zur Smoluchowski-Gleichung

Man approximiere im folgenden den Integranten

$$G_{(\vec{r} - \vec{\sigma}, t)} = \rho_{(\vec{r} - \vec{\sigma}, t)} \rho_{\Delta t(\vec{r} - \vec{\sigma}, t)}$$

bezüglich der $\vec{r} - \vec{\sigma}$ -Ortsabhängigkeit durch ein TAYLOR-Polynom zweiten Grades an der Stelle \vec{r} mit $\vec{r} - \vec{\sigma} = \tilde{\vec{r}}$:

$$\rho_{(\vec{r}, t + \Delta t)} = \rho_{(\vec{r}, t)} \int \rho_{\Delta t(\vec{r}, \vec{\sigma}, t)} d^3\sigma \quad (5.50)$$

$$- \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_{(\vec{r}, t)} \int \sigma_i \rho_{\Delta t(\vec{r}, \vec{\sigma}, t)} d^3\sigma \quad (5.51)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \rho_{(\vec{r}, t)} \int \sigma_i \sigma_j \rho_{\Delta t(\vec{r}, \vec{\sigma}, t)} d^3\sigma \quad (5.52)$$

$$(5.53)$$

Da $\rho_{\Delta t(\vec{r}, \vec{\sigma}, t)}$ die Bedeutung einer Wahrscheinlichkeitsdichte hat, gilt:

$$\int \rho_{\Delta t(\vec{r}, \vec{\sigma}, t)} d^3r = 1 \quad (5.54)$$

Andererseits ist:

$$\int \sigma_i \rho_{\Delta t(\vec{r}, \vec{\sigma}, t)} d^3r = \nu_{ic(\vec{r}, t)} \cdot \Delta t \quad (5.55)$$

Der Index c in der Größe $\nu_{ic(\vec{r}, t)}$ steht dabei für *convective*. Ferner gilt mit Gleichung 5.2:

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \rho_{(\vec{r}, t)} = \int \sigma_i \sigma_j \rho_{\Delta t(\vec{r}, \vec{\sigma}, t)} d^3\sigma \quad (5.56)$$

$$= 2\nu \Delta t \delta_{ij} \quad (5.57)$$

Der nach dem Einsatz entstehende Ausdruck kann in der Form geschrieben werden:

$$\rho_{(\vec{r}, t + \Delta t)} = \rho_{(\vec{r}, t)} - \Delta t (\vec{\nabla} \rho \vec{v}_c) + \nu \underline{\Delta} \rho \Delta t \quad (5.58)$$

To Do 8 (Link überprüfen.): Link ist fehlerhaft.

(Δ bezeichnet an dieser Stelle den Laplace-Operator). Dabei wurde berücksichtigt:

$$\operatorname{div} \rho \vec{v}_c = \frac{\partial}{\partial x} \rho v_{xc} + \frac{\partial}{\partial y} \rho v_{yc} + \frac{\partial}{\partial z} \rho v_{zc} \quad (5.59)$$

$$= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \rho v_{ic} \quad (5.60)$$

Anmerkung 5 (Nebenrechnung):

Nach 5.42 ist:

$$\nu = \frac{k_b T}{m_0} \tau \left[\frac{\text{Energie} \times \text{Zeit}}{\text{Masse}} \right] \quad (\text{ergibt später } h) \quad (5.61)$$

Man substituiere jetzt $\rho_{(\vec{r},t)}$ auf beiden Seiten der obigen Gleichung. Nun kann man durch Δt dividieren und den Grenzübergang $\Delta t \rightarrow 0$ durchführen:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\rho_{(\vec{r},t+\Delta t)} - \rho_{(\vec{r},t)}}{\Delta t} = \operatorname{div} (\rho_{(\vec{r},t)} v_{c(\vec{r},t)}) + \nu \underline{\Delta} \rho_{(\vec{r},t)} \quad (5.62)$$

$$= \frac{\partial \rho_{(\vec{r},t)}}{\partial t} \quad (5.63)$$

d.h.

$$\frac{\partial \rho_{(\vec{r},t)}}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho_{(\vec{r},t)} v_{c(\vec{r},t)}) - \nu \underline{\Delta} \rho_{(\vec{r},t)} = 0 \quad (5.64)$$

Diese Gleichung wurde von Fokker und Planck [213] herleitet. Sie stellt einen Spezialfall der zweiten Kolmogoroffschen Differentialgleichung dar, die von Kolmogoroff [215] in einer Arbeit über die analytischen Methoden der Wahrscheinlichkeitsrechnung abgeleitet wurde.

Die Gleichung 5.64 ist das Ergebnis des Grenzübergangs $\Delta t \rightarrow 0$ der eigentlich wegen der zuvor verwandten Einstein-Beziehung 5.2 unzulässig ist, da diese ja nur unter der Voraussetzung (d. h. $\Delta t \gg \tau$) gilt. Die in 5.64 auftretende zeit t ist also mindestens um die Bremszeit τ unbestimmt. Dies gilt ebenso für die Navier-Stokes-Gleichung, die im nächsten Abschnitt hergeleitet werden.

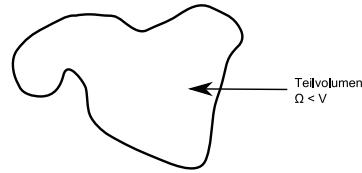


Abbildung 5.5: Abbildung mit Teilvolumen $\Omega < V$

Anmerkung 6:

Der Wellencharakter wird durch die **Rauschstruktur** des Raumes hervorgerufen. Der *Wellencharakter* (Dualismus) ist vollständig durch die klassische Mechanik von Teilchen beschreibbar.

Man beachte jetzt, daß $\rho_{(\vec{r},t)}$ grundsätzlich die Kontinuitätsgleichung erfüllen muß:

$$\frac{\partial \rho_{(\vec{r},t)}}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \cdot v) = 0 \quad (\text{Kontinuitätsgleichung}) \quad (5.65)$$

Grundsätzlich gilt immer:

$$\int_V \rho_{(\vec{r},t)} d^3r = 1 \quad \forall t \quad (5.66)$$

$$\frac{N_\Omega}{N} = \int_\Omega \rho_{(\vec{r},t)} d^3r < 1 \quad (5.67)$$

Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j} ist gegeben durch (nach dem **Gaußscher Integralsatz**):

$$\vec{j}_{(\vec{r},t)} = \rho_{(\vec{r},t)} \cdot \vec{v}_{(\vec{r},t)} \quad (5.68)$$

hieraus ergibt sich dann (mit Hilfe des GAUSSSchen Satzes):

$$\int_{F_\Omega} \vec{j}_{(\bar{r},t)} \cdot d^3r = -\frac{\dot{N}_\Omega}{N} \quad (5.69)$$

$$= \int_\Omega \frac{\partial}{\partial t} \rho_{(\bar{r},t)} d^3r \quad (5.70)$$

$$= \int_\Omega \operatorname{div} \vec{j}_{(\bar{r},t)} d^3r \quad (5.71)$$

$$(5.72)$$

Mit dem Mittelwertsatz der Integralrechnung ergibt sich:

$$= \operatorname{div} \vec{j}_{(\bar{r},t)} \Omega \quad (5.73)$$

$$= -\frac{\partial}{\partial t} \rho_{(\bar{r},t)} \Omega \quad (5.74)$$

Es folgt somit sofort

$$\operatorname{div} \vec{j}_{(\bar{r},t)} = -\frac{\partial}{\partial t} \rho_{(\bar{r},t)} = -\dot{\rho}_{(\bar{r},t)} \quad (5.75)$$

Also wird im Limes $\Omega \rightarrow 0$, wenn alle Volumina den Punkt \bar{r} erhalten:

$$\operatorname{div} \vec{j}_{(\bar{r},t)} = -\dot{\rho}_{(\bar{r},t)} \quad (5.76)$$

Wobei der Term $\vec{j}_{(\bar{r},t)} = \dot{\rho}_{(\bar{r},t)} \vec{v}_{(\bar{r},t)}$ ist.

Anmerkung 7:

Dieser Ausdruck ist vergleichbar mit den Erhaltungssätzen der Elektrodynamik: Energie und der Hydrodynamik: Massendichte.

Man führt jetzt eine *Diffusionsstromdichte* j_D ein, die definiert ist durch:

$$\vec{j}_D = \vec{j} - \rho \vec{v}_c \quad (5.77)$$

Der Ausdruck $\rho \vec{v}_c$ steht dabei für die *Konvektionsstromdichte*. Also gilt:

$$\vec{j} = \vec{j}_D + \vec{j}_c \quad (5.78)$$

mit $\vec{j}_c = \rho \vec{v}_c$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} (\vec{j}_d + \vec{j}_c) = 0 \quad (5.79)$$

Oder:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_d + \operatorname{div} \vec{j}_c = 0 \quad (5.80)$$

Demnach folgt mit Verwendung von 5.64, wo man $-\nu \Delta \rho$ ersetzt durch die Form $\nu \operatorname{div} \operatorname{grad} \rho = +\operatorname{div} (-\nu \operatorname{grad} \rho)$ dann folgt hieraus 5.64:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_c + \operatorname{div} (-\nu \operatorname{grad} \rho) = 0 \quad (5.81)$$

Mit der Differenz von 5.80 und 5.81 ergibt sich

$$\operatorname{div} \vec{j}_D = \operatorname{div} (-\nu \operatorname{grad} \rho) \quad (5.82)$$

Wenn \vec{j}_D wirbelfrei ist, dann folgt hieraus:

$$\vec{j}_D = -\nu \operatorname{grad} \rho \quad (5.83)$$

Dies ist das FICKsche Diffusionsgesetz.

Man führt jetzt eine Gesamtgeschwindigkeit $\vec{v}_{(r,t)}$ ein durch die Festsetzung:

$$\vec{j}_D(\vec{r},t) = \rho_{(r,t)} \vec{v}_{(r,t)} \quad (5.84)$$

und eine Diffusionsgeschwindigkeit („osmotische Geschwindigkeit“) \vec{u} :

$$\vec{j}_D(\vec{r},t) = \rho_{(r,t)} \vec{u}_{(r,t)} \quad (5.85)$$

Mit den Gleichungen 5.77, 5.83 und 5.84 bis 5.85 folgt dann:



Abbildung 5.6: Erklärung der Integration

$$\vec{v} = \vec{v}_d + \vec{u} \quad (5.86)$$

und weiter mit 5.83:

$$\vec{u} = -\nu \operatorname{grad} \ln \rho \quad (5.87)$$

$$= -\frac{\nu}{\rho} \operatorname{grad} \rho \quad (5.88)$$

5.1.4 Die Navier-Stokes-Gleichung

(Wiki: [Navier-Stokes-Gleichungen](#))

Man kann nun als nächstes den Ausdruck $\rho_{(r)}$ an der Stelle \vec{r} und zur Zeit $t + \Delta t$ berechnen. Dieser Ausdruck stellt bis auf den Faktor m_0 den konvektiven Anteil der Impulsstromdichte $m_0 \rho \vec{r}$ dar. Bei Abwesenheit eines äußeren Kraftfeldes $\vec{F}_{(r)}$ kann analog zu $\rho_{(\vec{r}, t + \Delta t)}$ aus $\rho_{(\vec{r}, t)}$ jetzt die Impulsstromdichte $m_0 \vec{j}_{C(\vec{r}, t + \Delta t)}$ aus $m_0 \vec{j}_{C(\vec{r} - \vec{\sigma}, t)}$ bestimmt werden, wobei

$$\vec{j}_{C(\vec{r}, t + \Delta t)} = \rho_{(\vec{r}, t + \Delta t)} \vec{v}_{c(\vec{r}, t + \Delta t)} \quad (5.89)$$

ist. Es gilt hier analog zu dem vorausgegangenem Fall:

$$\rho_{(\vec{r}, t + \Delta t)} v_{ic}(\vec{r}, t + \Delta t) = \int \rho_{(\vec{r} - \vec{\sigma}, t)} v_{ic}(\vec{r} - \vec{\sigma}, t) \rho_{\Delta t(\vec{r} - \vec{\sigma}, \sigma, t)} d^3\sigma \quad (5.90)$$

Man approximiere wie zuvor:

$$\bar{G}_i(\vec{r} - \vec{\sigma}, \vec{\sigma}, t) = \rho_{(\vec{r} - \vec{\sigma}, t)} v_{ic}(\vec{r} - \vec{\sigma}, t) \rho_{\Delta t(\vec{r} - \vec{\sigma}, \sigma, t)} \quad (5.91)$$

bezüglich der $\tilde{\vec{r}} = \vec{r} - \vec{\sigma}$ Ortsabhängigkeit durch ein **Taylor-Polynom** zweiten Grades. Dann ergibt sich aus 5.90 die zu 5.58 analoge Gleichung:

$$\rho_{(\vec{r}, t + \Delta t)} v_{ic}(\vec{r}, t + \Delta t) - \rho_{(\vec{r}, t)} v_{ic}(\vec{r}, t) = -\Delta t \operatorname{div} (\rho v_{ic} \cdot \vec{v}_c) + \Delta t \nu \underline{\Delta} \rho v_{ic} \quad (5.92)$$

3

In dieser Gleichung tritt nun überall ρv_{ic} anstelle von ρ auf. Auf der linken Seite der Gleichung setzt die Änderung der konvektiven Impulsstromdichte an der Stelle \vec{r} welche nach einer Zeit Δt durch die Einwirkung der gesamten Umgebung, aber ohne Einwirkung einer äußeren Kraft dissipiert.

Man kann somit als nächstes die partielle Zeitableitung bilden.

Der entsprechende Grenzübergang $\Delta t \rightarrow 0$ (nach der Division mit Δt) führt zu:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_{ic}) \Big|_{streu} = -\operatorname{div} (\rho v_{ic} \vec{v}_c) + \nu \underline{\Delta} (\rho v_{ic}) \quad (5.93)$$

Bei Anwesenheit eines äußeren Kraftfeldes $\vec{F}_{(r)}$ bleibt dieser Ausdruck der Form nach ungeändert. Auf der rechten Seite sind lediglich für \vec{v}_c und ρv_{ic} die jetzt unter der Wirkung von \vec{F} gültigen Werte einzusetzen. (Bei der Herleitung von 5.92 geht entscheidend nur die Einstein-Beziehung 5.2 ein, deren Form von der Anwesenheit einer äußeren Kraft unabhängig ist, wie aus der entsprechenden Herleitung hervorgeht.) Die äußere Kraft bewirkt aber eine zusätzliche Änderung der konvektiven Impulsstromdichte, sozusagen durch direktes Angreifen an den Teilchen im Volumenelement $d^3 r$ um \vec{r} .

Diese zeitliche Änderung wird wegen ihrer Entstehung durch externe Ursachen mit einem Index *extern* versehen.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_{ic}) \Big|_{extern} \quad (5.94)$$

Weiterhin kann man die Kraftdichte $k_{i(\vec{r}, t)}$ definieren:

$$k_{i(\vec{r}, t)} = \frac{1}{m_0} \rho \vec{F}_{(r)} \quad (5.95)$$

Demnach kann folgende Beziehung für die Kraftdichte (**Volumenkraft**) k_i hergeleitet werden:

³Hinweis: Differenzen sind mit Δ gekennzeichnet; der **Laplace-Operator** mit $\underline{\Delta}$.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_{ic}) \Big|_{extern} = k_{i(\vec{r},t)} \quad (5.96)$$

Die gesamt Änderung der konvektiven Impulsstromdichte pro Zeiteinheit ist durch die Summe von 5.93 und 5.96 gegeben:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_{ic}) = \frac{\partial}{\partial t} [\rho v_{ic}|_{streu} + \rho v_{ic}|_{extern}] \quad (5.97)$$

Demnach folgt mit der Verwendung von 5.93:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_{ic}) = -\operatorname{div} (\rho v_{ic} \vec{v}_c) + \nu \underline{\Delta} (\rho v_{ic}) + k_{i(\vec{r})} \quad (5.98)$$

Man kann die erhaltenen Gleichungen auf eine besser weiterverwendbare Form bringen und benutzt dabei die folgenden Identitäten:

$$\operatorname{grad} (\rho v_{ic}) = v_{ic} \vec{\nabla} \rho + \rho \vec{\nabla} v_{ic} \quad (5.99)$$

$$\operatorname{div} \operatorname{grad} (\rho v_{ic}) = \rho \underline{\Delta} v_{ic} + 2 \vec{\nabla} v_{ic} + v_{ic} \underline{\Delta} \rho \quad (5.100)$$

$$\operatorname{div} (\rho v_{ic} \vec{v}_c) = v_{ic} \operatorname{div} (\rho \vec{v}_c) + \rho \vec{v}_c \underline{\Delta} v_{ic} \quad (5.101)$$

und

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_{ic}) = v_{ic} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial v_{ic}}{\partial t} \quad (5.102)$$

Dies eingesetzt in 5.98 liefert:

$$v_{ic} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \vec{v}_c) - \nu \underline{\Delta} \rho \right) + \rho \left(\frac{\partial v_{ic}}{\partial t} + (\vec{v}_c \cdot \vec{\nabla}) v_{ic} + \nu \underline{\Delta} v_{ic} - \frac{2\nu}{\rho} \vec{\nabla} \rho \vec{\nabla} v_{ic} \right) = k_i \quad (5.103)$$

Die erste Klammer verschwindet wegen der Fokker-Planck-Gleichung 5.64. Aus 5.87 folgt:

$$\vec{u} = -\nu \vec{\nabla} \ln \rho = -\frac{\nu}{\rho} \vec{\nabla} \rho \quad (5.104)$$

mit 5.103 ergibt sich dann:

$$\frac{\partial \vec{v}_c}{\partial t} + [(\vec{v}_c + 2\vec{u}) \cdot \vec{\nabla}] \vec{v}_c - \nu \underline{\Delta} \vec{v}_c = \frac{1}{m_0} \vec{F} \quad (5.105)$$

Dabei wurde benutzt (siehe 5.95):

$$m_0 \vec{k}_{(\vec{r},t)} = \rho_{(\vec{r},t)} \vec{F}_{(\vec{r},t)} \quad (5.106)$$

mit

$\vec{k}_{(\vec{r},t)}$ Kraftdichte
 $\vec{F}_{(\vec{r},t)}$ an der Stelle \vec{r} angreifende Karft

$m_0 \vec{k}$ eigentlich Kraftdichte (vgl. 5.106 ohne m_0).

Man ersetze \vec{v}_c durch \vec{v} und \vec{u} :

To Do 9 (Achtung mit e 3 16 vergleichen.):

$$\vec{v}_c = \vec{v} - \vec{u} \quad (5.107)$$

und erhält:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\vec{v} - \vec{u}) + [(\vec{v} + \vec{u}) \cdot \vec{\nabla}] (\vec{v} - \vec{u}) - \nu \underline{\Delta} (\vec{v} + \vec{u}) = \frac{1}{m_0} \vec{F}_{(r)} \quad (5.108)$$

d.h.

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} + \vec{u}) \cdot \vec{\nabla} \vec{v} - \nu \underline{\Delta} (\vec{v} + \vec{u}) - \left[\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{v} + \vec{u}) \cdot \vec{\nabla} \vec{u} \right] = \frac{1}{m_0} \vec{F} \quad (5.109)$$

Man beachte Gleichung 5.87

$$\vec{u} = \frac{\nu}{\rho} \vec{\nabla} \rho \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = -\nu \vec{\nabla} \left(\frac{\frac{\partial \rho}{\partial t}}{\rho} \right)$$

4

⁴Vertauschbarkeit von Zeit- und Ortdifferentiation.

Zur Umformung des obigen Ausdrucks in die eckigen Klammern beachte man:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} \rho \right) = -\frac{1}{\rho^2} \dot{\rho} \vec{\nabla} \rho + \frac{1}{\rho} \vec{\nabla} \dot{\rho}$$

mit der Abkürzung $\dot{\rho} = \frac{\partial \rho}{\partial t}$.

Nun ist

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \operatorname{div} \rho \vec{v} \quad (\text{Kontinuitätsgleichung}) \quad (5.110)$$

$$= -\rho \operatorname{div} (\vec{v}) - \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \rho \quad (5.111)$$

Also wird:

$$\frac{\frac{\partial \rho}{\partial t}}{\rho} = -\operatorname{div} \vec{v} - \vec{v} \cdot \frac{1}{\rho} \vec{\nabla} \rho$$

mit $\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} \rho = -\frac{1}{\nu} \vec{u}$ und daher:

$$\begin{aligned} -\nu \vec{\nabla} \left(\frac{\frac{\partial \rho}{\partial t}}{\rho} \right) &= \nu \operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{v} - \nu \operatorname{grad} \left(\frac{1}{\nu} \vec{v} \cdot \vec{u} \right) \\ &= \nu \cdot \operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{v} - \operatorname{grad} (\vec{v} \cdot \vec{u}) \\ &= \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} \end{aligned}$$

Man erhält also:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} - \nu \operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{v} + \vec{\nabla} (\vec{v} \cdot \vec{u}) \quad (5.112)$$

Für $|\vec{v}| \gg |\vec{u}|$ gilt näherungsweise:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} - \nu \Delta \vec{v} - \left[\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} \right] = \frac{1}{m_0} \vec{F} \quad (5.113)$$

und

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} - \nu \operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{v} + (\vec{v} \vec{\nabla}) \vec{u} = 0 \quad (5.114)$$

Demnach wird:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \vec{\nabla}) \vec{v} - \nu \operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{v} - \nu \underline{\Delta} \vec{v} = \frac{1}{m_0} \vec{F} \quad (5.115)$$

Dies ist die sog. **Navier-Stokes-Gleichung** der Hydrodynamik für kompressible Medien ohne Volumenviskosität. Ihre hier gegebene Herleitung aus den beiden **Smoluchowski-Gleichungen**

5.44 und **5.90** stimmt im wesentlichen mit [208] überein. Allerdings wird in der zitierten Arbeit bereits in der Gleichung **5.116** \vec{u} gegen \vec{v} vernachlässigt und \vec{v}_c näherungsweise mit \vec{v} ersetzt. Dadurch tritt in der dort erhaltenen **Navier-Stokes-Gleichung** der Term $-\nu \operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{v}$ der obigen Beziehung **5.115** nicht auf. Die zitierte Arbeit gilt demnach nur für inkompressive Medien.

Man beachte:

$$dv_{i(\vec{r},t)} = \frac{\partial v_i}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial v_i}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial v_i}{\partial x_3} dx_3 + \frac{\partial v_i}{\partial t} dt$$

oder

$$\frac{dv_1}{dt} = \frac{\partial v_i}{\partial t} + \sum_{j=1}^3 v_j \frac{\partial v_j}{\partial x_j}$$

mit $\sum_{j=1}^3 v_j \frac{\partial v_j}{\partial x_j} = (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) v_i$ und $\frac{\partial x_1}{\partial t} = v_1, \frac{\partial x_2}{\partial t} = v_2, \frac{\partial x_3}{\partial t} = v_3$,

Also ergibt sich für die *konvektive Beschleunigung*:

$$\frac{dv}{dt} = \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \vec{\nabla}) \vec{v} \quad (5.116)$$

Mit dieser Gleichung lässt sich die Gleichung **5.115** auf die Form bringen:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} - \nu (\operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{v} + \underline{\Delta} \vec{v}) = \frac{1}{m_0} \vec{F} \quad (5.117)$$

Im Grenzfall $\nu \rightarrow 0$ geht diese Gleichung in das **Newtonsche Gesetz** über.

$$m_0 \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F} \quad (5.118)$$

Mit dieser Gleichung und der Gleichung 5.103 folgt dann $\ddot{u} = 0$.

Für spätere Verwendung kann man hier noch die Herleitung eines Ausdrucks für die Dichte der kinetischen Energie anschließen:

Der Teil der äußeren Kraft \vec{F} , der am Teilchen des ν -ten Systems die Beschleunigung $\ddot{\sigma}_\nu$, bewirkt, ist definiert durch

$$\vec{F}_a = m_0 \ddot{\sigma}_\nu \quad (5.119)$$

Die Beschleunigungsarbeit, welche diese Kraft in der Zeitspanne δt leistet, ist per definitionem die Änderung der kinetischen Energie des Teilchens:

$$\begin{aligned} \Delta E_{kin}^{(\nu)} &= \vec{F}_{acc} \cdot \dot{\sigma}_\nu \Delta t \\ &= \Delta t \sum_i \vec{F}_{i,acc} \cdot \dot{\sigma}_{i\nu} \Delta t \end{aligned}$$

Setzt man hierin 5.119 ein, so ergibt sich:

$$\Delta E_{kin}^{(\nu)} = \Delta T m_0 \sum_i \ddot{\sigma}_{i\nu} \cdot \dot{\sigma}_{i\nu}$$

oder wegen

$$\ddot{\sigma}_{i\nu} \cdot \dot{\sigma}_{i\nu} = \frac{1}{2} \frac{\partial \dot{\sigma}_{i\nu}^2}{\partial t}$$

ergibt sich:

$$\Delta E_{kin}^{(\nu)} = \frac{m_0}{2} \Delta T m_0 \frac{\partial}{\partial t} \sum_i \dot{\sigma}_{i\nu}^2 \quad (5.120)$$

Bildet man von dieser Beziehung das Scharmittel gemäß 5.19, so entsteht unter der Summe analog zu 5.44 der Ausdruck

To Do 10: Evt. falscher Verweis ??

$$\dot{\sigma}_{(r,t)}^2 = \dot{\sigma}_i^2 c_{(r,t)} + \dot{\sigma}_i^2 s_{(r,t)}$$

Da der zweite Term konstant ist, liefert er keinen Beitrag zur Beschleunigungsarbeit. Also ergibt sich für das Scharmittel der Beschleunigungsarbeit aus 5.120:

$$\Delta E_{kin}^{(\nu)} = \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{m_0}{2} \sum_i \dot{\sigma}_{ic}^2 \right)$$

oder mit $\vec{v}_c = \dot{\vec{\sigma}}_c^2$:

$$\begin{aligned} \Delta E_{kin}^{(\nu)} &= \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{m_0}{2} v_c^2 \right) \\ &= \Delta \frac{m_0}{2} v_c^2 \end{aligned}$$

Demnach ist:

$$\epsilon_{kin(r,t)} = m_0 \frac{\rho_{(r,t)}}{2} v_c^2$$

5.2 Übergang zur Quantenmechanik — Herleitung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

Bisher wurde angenommen, dass sich das betrachtete Teilchen unter Wirkung von statistischen Kräften gemäß der Langevin-Gleichung 5.22 bewegt. Für Zeitspannen Δt , die groß gegen die Bremszeit τ sind, ergab sich aus dieser Bewegungsgleichung die Einstein-Relation 5.41 und als weitere Konsequenz die Fokker-Planck-Gleichung, das Ficksche Gesetz und die Navier-Stokes-Gleichung. Die Einstein-Relation spielt bei der Herleitung dieser Gleichung eine Schlüsselrolle. Sie lässt sich aber offensichtlich nur unter der Annahme gewinnen, dass die statistische Gesamtkraft, welche auf das Teilchen wirkt, in eine Bremskraft proportional zu $1/\tau$ und in eine statistische Restkraft mit Gauß-Verteilung zerlegt werden kann. Ließe man die Bremskraft gegen Null gehen ($\tau \rightarrow \infty$), so wären keine Aussagen für endliche Zeitspannen Δt mehr möglich, da $\Delta t \gg \tau$ vorausgesetzt werden müsste. Die Behandlung eines quantenmechanischen Teilchens, das sich unter dem Einfluss von statistischen Vakuumkräften bewegt, die im Scharmittel keine Abbremsung bewirken dürfen, ist demnach im Rahmen der bisher entwickelten Theorie nicht einfach durch den Grenzübergang $\tau \rightarrow \infty$ möglich. Dagegen erweist sich ein anderer Lösungsweg als praktikabel, der ebenso naheliegend ist und die Verwendung des bisher entwickelten formalen Apparats erlaubt:

Man unterteile die Gesamtschar des betrachteten Systems in zwei Halbschalen („BROWNSche“ und „Anti-BROWNSche“ Schar)⁵. Diese sind gekennzeichnet durch folgende Langevin-Gleichungen:

$$m_0 \cdot \ddot{\sigma}_{ib} + \frac{m_0}{\tau} \dot{\sigma}_{ib} = F_i(\vec{r}, t) \quad \text{Scharmittel über BROWNSche Halbschale} \quad (5.121)$$

$$m_0 \cdot \ddot{\sigma}_{ia} - \frac{m_0}{\tau} \dot{\sigma}_{ia} = F_i(\vec{r}, t) \quad \text{Scharmittel über Anti-BROWNSche Halbschale} \quad (5.122)$$

Anmerkung 8:

So wie die Newtonsche (oder Einsteinsche) Mechanik streng reversibel ist ($t \rightarrow -t$, $v \rightarrow -v$; bildet Lösungsräume auf Lösungsräume ab), so ist die stochastische Mechanik ($t \rightarrow -t$, $\Psi \rightarrow \Psi^*$; bildet konservative Diffusionen auf konservative Diffusionen ab). Dies gilt grundsätzlich für alle stochastischen Differentialgleichungen, wohl aber für die von Nelson angenommene, die auf einer symmetrischen Definition der stochastischen Beschleunigung beruht und die hier erörtert wird. Man könnte argumentieren, dass die Quantenmechanik auch streng reversibel ist, aber das stimmt nur, wenn man die Quantenmechanik vollständig mit der Schrödinger-Gleichung identifiziert und Messung und Kollaps ignoriert.

Das Scharmittel über diese beiden Gleichungen ist gleich dem arithmetischen Mittel:

⁵Siehe auch: Brownsche Bewegung

$$m_0 \ddot{\sigma}_i = F_{i(\vec{r}, t)} \quad (5.123)$$

mit $\ddot{\sigma}_i = \frac{1}{2} (\ddot{\sigma}_{ia} + \ddot{\sigma}_{ib})$ und $\dot{\sigma}_{ia} = \dot{\sigma}_{ib}$.

Die Bewegungsgleichung des Aufteilchens über die Gesamtschar ist einfach das arithmetische Mittel aus [5.121](#) und [5.122](#).

Fordern man nun für alle \vec{r} und t :

$$\dot{\sigma}_{iB} = \dot{\sigma}_{iA(\vec{r}, t)}$$

d. h.

$$\vec{v}_{B(\vec{r}, t)} = \vec{v}_{A(\vec{r}, t)} \quad (5.124)$$

so ergibt sich im Mittel über die Gesamtschar:

$$m_0 \dot{\vec{v}}_{(\vec{r}, t)} = \vec{F}_{(\vec{r})} \quad (5.125)$$

mit

$$\vec{v} = \vec{v}_A = \vec{v}_B \quad (5.126)$$

wie für die Bewegung eines Teilchens im Vakuum zu fordern ist.

Man denke sich die statistische Kraft $\vec{F}_{s(t)}$ (mit ihrem Brems- bzw. Beschleunigungsangsteil) erst zu einer Zeit t_0 , aktiv. ⁶

Die Einteilung in die beiden Unterscharen A und B spezifiziert man noch durch die zusätzliche Forderung, dass für $t \rightarrow t_0 - 0$ gelten soll:

$$\varrho_{A(\vec{r}, t_0)} = \varrho_{B(\vec{r}, t_0)} = \frac{1}{2} \varrho_{(\vec{r}, t_0)} \quad (5.127)$$

Dabei ist $\varrho_{(\vec{r}, t_0)}$ die Wahrscheinlichkeitsdichte, bezogen auf die Gesamtschar.

Aus den beiden Kontinuitätsgleichungen

⁶In den folgenden Abschnitten wird allerdings stets der Grenzübergang $t_0 \rightarrow -\infty$ angenommen.

$$\frac{\partial \varrho_A}{\partial t} + \operatorname{div} \varrho_A \vec{v}_a = 0 \quad (5.128)$$

$$\frac{\partial \varrho_B}{\partial t} + \operatorname{div} \varrho_B \vec{v}_a = 0 \quad (5.129)$$

folgt dann wegen 5.124 und 5.127 sofort, daß auch die Zeitableitungen von ϱ_A und ϱ_B für alle \vec{r} übereinstimmen müssen. Bildet man von 5.128 und 5.129 die partiellen Zeitableitungen sukzessiv höherer Ordnung, so folgt, dass diese Schlussfolgerung ebenso für alle Zeitableitungen von ϱ_A und ϱ_B gilt. Also ist:

$$\varrho_{A(\vec{r},t)} = \varrho_{B(\vec{r},t)} = \frac{1}{2} \varrho_{(\vec{r},t)} \quad \forall \vec{r}, t \quad (5.130)$$

Will man die Fokker-Planck-Gleichung und die Navier-Stokes-Gleichung für das *Anti-Brownische*-Untersystem analog herleiten wie für das *Brownische*-Untersystem, so ist dies nur möglich, wenn man, umgekehrt wie bisher, den Zustand zur Zeit $t - |\Delta t|$ aus dem Zustand zur Zeit t berechnet, also in allen bisherigen Überlegungen Δt durch $-\Delta t$ ersetzt. Da die Langevin-Gleichungen des *A*-Systems aus dem des *B*-Systems entsteht, indem man τ formal durch $-\tau$ ersetzt, ergibt sich wegen $-\Delta t > O$ und $-\tau > O$ auch für das *A*-System analog zu ein positives mittleres Verschiebungskwadrat:

$$\int \sigma_j^A \sigma_i^A \varrho_{\Delta t(\vec{r}, \dot{\sigma}, t)} d^3\sigma = \delta_{ij} \left(\frac{2k_b T \tau}{m_0} \Delta t + \dot{\sigma}_{ic}^2 \delta t^2 \right) \quad (5.131)$$

Alle weiteren Überlegungen bei der Herleitung der Fokker-Planck-Gleichung bzw. der Navier-Stokes-Gleichung können für das *A*-System in vollständiger Analogie übernommen werden. Kann man aber die Zustandsänderungen im *Anti-Brownischen*-Untersystem stets für das Zeitintervall $(t - |\Delta t|, t]$ berechnen, wenn man die im *Brownischen*-Untersystem für das Zeitintervall $[t, t + |\Delta t|)$ bestimmt. Die im Limes $\delta t \rightarrow 0$ entstehenden partiellen Zeitableitungen beziehen sich dann für beide Systeme auf den Zeitpunkt t . Nimmt man an, dass für jeden gewählten Zeitpunkt immer eine Systemunterteilung möglich ist, daß stets gilt:

$$\vec{v}^A(\vec{r}, t) = \vec{v}^B(\vec{r}, t)$$

Sind z. B. in zwei Teilvolumina ΔV_A bzw. ΔV_B um den Punkt \vec{r} gleich viele *A*- bzw. *B*-Teilchen enthalten, aber \vec{r}_A und \vec{r}_B stimmen nicht überein, so hat man soviele Teilchen mit unterschiedlichem

$\vec{v}_{A\nu}$ bzw. $\vec{v}_{B\nu}$

To Do 11 (Falsche Formel.): Formel überprüfen

zwischen ΔV_A und ΔV_B auszutauschen, bis \vec{r}_a mit \vec{r}_b übereinstimmt.

To Do 12 (Falsche Formel.): Formel überprüfen

Bei diesem Austausch bleiben ϱ_a und ϱ_b unverändert.

Die Gleichung 5.123 gewährleistet die Reversibilität der Streuprozesse im Mittel über die Ge-
samtschar, wie dies für Streuungen im Vakuum zu verlangen ist.

Man berechne jetzt für jede der beiden Halbschalen die ursprünglichen **Navier-Stokes-Gleichungen** in denen \vec{u} nicht gegen \vec{v} vernachlässigbar war. Diese beiden Gleichungen können sich wegen 5.121 und 5.122 nur im Vorzeichen von ν unterscheiden. Dann gilt:

$$\nu_b = \nu = \frac{k_b T \tau}{m_0} = -\nu_a \quad (5.132)$$

Es gilt also für die BROWNsche Halbschar:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\vec{v} - \vec{u}) + [(\vec{v} + \vec{u}) \cdot \vec{\nabla}] (\vec{v} - \vec{u}) - \nu \underline{\Delta} (\vec{v} - \vec{u}) = \frac{1}{m_0} \vec{F} \quad (5.133)$$

und für die Anti-BROWNsche Halbschar:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\vec{v} - \vec{u}) + [(\vec{v} + \vec{u}) \cdot \vec{\nabla}] (\vec{v} - \vec{u}) + \nu \underline{\Delta} (\vec{v} + \vec{u}) = \frac{1}{m_0} \vec{F} \quad (5.134)$$

Dabei wurde beachtet:

$$\vec{u}_a = -\nu \vec{\nabla} \ln \rho = \nu \vec{\nabla} \ln \rho$$

und

$$\vec{u}_b = \vec{u} = -\nu_b \vec{\nabla} \ln \rho = -\nu \vec{\nabla} \rho = -\vec{u}_a$$

Aus den beiden obigen Gleichungen für die beiden Halbschalen ergibt sich als arithmetisches Mittel:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} - (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} + \nu \underline{\Delta} \vec{u} = \frac{1}{m_0} \vec{F}_{(r,t)} \quad (5.135)$$

Wobei nach 5.116 $\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} = \frac{d\vec{v}}{dt}$ ist.

Zu dieser Gleichung 5.112 tritt:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \nu \text{grad div } \vec{v} - \vec{\nabla}(\vec{v} \cdot \vec{u}) \quad (5.136)$$

Anmerkung 9:

Diese Gleichungen beschreiben das Scharverhalten eines Einteilchensystems oder das Verhalten eines materiellen Kontinuumssystems, dessen Bewegung unter Einfluß einer äußeren Kraft $\vec{F}_{(r)}$ und mikroskopischen Prozessen reversibler Streuung abläuft. Blickt man zurück auf Gleichung 5.125, die als Scharmittel über die beiden Langevin-Gleichungen 5.121, 5.122 entstanden ist, so scheint obige Gleichung ?? mit dieser in Widerspruch zu stehen, denn 5.125 und ?? sind offensichtlich nicht identisch. Dieser Widerspruch löst sich auf, wenn man beachtet, dass die beiden Gleichungen Ergebnis verschiedener Grenzübergänge sind:

Die Zeitableitungen in den Langevin-Gleichungen 5.121, 5.122 entstehen im Grenzübergang Limes $\Delta t \rightarrow 0$ bevor das Mittel über die Schar gemäß 5.19 gebildet wird. Die Zeitableitungen in den Fokker-Planck-Gleichungen bzw. in den Navier-Stokes-Gleichungen werden dagegen gebildet, nachdem über jede der Unterscharen gemittelt worden ist. Wie in Abschnitt 5.1.3 ausdrücklich festgestellt wurde, ist der Grenzübergang $\Delta t \rightarrow 0$ in diesem Falle eigentlich unzulässig, da bei der Herleitung $\Delta t \gg \tau$ vorausgesetzt wird. Man hat also in den Navier-Stokes-Gleichungen die partielle Zeitableitung eigentlich als Differenzenquotient zu lesen, so daß die Zeit t in den Funktionen $\rho_{(r,t)}$ und $\vec{v}_{(r,t)}$ mindestens um die Zeitspanne τ unbestimmt ist. Bei der praktischen Anwendung der Navier-Stokes-Gleichung wirkt sich diese Einschränkung im allgemeinen nicht aus.

Man beachte, daß diese Gleichung für die BROWNSche und die Anti-BROWNSche Halbschar die selbe Formel hat ($\vec{u} \rightarrow -\vec{u}; \vec{v} \rightarrow -\vec{v}$), so daß sie sich beim Bilden des **arithmetischen Mittels** nicht ändert.

Nach 5.87 war $\vec{u} = -\nu \vec{\nabla} \ln \rho$ woraus sofort folgt:

$$\text{rot } \vec{u} = 0 \quad (5.137)$$

Andererseits gilt allgemein für zwei Vektorfunktionen \vec{a} und \vec{b} folgender Zusammenhang:

$$(\vec{a} \cdot \vec{\nabla}) \vec{b} = \frac{1}{2} [\text{rot } (\vec{b} \times \vec{a}) + \text{grad } (\vec{a} \cdot \vec{b}) + \vec{a} \text{ div } \vec{b} - \vec{b} \text{ div } \vec{a} - \vec{a} \times \text{rot } \vec{b} - \vec{b} \times \text{rot } \vec{a}]$$

Daraus folgt für $\vec{a} = \vec{u}$ und $\vec{b} = \vec{u}$:

$$(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} = \frac{1}{2} \vec{\nabla} u^2$$

Ferner ist

$$\nu \underline{\Delta} \vec{u} \stackrel{5.87}{=} \nu \underline{\Delta} (-\nu \vec{\nabla} \ln \rho) = -\nu^2 \vec{\nabla} (\underline{\Delta} \ln \rho)$$

Damit lässt sich 5.135 auf die Form bringen:

$$\frac{d\vec{v}_{(r,t)}}{dt} = -\text{grad } \vec{P}_{(r,t)} \quad (5.138)$$

mit

$$\vec{P}_{(r,t)} = \frac{1}{m_0} U_{(r,t)} - \frac{1}{2} u^2 - \nu^2 \underline{\Delta} \ln \rho$$

und

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} U_{(r,t)}$$

Anmerkung 10:

Man kann durchaus annehmen, daß das auf m_0 wirkende Kraftfeld $\vec{F}_{(r,t)}$ stets konservativ ist.

Aus 5.138 folgt in der Hydrodynamik die Wirbelfreiheit von $\vec{v}_{(r,t)}$, d.h.:

$$\text{rot } \vec{v}_{(r,t)} = 0 \quad (5.139)$$

mit Ausnahme von abzählbar, unendlich vielen Wirbellinien (siehe auch [209]).

Man setze im folgenden für ν fest:

$$\nu = \frac{\hbar}{2m_0} \quad (5.140)$$

(ursprünglich war $\nu = \frac{k_b T \tau}{m_0}$)

Dabei ist $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ und \hbar wird als PLANCKSches Wirkungsquantum oder als Plancksche Konstante bezeichnet:

$$\hbar = 6.06 \cdot 10^{-16} \text{ eVs}$$

Die Schreibweise \hbar für $h/2\pi$ wurde von DIRAC eingeführt.

Mit dieser Festsetzung erhält man:

$$\vec{u}_{(\vec{r},t)} = -\frac{\hbar}{2m_0} \vec{\nabla} \ln \rho_{(\vec{r},t)} \quad (5.141)$$

und setzt entsprechend wegen 5.139

$$\vec{v}_{(r,t)} = -\frac{\hbar}{m_0} \vec{\nabla} \varphi_{(r,t)} \quad (5.142)$$

Anmerkung 11:

Wegen rot $\vec{v} = 0$ folgt, dass es muß ein Potential geben muss.

Die Gleichungen 5.135 und 5.136 nehmen mit 5.137, 5.139 und 5.140 die Form an:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} \stackrel{5.112}{=} \frac{\hbar}{2m_0} \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) - \vec{\nabla} (\vec{v} \cdot \vec{u}) \quad (5.143)$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = -\frac{1}{m_0} U - \frac{1}{2} \vec{\nabla} v^2 + \frac{1}{2} \vec{\nabla} u^2 - \frac{\hbar^2}{2m_0} \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \vec{u}) \quad (5.144)$$

Multipliziert man die erste Gleichung mit -1 und die zweite mit i und addiert sie anschließend, so folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t} (-\vec{u} + i\vec{v}) = -\frac{\hbar}{2m_0} \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \vec{v}) + \vec{\nabla} (\vec{v} \cdot \vec{u}) - \frac{i}{m_0} \vec{\nabla} \mathbf{U} - \frac{i}{2} \vec{\nabla} v^2 + \frac{i}{2} \vec{\nabla} u^2 - \frac{i\hbar}{2m_0} \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \vec{u}) \quad (5.145)$$

Dabei hat man beachtet, daß wegen $\text{rot } \vec{u} = 0$ gilt:

$$\underline{\Delta} u = \text{div grad } \vec{u} = \text{grad} (\text{div } \vec{u})$$

Durch Zusammenfassung der Terme erhält man:

$$\frac{\partial}{\partial t} (-\vec{u} + i\vec{v}) = \frac{i}{2} \vec{\nabla} [(-\vec{u} + i\vec{v})^2] + \frac{i\hbar}{2m_0} \vec{\nabla} [\vec{\nabla} (-\vec{u} + i\vec{v})] - \frac{i}{m_0} \vec{\nabla} \mathbf{U} \quad (5.146)$$

Anmerkung 12:

Die Funktion $\rho_{(\vec{r},t)}$ und $\varphi_{(\vec{r},t)}$ können kompakt in einer komplexwertigen Funktion $\psi_{(\vec{r},t)}$ zusammengefaßt werden.

$$\psi_{(\vec{r},t)} = \sqrt{\rho_{(\vec{r},t)}} \cdot e^{i\varphi_{(\vec{r},t)}} \quad (5.147)$$

Damit gilt:

$$\begin{aligned} \ln \psi &= \ln \sqrt{\rho} + i\varphi \\ &= \frac{1}{2} \ln \rho + i\varphi \end{aligned}$$

und weiter:

$$\vec{\nabla} \ln \psi = \frac{1}{2} \vec{\nabla} \ln \rho + i \vec{\nabla} \varphi$$

$$\frac{\hbar}{2m_0} \vec{\nabla} \ln \psi = \frac{\hbar}{2m_0} \cdot \vec{\nabla} \ln \rho + \frac{i\hbar}{m_0} \vec{\nabla} \varphi$$

Nach den Gleichungen 5.141 und 5.142 war:

$$-\vec{u} = \frac{\hbar}{2m_0} \cdot \vec{\nabla} \ln \rho$$

und

$$i\vec{v} = \frac{i\hbar}{m_0} \vec{\nabla} \varphi$$

d.h.

$$-\vec{u} + i\vec{v} = \frac{\hbar}{m_0} \vec{\nabla} \ln \psi \quad (5.148)$$

Aus 5.146 folgt damit:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\hbar}{m_0} \vec{\nabla} \ln \psi \right) = \frac{i}{2} \vec{\nabla} \left(\frac{\hbar}{m_0} \vec{\nabla} \ln \psi \right)^2 + \frac{i\hbar}{2m_0} \vec{\nabla} \left(\vec{\nabla} \cdot \frac{\hbar}{m_0} \nabla \ln \psi \right) - \frac{i}{m_0} \nabla \mathbf{U} \quad (5.149)$$

oder (Orts- und Zeit-Differentiation vertauscht):

$$\vec{\nabla} \left[\frac{\hbar}{m_0} \frac{\partial}{\partial t} \ln \psi \right] = \vec{\nabla} \left[\frac{i\hbar}{2m_0^2} (\vec{\nabla} \ln \psi) + \frac{i\hbar^2}{2m_0^2} \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \ln \psi) - \frac{i}{m_0} \mathbf{U} \right] \quad (5.150)$$

Die eckigen Klammern links und rechts sind damit identisch bis auf eine (x, y, z) -unabhängige Konstante die i.a. zeitabhängig sein wird, und die man mit $\beta_{(t)}$ bezeichnet.

$$\frac{\hbar}{m_0} \frac{\partial}{\partial t} \ln \psi = \frac{i\hbar}{2m_0^2} (\vec{\nabla} \ln \psi) + \frac{i\hbar^2}{2m_0^2} \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \ln \psi) - \frac{i}{m_0} \mathbf{U} + \beta_{(t)} \quad (5.151)$$

Weiterhin gilt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \ln \psi = \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

sowie

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \ln \psi) &= \vec{\nabla} \left(\frac{1}{\psi} \vec{\nabla} \psi \right) \\ &= -\frac{1}{\psi^2} (\vec{\nabla} \psi)^2 + \frac{1}{\psi} \underline{\Delta} \psi \\ &= -(\vec{\nabla} \ln \psi)^2 + \frac{1}{\psi} \underline{\Delta} \psi \end{aligned}$$

Damit ergibt sich:

$$\frac{\hbar}{m_0} \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial t} \psi = \frac{i\hbar^2}{2m_0} \underline{\Delta} \psi - \frac{i}{m_0} \mathbf{U} + \beta_{(t)} \quad (5.152)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m_0} \underline{\Delta} \psi + \mathbf{U} \psi + \gamma_{(t)} \quad (5.153)$$

mit $\gamma_{(t)} = im_0\beta_{(t)}$.

Man kann jetzt ohne Einschränkung die Funktion $\gamma_{(t)}$ identisch Null setzen, da die physikalisch relevanten Größen:

$$\begin{aligned} \rho_{(\vec{r},t)} &= |\psi_{(\vec{r},t)}| \quad \text{Wahrscheinlichkeitsdichte} \\ \vec{j}_{(\vec{r},t)} &\quad \text{Wahrscheinlichkeitsstromdichte} \end{aligned}$$

davon nicht beeinflußt werden.

Damit reduziert sich die obige Gleichung auf

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{(\vec{r},t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \underline{\Delta} \psi_{(\vec{r},t)} + \mathbf{U}_{(\vec{r},t)} \psi_{(\vec{r},t)} \quad (5.154)$$

Aus Gründen, die erst später einsichtig werden, empfiehlt sich die Einführung des sog. *Impulsoperators* $\vec{\mathbb{P}}$ durch die Festsetzung:

$$\vec{\mathbb{P}} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (5.155)$$

Dann wird

$$\vec{\mathbb{P}}^2 = \hbar^2 \underline{\Delta}$$

Führt man also als weiteren Operator noch den sog. HAMILTON-Operator \mathbb{H} ein durch die Festsetzung:

$$\mathbb{H}_{(\vec{r},t)} = \frac{\vec{\mathbb{P}}^2}{2m_0} + \mathbf{U}_{(\vec{r},t)} \quad (5.156)$$

d.h.

$$\mathbb{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \underline{\Delta} + \mathbf{U}_{(\vec{r},t)} \quad (5.157)$$

dann lässt sich die obige Differentialgleichung für $\psi_{(\vec{r},t)}$ in der Form schreiben:

$$\mathbb{H}\psi_{(\vec{r},t)} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{(\vec{r},t)} \quad (5.158)$$

Dies ist die sog. *zeitabhängige SCHROEDINGER-Gleichung*.

5.2.1 Die Ehrenfestschen Sätze

Die Ehrenfestschen Theoreme werden verwendet, um eine Beziehung zwischen Quantenmechanik und klassischer Mechanik herzustellen. Kurz gesagt bedeuten diese beiden Gleichungen nichts anderes, als dass sich die Mittelwerte (bzw. Erwartungswerte) von Ort und Impuls entsprechend der klassischen, Newtonschen Bewegungsgleichung verhalten.

An dieser Stelle wollen wir kurz darauf eingehen, dass das erste Ehrenfestsche Theorem bereits für jedes System der klassischen stochastischen Mechanik gilt (wobei der Mittelwert wieder als Scharmittel zu verstehen ist).

Im folgenden wird gezeigt, daß für die quantenmechanischen Erwartungswerte von Impuls, Kraft und Ort die Gleichungen der klassischen Mechanik gelten: ⁷

- $m_0 \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{p}$
- $\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}$

Zunächst einige Vorbemerkungen, Definitionen und Hilfssätze:

- Der *Kommutator* zweier Operatoren \mathbb{A} , \mathbb{B} ist: $[\mathbb{A}, \mathbb{B}] = \mathbb{A}\mathbb{B} - \mathbb{B}\mathbb{A}$

⁷ siehe: Ehrenfest-Theorem , vgl. P. Ehrenfest; Zschr. für Physik; Bd. 45 (1927) S. 435

- Weil die Komponenten-Operatoren \mathbb{X}_k ($k = 1, 2, 3$) des Ortsoperators $\vec{\mathbb{X}}$ (auch mit \vec{r} bezeichnet) durch einfache Multiplikation definiert sind:

$$\mathbb{X}_k \cdot f_{(x_1, x_2, x_3, t)} = x_k \cdot f_{(x_1, x_2, x_3, t)}$$

kann man schreiben $\mathbb{X}_k = x_k \cdot \mathbb{1}$ mit $\mathbb{1} = Eins$ -Operator

oder abgekürzt: x_k statt \mathbb{X}_k und entsprechend \vec{r} statt $\vec{\mathbb{X}}$

- Für den HAMILTON-Operator

$$\mathbb{H} = \frac{1}{2m_0} \sum_{l=1}^3 \mathbb{P}_l^2 + \mathbf{U}_{(\vec{r}, t)}$$

gilt:

$$[\vec{r}, \mathbb{H}] \psi_{(\vec{r}, t)} = \frac{i\hbar}{m_0} \mathbb{P} \psi_{(\vec{r}, t)} \quad (5.159)$$

Beweis 1:

5.159 lautet als Operatorgleichung in Komponenten geschrieben:

$$[\vec{r}, \mathbb{H}] = \frac{i\hbar}{m_0} \mathbb{P} \quad (k = 1, 2, 3)$$

Man verwende nun folgende Formeln:

$$[x_k, \mathbb{H}] = \left[x_k, \frac{1}{2m_0} \sum_{l=1}^3 \mathbb{P}_l^2 + \mathbf{U}_{(\vec{r}, t)} \right]$$

und wegen

$$= \frac{1}{2m_0} \sum_{l=1}^3 [x_k, \mathbb{P}_l^2] + [x_k, \mathbf{U}_{(\vec{r}, t)}]$$

Wegen $[x_k, x_l] = 0$ (Nullopator) ist nun $[x_k, \mathbf{U}_{(\vec{r}, t)}] = 0$. Und wegen $[x_k, \mathbb{P}_l] = i\hbar \delta_{kl} \cdot \mathbb{1}$ („Eins“-Operator) (siehe Ü.7ba]) ist $[x_k, \mathbb{P}_l] = 0$ für alle $l \neq k$ und $[x_k, \mathbb{P}_l^2] = 0$ für alle $l \neq k$.

Deshalb ist:

$$\sum_{l=1}^3 [x_k, \mathbb{P}_l^2] = [x_k, \mathbb{P}_k^2] =$$

und mit $[x_k, \mathbb{P}_k^n] = i\hbar n \mathbb{P}_k^{n-1}$ (siehe [Ü.7.be]) ist speziell für $n = 2$:

$$[x_n, \mathbb{P}_n^2] = 2i\hbar \mathbb{P}_n \quad (5.160)$$

Damit wird

$$[x_k, \mathbb{H}] = \frac{i\hbar}{m_0} \mathbb{P}$$

q.e.d.

- Seien $f_{(\vec{r}, t)}$ und $g_{(\vec{r}, t)}$ Funktionen mit stetigen 2. Ableitungen, ansonsten beliebig. Dann gilt:

$$\int_V (f \Delta g - g \Delta f) d^3r = \oint (\vec{f} \vec{\nabla} g - g \vec{\nabla} f) \cdot \hat{e}_n dF$$

(GREENsche-Formel)

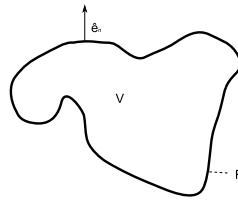


Abbildung 5.7: Abbildung zur Greenschen Formel

Die **Greensche Formel** folgt aus dem **Gaußscher Integralsatz**

$$\int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{A} d^3r = \oint_F \vec{A} \hat{e}_n dF$$

Wenn man $\vec{A}' = f \cdot \vec{\nabla} g$ bzw. $\vec{A}'' = g \cdot \vec{\nabla} f$ wählt und die beiden Gleichungen voneinander subtrahiert ergibt sich die **GREENSche Formel**.

- Der HAMILTON-Operator ist ein **Hermitescher Operator**, d. h. es gilt:

$$\int f_{1(\vec{r},t)}^* \mathbb{H} f_{2(\vec{r},t)} d^3r = \int (\mathbb{H} f_{1(\vec{r},t)})^* f_{2(\vec{r},t)} d^3r \quad (5.161)$$

Dabei sollen $f_{1(\vec{r},t)}$ und $f_{2(\vec{r},t)}$ Funktionen mit stetigen 2. Ableitungen sein, die entweder für $|\vec{r}| \rightarrow \infty$ genügend schnell gegen Null streben (dann sind die obigen Integrale über den gesamten \mathbb{R}^3 zu erstrecken) oder die „periodischen Randbedingungen“ genügen. Dann sind die obigen Funktionen über einen „Normierungsquader“ zu erstrecken.

Beweis 2 (Beweis der Hermitetiziät von \mathbb{H}):

$$\begin{aligned}\int f_1^* \mathbb{H} f_2 d\vec{r}^3 &= \int f_1^* \left(-\frac{\hbar}{2m_0} \underline{\Delta} + \mathbf{U} \right) f_2 d\vec{r}^3 \\ &= -\frac{\hbar}{2m_0} \int f_1^* \underline{\Delta} f_2 d\vec{r}^3 + \int f_1^* \mathbf{U} f_2 d\vec{r}^3\end{aligned}$$

Nun liefert die **Grezsche Formel** mit $f = f_1^*$ und $g = f_2$:

$$\int_V f_1^* \underline{\Delta} f_2 d\vec{r}^3 = \int_V (\underline{\Delta} f_1^*) f_2 d\vec{r}^3 + \oint_F (f_1^* \vec{\nabla} f_2 - f_2 \vec{\nabla} f_1^*) \cdot \hat{e}_n dF$$

Streben f_1, f_2 für $|\vec{r}| \rightarrow \infty$ genügen schnell gegen Null, dann wählt man als V ein Kugelvolumen mit dem Radius R , dann ist \oint_F über die Kugeloberfläche mit dem Radius R zu erstrecken und im $\lim_{R \rightarrow \infty}$ wird $\oint_F (\cdots) \hat{e}_n dF = 0$ Oder (falls f_1, f_2 periodische Randbedingungen) wählt man als V einen „Normierungs-Quader“ und dann wird $\oint_F (\cdots) \hat{e}_n dF = 0$ wegen der Randbedingung für f_1, f_2 .

Damit gilt

$$\int f_1^* \underline{\Delta} f_2 d\vec{r}^3 = \int (\underline{\Delta} f_1^*) f_2 d\vec{r}^3$$

und mit

$$\int f_{1(\vec{r},t)}^* \mathbf{U}_{(\vec{r},t)} f_{2(\vec{r},t)} d\vec{r}^3 = \int \mathbf{U}_{(\vec{r},t)} f_{1(\vec{r},t)}^* f_{2(\vec{r},t)} d\vec{r}^3$$

und weil $\underline{\Delta}$ und \mathbf{U} reell sind, ergibt sich:

$$\int f_1^* \left(-\frac{\hbar}{2m_0} \underline{\Delta} + \mathbf{U} \right) f_2 d\vec{r}^3 = \int \left(\left(-\frac{\hbar}{2m_0} \underline{\Delta} + \mathbf{U} \right)^* f_1 \right)^* f_2 d\vec{r}^3$$

oder

$$\int f_1^* \mathbb{H} f_2 d\vec{r}^3 = \int (\mathbb{H} f_1)^* f_2 d\vec{r}^3$$

q.e.d.

Anmerkung 13:

Hermitesche Operatoren werden auch als selbstadjungierte Operatoren bezeichnet.

Nun kann man den ersten Ehrenfestschen Satz beweisen:

$$m_0 \frac{d}{dt} \langle \vec{r} \rangle = \langle \vec{P} \rangle \quad (5.162)$$

Es ist : $\langle P_k \rangle = \int \psi_{(r,t)}^* \mathbb{P}_k \psi_{(r,t)} d^3 r$, ($k = 1, 2, 3$) und mit 5.159 aus Punkt 5.2.1 ergibt sich dann:

$$\begin{aligned} \langle P_k \rangle &= \frac{m_0}{i\hbar} \int \psi^* (x_k \mathbb{H} - \mathbb{H} x_k) \psi d^3 r \\ &= \frac{m_0}{i\hbar} \int \psi^* x_k \mathbb{H} \psi d^3 r - \frac{m_0}{i\hbar} \int \psi^* \mathbb{H} x_k \psi d^3 r \end{aligned}$$

Ferner ist wegen der HERMITETITÄT von \mathbb{H} (hier $f_1^* = \psi^*$, $f_2 = x_k \psi$):

$$\int \psi^* \mathbb{H} x_k \psi d^3 r = \int (\mathbb{H} \psi)^* x_k \psi d^3 r$$

Nun gilt für $\psi_{(r,t)}$ die zeitabhängige SCHRÖDINGERgleichung:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathbb{H} \psi$$

und damit für ψ^* :

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = (\mathbb{H} \psi)^*$$

So ergibt sich:

$$\langle P_k \rangle = \frac{m_0}{i\hbar} \int \psi^* x_k \frac{\partial \psi}{\partial t} d^3 r + \frac{m_0}{i\hbar} \cdot i\hbar \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} x_k \psi d^3 r$$

$$\langle P_k \rangle = m_0 \frac{d}{dt} \int \psi^* x_k \psi d^3 r$$

$$\langle P_k \rangle = m_0 \frac{d}{dt} \langle x_k \rangle \quad (k = 1, 2, 3)$$

also vektoriell geschrieben:

$$\langle \vec{P} \rangle = m_0 \frac{d}{dt} \langle \vec{r} \rangle \quad (5.163)$$

Analog lässt sich der zweite Ehrenfestsche Satz beweisen.

Mit

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}U$$

ist

$$\langle \vec{F} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \vec{P} \rangle \quad (5.164)$$

Zur Beachtung: Das zweite Ehrenfestsche Theorem, welches besagt, dass die (mittlere) Impulsänderung gleich der äußeren Kraft ist (siehe Gl.) gilt tatsächlich nur im quantenmechanischen (das heißt reibungsfreien) Fall und nicht für ein Teilchen in einem Wärmebad. Auch wenn die äußere Kraft gleich Null ist, wird das Teilchen im Wärmebad der mittleren Energie des umgebenden Mediums angepasst, das heißt abgebremst bzw. beschleunigt. Aus $\vec{F} = 0$ (äußere Kraft) folgt also in die- sem Fall nicht $p = const.$

6 Systematischer Aufbau der Quantenmechanik

6.1 Postulate der Quantenmechanik

6.1.1 Korpuskularstatistische Deutung

- Im Felde vorgegebener äußerer Kräfte bewegt sich ein quantenmechanisches Teilchen unter Wirkung zusätzlicher stochastischer Kräfte des Vakuums stets so, daß seine Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $\rho_{(r,t)}$ und das Scharmittel $v_{(r,t)}$ seiner Geschwindigkeit zu jeder Zeit als stetige und differentierbare Funktionen existieren.
- Durch Wirkung der stochastischen Kräfte (**Vakuumkräfte**) überlagert sich der klassischen Bewegung des Teilchens eine diffusive Bewegung mit der Diffusionskonstanten (kinematische Viskosität) $\nu = \frac{\hbar}{2m_0}$ mit m_0 = Ruhemasse des Teilchens, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ mit h = PLANCKSches Wirkungsquantum.
- Die diffusive Zusatzbewegung besteht aus Prozessen reversibler Streuung, d.h. die Vakuumkräfte übertragen im Mittel über hinreichend viele Einzelprozesse keinen Impuls auf das Teilchen.
- Die durch die Vakuumkräfte bewirkte *unregelmäßige* Bewegung des Teilchens hat keine Ausstrahlung elektromagnetischer Strahlung zur Folge¹.
Emission bzw. Absorption elektromagnetischer Strahlung kann nur durch eine zeitliche Änderung der Wahrscheinlichkeits-Verteilung, d. h. durch $\rho_{(r,t)}$ bzw. $v_{(r,t)}$ bewirkt werden.
Die Emission bzw. Absorption ist dann wie in der klassischen Elektrodynamik zu berechnen, wobei $\rho_{(r,t)}$ wie eine kontinuirliche Ladungsverteilung bzw. $\vec{v}_{(r,t)}$ wie ein Strömungsfeld zu behandeln ist.

¹(Vorsicht !!!)

To Do 13 (Abbildung einfügen):

Abbildung 6.1: Stetigkeit

Man kann $\hat{\psi}_{(x)}$ an der Stelle x_l in einer TAYLOR-Reihe entwickeln:

$$\hat{\psi}_{(x)} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} \frac{d^\nu}{dx^\nu} \hat{\psi}_{(x)} \Big|_{x_l} (x - x_l)^\nu \quad (6.1)$$

Schließt man diese Entwicklung stetig und differentierbar an $\hat{\psi}_{(x)}$ für $x \leq x_l$ an, so sind in der TAYLOR-Entwicklung $\hat{\psi}_{(x_l)}$ und $\hat{\psi}'_{(x_l)}$ gegeben. Da $\hat{\psi}_{(x)}$ aber im Intervall (x_l, x_r) die Schrödinger-Gleichung erfüllt, liegt mit $\hat{\psi}_{(x_l)}$ auch $\hat{\psi}''_{(x_l)}$ fest. Differenziert man ??, so wird:

$$\frac{d^3}{dx^3} \hat{\psi}_{(x)} \Big|_{x_l} = -\frac{2m_0}{\hbar^2} \left[(\mathbf{E} - \mathbf{U}_{(x_l)}) \frac{d\hat{\psi}}{dx} \Big|_{x_l} - \hat{\psi}_{(x_l)} \frac{d\mathbf{U}}{dx} \Big|_{x_l} \right] \quad (6.2)$$

Die dritte Ableitung lässt sich also auf die nullte und die erste zurückführen. Entsprechende Beziehungen lassen sich für alle höheren Ableitungen herleiten, d. h.

Anmerkung 14:

Sind $\hat{\psi}_{(x_l)}$ und $\hat{\psi}'_{(x_l)}$ festgelegt, dann sind sämtliche Ableitungen in der TAYLOR-Entwicklung bestimmt. Für beliebige Werte von \mathbf{E} sind aber (vgl. 6.1) an der Stelle $x = x_r$ nicht die Eigenschaften, in die für $x \geq x_r$ monoton abnehmende Funktion glatt überzugehen.

Anmerkung 15 (Nebenbetrachtung):

Nach Postulat ?? muss $\rho_{(x)} = |\hat{\psi}_{(x)}|^2$ überall stetig und differentierbar sein. Dies bedeutet, dass $\hat{\psi}_{(x)}$ überall stetig sein muss.

Ausnahme:

Im allgemeinen folgt dann auch die Differentierbarkeit von $\rho_{(x)}$, dass auch $\hat{\psi}_{(x)}$ überall differenzierbar sein muss.

Wenn x_0 nicht 0 ist, bleibt bei $\rho_{(x)}$ immer ein Knick. Ausnahme: $\hat{\psi}_{(x_0)}$ ist Null.

Stromdichte: $j_d = \frac{\hbar}{2m_0} \rho \vec{\nabla} \rho = \rho \vec{u}$.

Verlangt man, daß [6.1](#) an der Stelle $x = x_0$ differntierbar in die für $x > x_r$ monoton abfallende Funktion übergeht, dann ist dies nur für eine bestimmte Wahl von \mathbf{E} zu erreichen. Insgesamt ergibt sich für alle Zustände, deren Energie zu Paaren (x_l, x_r) von Umkehrpunkten führt, im allgemeinen daß man mehrere solche Energien findet. Zustände, d.h. Lösungsfunktionen der Schrödinger-Gleichung, die zu solchen Energien gehören, heißen „Eigenzustände“, speziell „gebundene Eigenzustände“, weil sie außerhalb eines bestimmten Intervalls (in drei Dimensionen außerhalb einer bestimmten geschlossenen Fläche) monoton abnehmen.

Solche „Eigenschaften“ der [Schrödinger-Gleichung](#) (oder auch „Eigenzustände“) können experimentell (d.h. in der Wirklichkeit) nicht realisiert werden mit Ausnahme des Zustandes mit niedrigster Energie, der als *Grundzustand* bezeichnet wird.

Anmerkung 16 (Begründung):

Jeder Anregungsvorgang findet experimentell in einer endlichen Zeit statt. Ein stationärer braucht aber seiner Natur gemäß eine unendlich lange Präparationszeit. (Dies gilt auch für klassische Systeme ohne Dämpfung).

In der Wirklichkeit werden immer nur **Linearkombinationen** von Zuständen realisiert:

$$\psi_{n(\vec{r},t)} = \hat{\psi}_{n(\vec{r})} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{E}_n t}$$

$$\psi_{(\vec{r},t)} = \sum_n c_n \hat{\psi}_{n(\vec{r})} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{E}_n t}$$

Denn offenbar gilt:

$$\mathbf{H}\psi_{(\vec{r},t)} = \sum_n c_n \mathbf{E}_n \hat{\psi}_{n(\vec{r})} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{E}_n t}$$

Andererseits ist:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{(\vec{r},t)} = \sum_n c_n \mathbf{E}_n \hat{\psi}_{n(\vec{r})} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{E}_n t} = \mathbb{H}\psi_{(\vec{r},t)}$$

D. h.: $\psi_{(\vec{r},t)}$ erfüllt demnach die zeitabhängige SCHRÖDINGERgleichung und nur diese Eigenschaft ist i.a. von $\psi_{(\vec{r},t)}$ zu verlangen. Eine weitere physikalische Konsequenz der obigen Zustandsmischung ist das Zeitverhalten der zugehörigen Ladungsdichte:

$$\begin{aligned} \rho_l(\vec{r},t) &= e \cdot \psi_{(\vec{r},t)}^* \cdot \psi_{(\vec{r},t)} \\ &= e \cdot \sum_n c_{n'}^* \cdot c_n \hat{\psi}_{n'(\vec{r})}^* \hat{\psi}_{n(\vec{r})} e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{E}_{n'} - \mathbf{E}_n) \cdot t} \end{aligned}$$

oder

$$\rho_l(\vec{r},t) = 2e \sum_{n'>n} |c_{n'}^* c_n \hat{\psi}_{n'(\vec{r})}^* \hat{\psi}_{n(\vec{r})}| \cos \left[\frac{1}{\hbar} (\mathbf{E}_{n'} - \mathbf{E}_n) t + \varphi_{nn'(\vec{r})} \right] + \bar{\rho}_l(\vec{r}) \quad (6.3)$$

mit

$$\frac{1}{\hbar} (\mathbf{E}_{n'} - \mathbf{E}_n) = w_{nn'}$$

und

$$\bar{\rho}_{l(\vec{r})} = \sum_n |c_n|^2 \cdot |\hat{\psi}_{n(\vec{r})}|^2$$

Dabei ist $\psi_{nn'(\vec{r})}$ definiert durch:

$$c_{n'}^* c_n \hat{\psi}_{n'(\vec{r})}^* \hat{\psi}_{n(\vec{r})} = \left| c_{n'}^* c_n \hat{\psi}_{n'(\vec{r})}^* \hat{\psi}_{n(\vec{r})} \right| e^{i\varphi_{n'n(\vec{r})}}$$

Nach Postulat ?? strahlt ein geladenes Teilchen in einem solchen Zustand in dem $\rho_{l(\vec{r},t)}$ zeitabhängig ist, elektromagnetische Energie ab. In einem späteren Abschnitt wird gezeigt werden, daß die $\hat{\psi}_{n(\vec{r})}$ zueinander orthogonal sind:

$$\int \hat{\psi}_{n'(\vec{r})}^* \hat{\psi}_{n(\vec{r})} d^3r = \delta_{n'n}$$

Damit ergibt sich für den Erwartungswert der Energie des Teilchens in der betrachteten Zustandsmischung:

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \int \psi_{(\vec{r},t)}^* \mathbb{H} \psi_{(\vec{r},t)} d^3r \\ &= \sum_{n',n} c_{n'}^* c_n \mathbf{E}_n \left[\int \hat{\psi}_{n'(\vec{r})}^* \hat{\psi}_{n(\vec{r})} d^3r \right] \cdot e \frac{i}{\hbar} (\mathbf{E}_{n'} - \mathbf{E}_n) t \end{aligned}$$

Also

$$\mathbf{E} = \sum_n |c_n|^2 \mathbf{E}_n$$

Wenn \mathbf{E} aufgrund der Abstrahlung elektromagnetischer Energie abnimmt, dann müssen jene Koeffizienten c_n dem Betrage nach zunehmen, die zu niedrigeren Energiewerten \mathbf{E}_n gehören. Der Prozeß ist beendet, wenn $c_n = \delta_{n0}$ ist, sofern $\mathbf{E}_0 < \mathbf{E}_1 < \mathbf{E}_2 < \dots$.

Anmerkung 17 (Beachte):

$$\int |\psi_{(\vec{r},t)}|^2 d^3r = 1 = \sum_n |c_n|^2$$

To Do 14 (Abbildung einfügen): Abbildung: 21.11.95

Abbildung 6.2: Abbildungen zur Gleichung

To Do 15 (Abbildung einfügen):

Abbildung 6.3: Abbildung zur Präparationszeit

wegen

$$\sum_{n',n} c_{n'}^* c_n \int \hat{\psi}_{n'(\vec{r})}^* \hat{\psi}_{n(\vec{r})} d^3 r = \sum_{n',n} c_{n'}^* c_n \cdot \delta_{n',n}$$

Umgekehrt verbleibt ein Teilchen in einer Zustandsmischung besonders lange dann, wenn es einem gelingt einen *Quasi-Eigenzustand* zu realisieren, d. h.

$$c_n \approx \begin{cases} 1 & \text{für } n = n_0 \\ 0 & \text{für } n \neq n_0 \end{cases}$$

$\Delta E \Delta t \approx \hbar$ Präparationszeit für den Anregungszustand $E \approx E_n 0$.

6.2 Das Prinzip extremaler Gesamtenergie und die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

Man betrachte den Erwartungswert der Gesamtenergie für ein abgeschlossenes konservatives Einteilchensystem:

$$E = \langle H \rangle = \int |c_{(\vec{k})}|^2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} d^3 k + \int |\hat{\psi}_{(r)}|^2 \mathbf{U}_{(\vec{k})} d^3 r \quad (6.4)$$

$$= \int \hat{\psi}_{(r)}^* \left[\frac{\mathbb{P}^2}{2m_0} + \mathbf{U}_{(r)} \right] \hat{\psi}_{(r)} d^3 r \quad (6.5)$$

$c_{(\vec{k})}$ ist die **Fourier-Transformierte** der Wellenfunktion im **Ortsraum**.

Welcher Bedingung muß $\hat{\psi}_{(r)}$ genügen, damit \mathbb{H} ein Extremum annimmt? Sei $\hat{\psi}_{0(\vec{k})}$ die Funktion, für welche $\langle \mathbb{H} \rangle$ ein Extremum einnimmt. Man bilde jetzt eine Hilfsfunktion:

$$\hat{\psi}_{(r)} = \hat{\psi}_{0(\vec{r})} + \epsilon \tilde{\psi}_{(r)} \quad \text{wobei } \epsilon \in \mathbb{R} \quad (6.6)$$

wobei $\hat{\psi}_{(r)}$ irgendeine stetige und zweifach differentierbare Funktion sei, mit der Eigenschaft, daß neben der Bedingung

$$\int |\hat{\psi}_{0(\vec{r})}|^2 d^3\vec{r} = 1 \quad (6.7)$$

auch gilt:

$$\int |\hat{\psi}_{(r)}|^2 d^3\vec{r} = 1 \quad (6.8)$$

$$|\hat{\psi}_{(r)}|^2 = |\hat{\psi}_{0(\vec{r})}|^2 + \epsilon (\hat{\psi}_{0(\vec{r})}^* \tilde{\psi}_{(r)} + \text{C.C.}) + \epsilon^2 |\tilde{\psi}_{(r)}|^2 \quad (6.9)$$

mit der Bezeichnung „C.C.” für *conjugiert complex*. Deshalb ist $\tilde{\psi} \neq 0$. Also muß gelten:

$$\epsilon \int |\tilde{\psi}_{(r)}|^2 d^3r \int [\hat{\psi}_{0(\vec{r})}^* \tilde{\psi}_{(r)} + \text{C.C.}] d^3r = 0 \quad (6.10)$$

Wenn $\langle \mathbb{H} \rangle$ für $\hat{\psi}_{(r)} \rightarrow \hat{\psi}_{0(\vec{r})}$ ein Extremum annimmt, dann heißt dies:

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon} \langle \mathbb{H}_{(\epsilon)} \rangle \Big|_{\epsilon=0} = 0 \quad (6.11)$$

Wobei die Nebenbedingung 6.8 eingehalten werden muß. Man schwäche diese Nebenbedingung an in der Form:

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon} N_{(\epsilon)} \Big|_{\epsilon=0} = 0 \quad (6.12)$$

mit der Definition:

$$N_{(\epsilon)} = \int \hat{\psi}_{(r)}^* \hat{\psi}_{(r)} d^3r$$

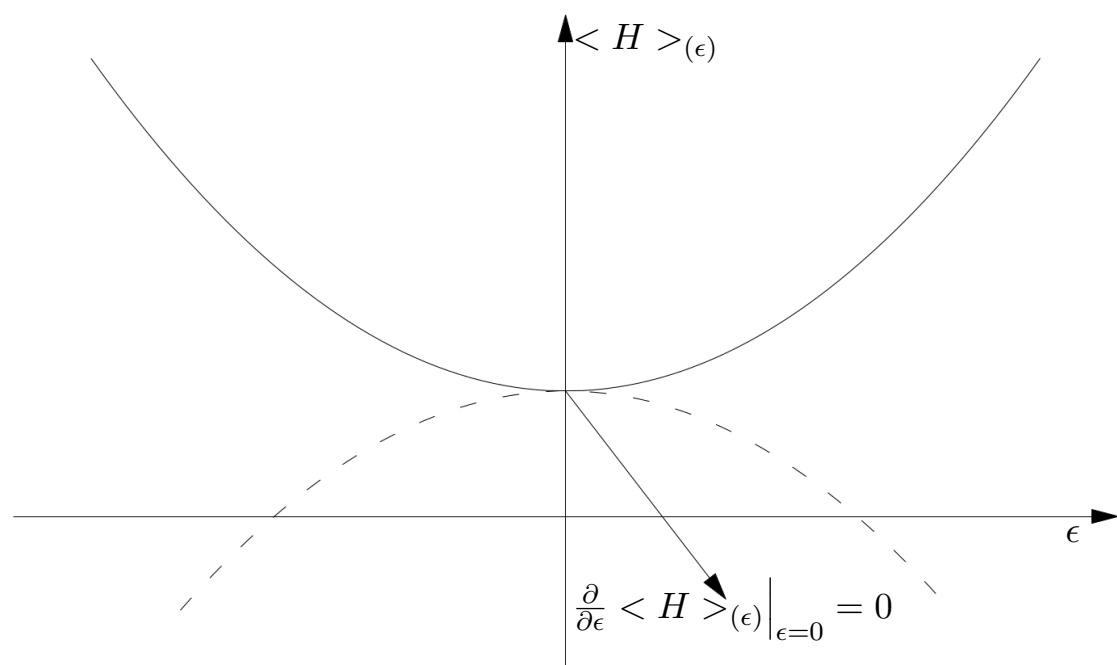


Abbildung 6.4: Extremum, diese beiden Möglichkeiten können nur sein.

Setzt man 6.12 in den Ansatz 6.6 ein, so folgt:

$$\int \left(\underbrace{\tilde{\psi}_{(\vec{r})}^* \hat{\psi}_0(\vec{r})}_{= I_1} + \underbrace{\tilde{\psi}_{(\vec{r})} \hat{\psi}_0^*(\vec{r})}_{= I_2} = I_1 + I_2 \right) d^3 r = 0 \quad (6.13)$$

Man setzte $I_1 = a + ib$ und $I_2 = a - ib$ mit $a, b \in \mathbb{R}$

$$I_1 + I_2 = 2a \xrightarrow{6.13} a = 0$$

Würde man zulassen, daß I_1 und I_2 einzeln endlich sind (von Null verschieden) und nach 6.13 $I_1 + I_2$ verschwindet, dann müßten I_1 und I_2 stets rein imaginär sein. Man kann aber $\tilde{\psi}_{(\vec{r})}$ willkürlich vorgeben, so daß 6.13 im allgemeinen nur erfüllt wird, wenn I_1 und I_2 einzeln verschwinden:

$$\int \tilde{\psi}_{(\vec{r})}^* \hat{\psi}_0(\vec{r}) d^3 \vec{r} = 0 \quad (6.14)$$

Setzt man den Ansatz 6.6 in 6.4 ein und bildet

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon} \Big|_{\epsilon=0} = 0$$

so folgt aufgrund völlig analoger Argumente, daß

$$\int \tilde{\psi}_{(\vec{r})}^* \mathbb{H} \hat{\psi}_0(\vec{r}) d^3 \vec{r} = 0 \quad (6.15)$$

Die Gleichungen 6.14, 6.15 sind bei beliebig vergebbarer Funktion $\tilde{\psi}_{(\vec{r})}^*$ nur dann miteinander verträglich, wenn

$$\mathbb{H} \hat{\psi}_0(\vec{r}) = \lambda \hat{\psi}_0(\vec{r}) \quad \text{mit } \lambda \in \mathbb{C} \quad (6.16)$$

Bildet man

$$\begin{aligned} \int \hat{\psi}_0^*(\vec{r}) \lambda \hat{\psi}_0(\vec{r}) d^3 r &= \int \hat{\psi}_{(\vec{r})}^* \mathbb{H} \hat{\psi}_0(\vec{r}) d^3 \vec{r} = 0 \\ &= \lambda \cdot \int \tilde{\psi}_{(\vec{r})}^* \hat{\psi}_0(\vec{r}) d^3 \vec{r} = 0 \\ &= \langle \mathbb{H} \rangle = \mathbf{E} = \text{reell} \end{aligned}$$

Hieraus folgt:

$$\lambda = \langle \hat{\psi}_0 | \mathbb{H} | \hat{\psi}_{(0)} \rangle = \text{reell}$$

d.h. λ stellt den Extremalwert des Erwartungswertes von \mathbb{H} dar.

Man kommt also zu dem Schluß, daß die $\langle \mathbb{H} \rangle$ extremierende Funktion $\hat{\psi}_{0(\vec{r})}$ die Gleichung

$$\mathbb{H}\hat{\psi}_{0(\vec{r})} = \mathbf{E}\hat{\psi}_{0(\vec{r})}$$

erfüllen muß, und dies ist die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung. Die SCHRÖDINGER-Gleichung stellt also die EULERSche Differentialgleichung für das Extremalproblem

$$\langle \mathbb{H} \rangle = \text{Extremum}$$

dar.

6.3 Die Impulsdarstellung der Schrödinger-Gleichung

Wesentlicher Punkt der obigen Herleitung, der sogenannten Ortsdarstellung der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung war die Anwendung der Identität:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\mathbb{P}^2}{2m_0} \right\rangle &= \int_{\hat{(\vec{k})}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} d^3k \\ &= \int c_{(\vec{k})}^* \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} c_{(\vec{k})} d^3k \\ &= \int \hat{\psi}_{(\vec{k})}^* \frac{(-i\hbar \vec{\nabla})^2}{2m_0} \hat{\psi}_{(\vec{k})} d^3k \end{aligned}$$

Dieses Vorgehen ist nicht zwingend. Man könnte ebenso $\langle \mathbf{U} \rangle$ in Form eines Erwartungswertes über den \vec{k} -Raum ausdrücken und die Extremalwertaufgabe für $\langle \mathbb{H} \rangle$ auf eine Differentialgleichung für $c_{(\vec{k})}$ zurückführen. Man betrachte hierzu als Beispiel den dreidimensionalen harmonischen Oszillator:

Ein Teilchen der Masse m_0 bewege sich im Potential

$$\mathbf{U}_{(r)} = \frac{1}{2} m_0 \omega_0^2 |\vec{r}|^2$$

(Kraftzentrum im Ursprung, d.h. in $\vec{r} = 0$, ω_0 = Oszillatorkoeffizient)

Offenbar ist

$$\langle \mathbf{U} \rangle = \frac{1}{2} m_0 \omega_0^2 \int \hat{\psi}_{(r)}^* r^2 \hat{\psi}_{(r)} d^3r$$

ganz analog zu

$$\left\langle \frac{\mathbb{P}^2}{2m_0} \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m_0} \int c_{(\vec{k})}^* k^2 c_{(\vec{k})} dk$$

aufgebaut und kann daher auf ganz entsprechende Weise überführt werden in:

$$\langle \mathbf{U} \rangle = \frac{m_0 \omega_0^2}{2} c_{(\vec{k})}^* (i \vec{\nabla}_k)^2 c_{(\vec{k})} dk$$

mit

$$\vec{\nabla}_k = \left(\frac{\partial}{\partial k_x}, \frac{\partial}{\partial k_y}, \frac{\partial}{\partial k_z} \right)$$

Anmerkung 18 (Nebenberechnung):

Für die Umwandlung braucht man nur zu ersetzen:

$$\psi_{(r)} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int c_{(\vec{k})} e^{i\vec{k}\vec{r}} d^3k$$

und beachte:

$$i \vec{\nabla}_k e^{i\vec{k}\vec{r}} = -\vec{r} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$(i \vec{\nabla}_k)^2 e^{-i\vec{k}\vec{r}} = r^2 e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} = \delta_{(\vec{k}' - \vec{k})}$$

(Deltafunktion)

Man erhält also:

$$\langle \mathbb{H} \rangle = \int c_{(\vec{k})}^* \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \mathbf{U}_{(\vec{r})} \right] c_{(\vec{k})} d^3k \quad (6.17)$$

mit $\vec{r} = i\vec{\nabla}\vec{r}$

Die Extremalaufgabe für $\langle \mathbb{H} \rangle$ liefert jetzt eine Differentialgleichung für $c_{\vec{k}}$:

$$\hat{\mathbb{H}} c_{(\vec{k})} = \mathbf{E} c_{(\vec{k})} \quad (6.18)$$

mit

$$\hat{\mathbb{H}}_{(\vec{k})} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \mathbf{U}_{(\vec{r})} \quad (6.19)$$

und $\vec{r} = i\vec{\nabla}\vec{r}$ als der „Impulsdarstellung des Ortsoperators“.

Die Gleichung 6.18 heißt einsprechend *Impulsdarstellung der SCHRÖDINGER-Gleichung*.

In dem hier vorliegenden Spezialfall sind also Orts- und Impulsdarstellung formal äquivalent. Im allgemeinen wenn u.B. $\mathbf{U}_{(\vec{r})}$ ein Polynom n-ter Ordnung ist, wird die SCHRÖDINGER-Gleichung in Impulsdarstellung eine Differentialgleichung n-ter Ordnung. In der Ortsdarstellung bleibt die **Schrödinger-Gleichung** (im nichtrelativistischen Fall) für jedes Potential dagegen stets eine Differentialgleichung 2-ter Ordnung.

6.4 Das Wasserstoffatom

6.4.1 Gebundene Zustände des Wasserstoffatoms

Man behandle das **Wasserstoffatom** in der Näherung:

- punktförmiger, schwerer Kerne
- mit der Ladung e
- ein Elektron mit der Ladung e^- und der Masse m_0 im Felde des Kerns.

Der zugehörige Quantenoperator lautet:

$$\mathbb{H} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \vec{\nabla}^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{r}|} \quad (6.20)$$

$r = 0$ ist der Ursprung des Koordinatensystems und der Ort des Kerns.

Wegen der Zentralsymmetrie des Potentials empfiehlt sich die Einführung von sphärischen Polarkoordinaten r, θ, φ . Zur Schreibvereinfachung empfiehlt sich weiterhin r durch die dimensionslose Größe $\hat{r} = \frac{r}{a_0}$ zu ersetzen wobei

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0} \frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2} = 0,5291 \cdot 10^{-8} \text{ cm} \quad (6.21)$$

eine für das Elektron im Kernpotential charakteristische Länge ist, die als **Bohrscher Radius** bezeichnet wird.

Dann lässt sich die **Schrödinger-Gleichung**

$$\mathbb{H}\psi_{(\vec{r})} = E\psi_{(\vec{r})}$$

in diesen Koordinaten schreiben:

$$\left(\hat{\vec{\nabla}}^2 + \frac{2}{\hat{r}} + \epsilon \right) \hat{\psi}_{(\hat{r})} = 0$$

mit

$$\epsilon = \frac{E}{1\text{Ryd}} \quad (\text{Ryd} = \text{Rydberg}) \quad (6.22)$$

$$1\text{Ryd} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{1}{a_0} \right)^2 = \frac{e^4 m_0}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} = 13.604 \text{eV} \quad (6.23)$$

Beachte:

$$\hat{\vec{\nabla}} = \left(\frac{\partial}{\partial \hat{x}}, \frac{\partial}{\partial \hat{y}}, \frac{\partial}{\partial \hat{z}} \right)$$

Wegen $\int |\hat{\psi}_{(\hat{r})}|^2 d^3\hat{r} = 1$ ist jetzt auch $\hat{\psi}_{(\hat{r})}$ eine dreidimensionale Funktion.

Anmerkung:

Im folgenden wird zur Schreibvereinfachung die Kennzeichnung der dreidimensionalen Größen durch ein $\hat{\cdot}$ -symbolisiert, wieder fortgelassen.

Kommentar:

Häufig wird anstelle der Energieeinheit 1 Hartee = 2 Ryd verwendet, aber nach wie vor a_0 als Längeneinheit beibehalten. Man unterscheidet daher in der Literatur zwischen atomaren (RYDBERG-) bzw. atomaren (HARTREE-) Einheiten, im englischen mit a_U (ATOMIC UNITS) abgekürzt.

Der Vorteil der HARTREE-Einheit: Die **Schrödinger-Gleichung** erhält die Form:

$$\left[-\frac{1}{2} \vec{\nabla}^2 + \frac{1}{r} + e \right] \psi_{(\hat{r})} = 0 \quad (6.24)$$

Zur weiteren Behandlung der Differentialgleichung ?? beachte man:

$$\underline{\Delta} = \vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

mit

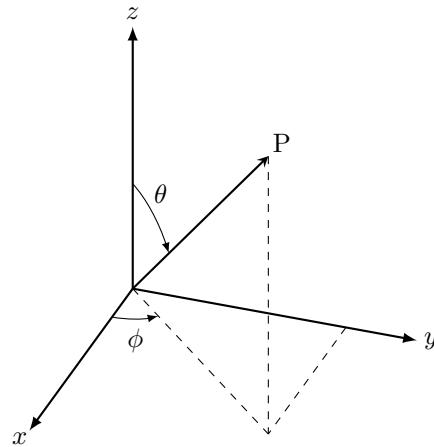


Abbildung 6.5: Graphische Darstellung der Polarkoordinaten.

$$\begin{aligned}x &= r \cdot \cos \varphi \cdot \sin \theta \\y &= r \cdot \sin \varphi \cdot \sin \theta \\z &= r \cdot \cos\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}0 \leq r &\leq \infty \\0 \leq \theta &\leq \pi \\0 \leq \varphi &\leq 2\pi\end{aligned}$$

Die Umrechnung von $\underline{\Delta}$ auf sphärische Polarkoordinaten liefert:

$$\underline{\Delta} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (6.25)$$

Dieses Resultat kann in folgender Form geschrieben werden:

$$\underline{\Delta} = \underline{\Delta}_r + \frac{1}{r^2} \underline{\Delta}_{\theta, \varphi} \quad (6.26)$$

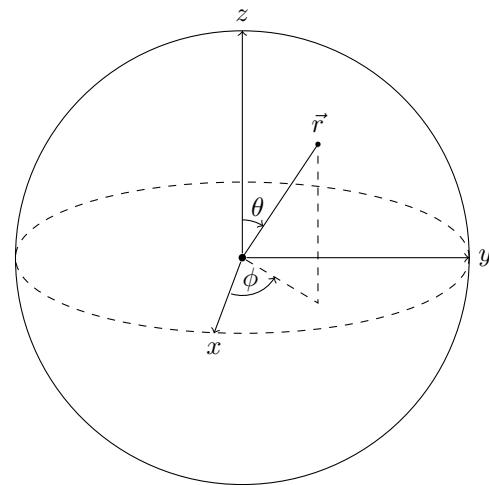


Abbildung 6.6: Graphische Darstellung der Polarkoordinaten.

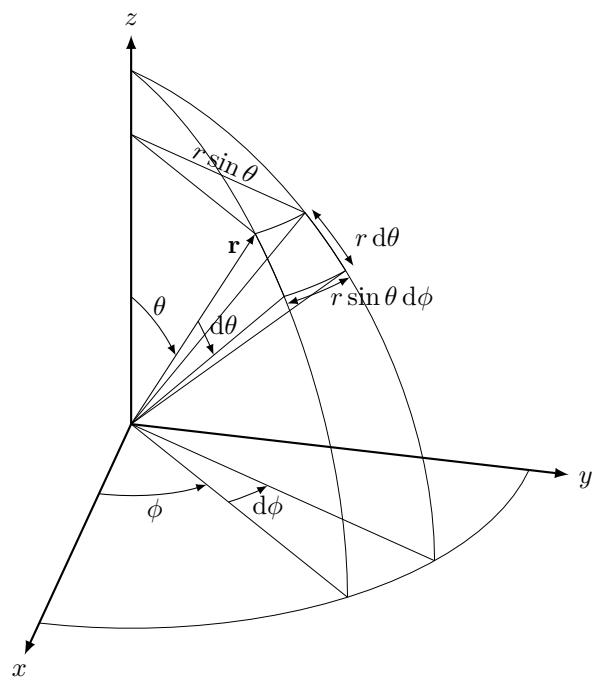


Abbildung 6.7: Graphische Darstellung der differentiellen Polarkoordinaten.

mit

$$\underline{\Delta}_r = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \quad (6.27)$$

$$\underline{\Delta}_{\theta,\varphi} = \underline{\Delta}_\theta \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (6.28)$$

$$\underline{\Delta}_\theta = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (6.29)$$

Man mache für die Funktion $\psi_{(r,\theta,\varphi)}$ den Ansatz:

$$\psi_{(r,\theta,\varphi)} = \mathcal{R}_{(r)} \Theta_{(\theta)} \varphi_{(\varphi)} \quad (6.30)$$

und führe dies in ?? ein. Dann wird mit Verwendung von 6.25, 6.27-6.29:

$$\begin{aligned} r^2 \sin^2 \theta \left(\frac{1}{R} \Delta_\nu R + \epsilon + \frac{2}{r} \right) + \frac{\sin^2 \theta}{\Theta} \underline{\Delta}_\theta \Theta &= -\frac{1}{\varphi} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \varphi^2} \\ F_{(r,\varphi)} &= G_{(\varphi)} \end{aligned}$$

Die linke Seite dieser Gleichung hängt nur von r, φ , die rechte nur von φ ab. Also müssen beide Seiten gleich einer Konstanten sein, die man mit m^2 bezeichnet kann:

$$-\frac{1}{\varphi} \frac{d^2 \varphi}{d\varphi^2} = m^2$$

oder

$$\left(\frac{d^2}{d\varphi^2} + m^2 \right) \varphi_{(\varphi)} = 0 \quad (6.31)$$

Die beiden Fundamentalgleichungen dieser Gleichung lauten:

$$e^{\pm im\varphi} \quad \text{mit } m \in \mathbb{Z}$$

da

$$\varphi_{allgemein(\varphi)} = c_1 e^{im\varphi} + c_2 e^{-im\varphi}$$

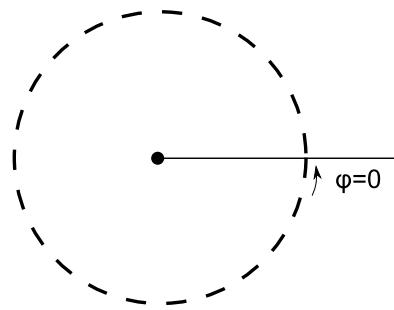


Abbildung 6.8: Abbildung zur Gleichung

für alle φ stetig sein muß, d.h. es muß gelten:

$$\varphi_{allgemein}(\varphi + 2\pi) = \varphi_{allgemein}(\varphi)$$

$$e^{im(\varphi + 2\pi)} = e^{im\varphi}$$

$$e^{im2\pi} = 1 \text{ und mit } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Man erhält jetzt, wenn man die obige (r, θ) -abhängige Seite gleich m^2 setzt:

$$\frac{1}{\Theta} \Delta_\theta \Theta - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} = -r^2 \left(\frac{1}{\mathcal{R}} \Delta_r \mathcal{R} + \epsilon + \frac{2}{r} \right)$$

$$f(\theta) = g_{(r)}$$

Hier gilt wieder das oben benutzte Argument. Man kann die hier auftretende Konstante λ nennen und erhält:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \epsilon + \frac{2}{r} - \frac{\lambda}{r^2} \right) \mathcal{R}_{(r)} = 0 \quad (6.32)$$

$$\left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} + \lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta_{(\theta)} = 0 \quad (6.33)$$

Wenn man in 6.33 einführt²:

$$x = \cos \theta \quad (6.34)$$

dann lässt sich diese in der Form schreiben:

$$\left[(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + \lambda - \frac{m^2}{1-x^2} \right] \Theta_{(x)} = 0 \quad (6.35)$$

Diese Gleichung lässt sich für $x \approx 1$, ($\theta \approx 0$) näherungsgweise schreiben als

$$(1-x^2)^2 \Theta'' - 2x(1-x^2)\Theta' - m^2\Theta = 0$$

Diese Gleichung wird gelöst durch

$$\Theta = (1-x^2)^{|m|/2}$$

Denn es ist

$$\Theta' = -|m|x \frac{\Theta}{1-x^2}$$

und

$$\Theta'' = -|m| \frac{\Theta}{1-x^2} - |m| \frac{2x^2}{(1-x^2)^2} \Theta - |m|x \frac{\Theta'}{1-x^2}$$

bzw.

$$\Theta'' = m^2 \frac{x^2}{(1-x^2)^2} \Theta - |m| \frac{2x^2}{(1-x^2)^2} \left(1 + \frac{1-x^2}{2x^2} \right) \Theta$$

²Beachte: x hat hier nicht die Bedeutung einer kartesischen x -Koordinate, sondern stellt nur eine Abkürzung dar

Da $\frac{1-x^2}{2x^2} \ll 1$ kann dieser Term in dieser Näherung vernachlässigt werden.

Also wird:

$$\begin{aligned}(1-x^2)^2 \Theta'' &= m^2 x^2 \Theta - |m| 2x^2 \Theta \\ &= m^2 \left[1 - \underbrace{(1-x^2)}_{\ll 1} \right] \Theta - |m| 2x^2 \Theta\end{aligned}$$

und ferner

$$-2x(1-x^2) \Theta' = |m| 2x^2 \Theta$$

Man setzte daher allgemein für $\Theta_{(x)}$ an:

$$\Theta_{(x)} = (1-x^2)^{|m|/2} \cdot f_{m(x)} \quad (6.36)$$

Dies ins 6.35 eingesetzt, liefert eine Differentialgleichung für $f_{m(x)}$:

$$(1-x^2) f_m'' - 2(m+1)x f_m' + [\lambda - m(m+1)] f_m = 0 \quad (6.37)$$

Differentiert man diese Gleichung nach x , so wird:

$$(1-x^2)(f_m')'' - 2(m+2)x(f_m')' + [\lambda - (m+1)(m+2)](f_m') = 0 \quad (6.38)$$

Man kann also verschiedene Lösungen zu 6.37 unterscheiden, die m -indizierbar sind und die Eigenschaft haben:

$$f_{m+1(x)} = \frac{d}{dx} f_m$$

Allgemein:

$$f_{m(x)} = \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} f_{0(x)} \quad (6.39)$$

wo $f_{0(x)}$ der Differentialgleichung genügt:

$$(1 - x^2) f''_{0(x)} - 2x f'_{0(x)} + \lambda f_{0(x)} = 0 \quad (6.40)$$

Man macht für $f_{0(x)}$ den Ansatz:

$$f_{0(x)} = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} x^{\nu}$$

und erhält:

$$\begin{aligned} f'_{0(x)} &= \sum_{\nu=1}^{\infty} \nu a_{\nu} x^{\nu-1} \\ f''_{0(x)} &= \sum_{\nu=2}^{\infty} \nu(\nu-1) a_{\nu} x^{\nu-2} \end{aligned}$$

Also wird:

$$\begin{aligned} -2x f'_{0(x)} &= -2 \sum_{\nu=0}^{\infty} \nu a_{\nu} x^{\nu-1} \\ -x^2 f''_{0(x)} &= - \sum_{\nu=0}^{\infty} \nu(\nu-1) a_{\nu} x^{\nu} \end{aligned}$$

Damit folgt aus der Differentialgleichung:

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} [(\nu+1) \cdot (\nu+2) a_{\nu+2} - ((\nu+1)\nu - \lambda) a_{\nu}] x^{\nu} = 0 \quad \forall x \quad (6.41)$$

Daraus folgt, daß

$$a_{\nu+2} = \frac{\nu(\nu+1) - \lambda}{(\nu+1) \cdot (\nu+2)} a_{\nu} \quad (6.42)$$

Für $x = 1$ wird:

$$f_{0(1)} = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu}$$

Für hinreichend großes ν gilt:

$$a_{\nu+2} \approx a_\nu \quad \forall \nu > \nu_{gru}$$

d. h. die Reihe würde divergieren.

Dieser Fall ist aber aus physikalischen Gründen auszuschließen. Die Divergenz von $\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu$ ist zu vermeiden, wenn einer der Koeffizienten gleich Null wird. Dies ist gewährleistet, wenn der zu diesen Koeffizienten gehörige Index z. B. den Wert annimmt:

$$\nu_{max} = l \geq 0$$

$$\longrightarrow \lambda = l(l+1)$$

Wenn l gerade ist, dann muß $a_1 = 0$ sein, und es folgt $a_{2\nu+1} = 0$ für alle $\nu \geq 1$ aufgrund der Rekursionsformel 6.42. Andernfalls (d. h. wenn $a_1 \neq 0$) gilt $a_{2\nu+1} \neq 0 \quad \forall \nu$ und die Summe für $f_{0(1)}$ würde aufgrund der obigen Überlegungen divergieren. Entsprechend gilt für ungerades l , daß $a_0 = 0$ sein muß, woraus $a_{2\nu} = 0$ für alle $\nu > 1$ folgt.

$f_{0(x)}$ ist also ein Polynom des l -ten Grades, das entweder gerade oder ungerade Potenzen von x enthält. Man bezeichnet im folgenden diese Polynome $f_{0(x)}$ als **Legendre-Polynome** und benutze ab jetzt dafür das Symbol $P_{l(x)}$.

Es läßt sich einfach zeigen, daß $P_{l(x)}$ mit der folgenden Bildungsvorschrift erzeugt werden kann :

$$P_{l(x)} = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^2}{dx^l} (x^2 - 1)^l \quad (6.43)$$

(Rodrigues-Formel)

Der Vorfaktor ist (willkürlich) so gewählt, daß

$$P_{l(1)} = 1 \quad \text{und} \quad P_{l(-1)} = (-1)^l$$

Aus 6.36 folgt dann mit Verwendung von 6.39 :

$$\Theta_{(x)} = (1 - x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_{l(x)} \quad (6.44)$$

Mit 6.43 kann man diese Beziehung in der Forme schreiben:

$$\Theta_{(x)} = P_{l(x)}^{|m|} (1 - x^2)^{|m|/2} \frac{1}{2^l l!} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} (x^2 - 1)^l \quad (6.45)$$

Hieraus folgt sofort:

$$|m| \leq l \quad (6.46)$$

Wäre $|m| > l$ dann ergibt sich automatisch $\Theta_{(x)} = 0$. Die Polynome $P_{l(x)}^{|m|}$ sind also (vom Vorfaktor $(1-x^2)^{|m|/2}$ abgesehen) Polynome $(l-|m|)$ -ten Grades und heißen **zugeordnete Legendre-Polynome**.

Man kann übrigens 6.46 auch in der Form schreiben:

$$-l \leq m \leq +l \quad (6.47)$$

Geht man mit $\lambda = l(l+1)$ in die Differentialgleichung 6.32 ein, so erhält man:

$$R''_{(r)} + \frac{2}{r} R'_{(r)} + \left[\epsilon + \frac{2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{(r)} = 0 \quad (6.48)$$

Für $r \gg 1$ gilt näherungsweise:

$$R''_{(r)} + \epsilon R_{(r)} = 0 \quad (6.49)$$

Die Lösung dieser Gleichung kann man in der Form schreiben:

$$R_{(r)} = c \cdot e^{\alpha r}$$

mit

$$\alpha^2 = -\epsilon \quad (6.50)$$

Damit diese Funktion zu einem normierbaren $\psi_{r,\theta,\varphi}$) führt, d.h. zu

$$\int |\psi_{r,\theta,\varphi}|^2 d^3r = 1$$

muß ϵ in 6.50 negativ sein ($\epsilon < 0$).

In diesem Fall ist α reell und die Normierbarkeit von ψ verlangt zusätzlich $\alpha > 0$.

Die zweite Lösung der obigen Gleichung $R_{(r)}'' + \epsilon R_{(r)} = 0$ von der Form:

$$R_{(r)} = c \cdot e^{+\alpha r}$$

ist offensichtlich nicht normierbar und muß daher ausgeschlossen werden.

Für $r \ll 1$ kann [6.48](#) approximativ ersetzt werden durch:

$$R_{(r)}'' + \frac{2}{r} R_{(r)}' - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{(r)} = 0$$

Die beiden Lösungen lauten hier:

$$R_{(r)} = c \cdot \begin{cases} r^l \\ r^{-l-1} \end{cases} \quad (6.51)$$

Verifizierung durch Einsetzung :

Die untere Lösung muß aus physikalischen Gründen wieder ausgeschlossen werden, da die potentielle Energie (WW-Energie mit dem Kern) im Prinzip die Form hat:

$$\begin{aligned} \int \frac{2}{r} |\psi|^2 d^3r &\approx 4\pi \int_0^\infty \underbrace{\frac{2}{r} R_{(r)}^2 r^2 dr}_{=d^3r} \\ &\approx \int_0^\infty r \cdot R_{(r)}^2 dr = \frac{1}{r^{2l+2}} \end{aligned}$$

Das Integral $\int_0^\infty \frac{1}{r^{2l+2}} dr$ divergiert selbst für $l = 0$ immer noch logarithmisch.

Man macht also nach diesen Vorüberlegungen den Ansatz:

$$R_{(r)} = c \cdot r^l e^{-\sqrt{|\epsilon|} f_{(r)}} \quad (6.52)$$

Man erhält durch Einsetzen von [6.52](#) in [6.48](#):

$$f_{(r)}'' + 2 \cdot \left(\frac{l+1}{r} - \alpha \right) f_{(r)}' - 2 \frac{(l+1)\alpha - 1}{r} f_{(r)} = 0 \quad (6.53)$$

mit $\alpha = \sqrt{|\epsilon|}$.

Man macht für $f_{(r)}$ wieder einen Potenzreihenansatz:

$$f_{(r)} = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} r^{\nu}$$

$$f'_{(r)} = \sum_{\nu=1}^{\infty} \nu a_{\nu} r^{\nu-1} = \sum_{\nu=-1}^{\infty} a_{\nu+1} (\nu + 1) r^{\nu}$$

$$f''_{(r)} = \sum_{\nu=2}^{\infty} \nu(\nu - 1) a_{\nu} r^{\nu-2} = \sum_{\nu=-1}^{\infty} \nu a_{\nu+2} (\nu + 1) \cdot (\nu + 2) r^{\nu}$$

Ferner gilt:

$$\frac{1}{r} f'_{(r)} = \sum_{\nu=1}^{\infty} \nu a_{\nu} r^{\nu-2} = \sum_{\nu=-1}^{\infty} (\nu + 2) a_{\nu+2} r^{\nu}$$

$$\frac{1}{r} f_{(r)} = \sum_{\nu=1}^{\infty} a_{\nu} r^{\nu-1} = \sum_{\nu=-1}^{\infty} a_{\nu+1} r^{\nu}$$

Damit folgt:

$$\sum_{\nu=-1}^{\infty} \{a_{\nu+2} [(\nu + 2) \cdot (\nu + 1) + 2(l + 1) \cdot (\nu + 2)] - 2a_{\nu+1} [(\nu + 1) \alpha - 1 + (l + 1) \alpha]\} r^{\nu} = 0 \quad (6.54)$$

Fehler: Formel überprüfen.

Diese Reihe kann für alle ν verschwinden, wenn alle Koeffizienten $\{\dots\}$ verschwinden.

Dies heißt:

$$a_{\nu+1} = 2 \frac{(\nu + l + 1) \cdot \alpha - 1}{(\nu + 1) \cdot (\nu + 2l + 2)} a_{\nu} \quad (6.55)$$

Fehler: Formel überprüfen.

Bricht die Potenzreihe ?? nicht ab, so ergibt sich eine transzendente Funktionm für die gilt:

$$a_\nu \approx 2\alpha \cdot \frac{1}{\nu + 1} a_\nu$$

für hinreichend großes ν , d. h.

$$a_\nu \approx \frac{1}{\nu!} (2\alpha)^\nu$$

Dieses Koeffizientenverhalten entspricht der Reihe:

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} (2\alpha\nu)^\nu = e^{2\alpha r}$$

Nebenrechnungen :

$$\begin{aligned} \alpha(n + l + 1 &= 1 \\ \alpha &= \frac{1}{n + l + 1} \\ \alpha^2 = -\epsilon &= \frac{1}{(n + l + 1)^2} \end{aligned}$$

Die Gesamtfunktion $R_{(r)}$ würde also in diesem Fall wie $\exp(\alpha r)$ divergieren, d.h. nicht normierbar sein.

Man muß demnach das Abbrechen der Potenzreihe für $f_{(r)}$ verlangen. Diese Abbrechen ist gewährleistet, wenn der Zähler verschwindet

$$(\nu_0 + l + 1) \alpha = 1$$

für ein bestimmtes $\nu = \nu_0$. Alle Koeffizienten a_ν für $\nu > \nu_0$ verschwinden dann. Aus der obigen Abbruchsbedingung folgt:

$$\alpha = \frac{1}{\nu_0 + l + 1}$$

Dieses Ergebnis läßt sich wegen **6.50** schreiben als:

$$\epsilon = -\frac{1}{n^2} \quad (6.56)$$

To Do 16 (Abbildung einfügen):

Abbildung 6.9: Oszillierende Funktion

Wobei $n = \nu_0 + l + 1$ ($n \geq 1$) gesetzt worden ist. Das Ergebnis 6.56 kann man auch mit Verwendung von 6.23 schreiben als:

$$E = -\frac{1 \text{ Ryd}}{n^2} \quad (6.57)$$

Virialsatz :

$$2 \langle E_{kin} \rangle = - \langle V_{pot} \rangle$$

$$E = \langle E_{kin} \rangle + \langle V_{pot} \rangle = \frac{1}{2} \langle V_{pot} \rangle$$

Aus 6.50 folgt, daß man α schreiben kann in der Form:

$$\alpha = \frac{1}{n}$$

Man setzt dies in die Rekursionsformel 6.55 ein und bekommt:

$$f_{(r)} = \sum_{\nu=0}^{n-l-1} c_\nu \left(\frac{2r}{n} \right)^\nu$$

wobei anstelle der ursprünglichen Koeffizienten a_ν neue Koeffizienten c_ν eingeführt worden sind, die der Rekursionsformel genügen:

$$c_{\nu+1} = -\frac{(n+l) - (2l+1) - \nu}{(\nu+1)[(\nu+1) + (2l+1)]} \cdot c_\nu$$

Fehler: Formel überprüfen.

Wegen des alternierenden Vorzeichens, das sich aus dieser Formel für aufeinanderfolgende Potenzen von $\frac{2r}{n}$ ergibt, stellt $f_{(r)}$ eine oszillatorische Funktion dar.

Zugeordnete LAGUERRE-Polynome $L_{N(r)}^M$ sind definiert durch die Rekursionsformel

$$d_{\nu+1} = -d_\nu \frac{(N-M) - \nu}{(\nu + 1) \cdot (\nu + 1 + M)}$$

Ferner ist gesetzt:

$$d_0 = \frac{(N!)^2}{M!(N-M)!}$$

Demnach kann man schreiben:

$$f_{(r)} = L_{n+1(r)}^{2l+1}$$

mit

$$c_0 = \frac{((n+l)!)^2}{(n-l-1)!(2l+1)!}$$

Zusammenfassend erhält man also für $\psi_{(r,\theta,\varphi)}$:

$$\psi_{n,l,m(r,\theta,\varphi)} = c_{n,l} \left(\frac{2r}{n}\right)^2 e^{-\frac{r}{n}} L_{n+l(r)}^{2l+1} Y_{l,m(\theta,\varphi)} \quad (6.58)$$

mit

$$Y_{l,m(\theta,\varphi)} = c_{l|m|} P_{l(\cos\theta)}^{|m|} e^{im\varphi}$$

der **Kugelflächenfunktion**

Dabei sein die Konstanten $c_{l|m|}$ so festgelegt, daß

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm(\theta,\varphi)}^* Y_{lm(\theta,\varphi)} \sin\theta d\theta d\varphi = 1 \quad (6.59)$$

$\sin\theta d\theta d\varphi = d\Omega$ (räumlicher Winkel).

Ebenso ist c_{nl} in 6.58 festgelegt durch die Forderung:

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\psi_{(r,\theta,\varphi)}|^2 r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi = 1 \quad (6.60)$$

Dies liefert (Rechnung wird nicht ausgeführt)

$$c_{nl} = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n-l)]^3}} \quad (6.61)$$

Ferner gilt:

$$l \leq n-1 \longrightarrow l = 1, 2, 3, \dots, n-1 \quad (6.62)$$

$$|m| \leq l \longrightarrow m = -l, \dots, +l \quad (6.63)$$

Zu festem l gibt es also $(2l+1)$ verschiedene Zustände, die sich durch m unterscheiden. Also hat man zu festem n

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) &= 2 \cdot \sum_{l=0}^{n-1} l + n \\ &= n^2 \end{aligned}$$

³

verschiedene Zustände (Wellenfunktionen zur zeitabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung für feste Energien $\epsilon = -\frac{1}{n^2}$, die gleiche Energien besitzen).

Die Zahl g_n , die angibt wieviele Zustände gleiche Energie haben heißt „*Entartungszustand*“. (Man sagt auch, diese Zustände seien miteinander entartet → Eigenschaft der Symmetrie des Potentials).

Energien welche zu normierbaren Lösungen der zeitunabhängigen SCHRÖDINGERgleichung heißen „*Entartungseigenwerte*“. Es ist üblich, diese Eigenwerte als „*Energieniveaus*“ in Form einer Folge paralleler Linien zu zeichnen.

³Ähnlich dem **Kepler-Problem** ; nur gleiche Hauptachse.

To Do 17 (Abbildung einfügen):

Abbildung 6.10: Energieniveaus beim Wasserstoff

Zur Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen

Die **Kugelflächenfunktionen** waren definiert als:

$$Y_{lm(\theta,\varphi)} = c_{l|m|} P_{l(\cos\theta)}^{|m|} e^{im\varphi}$$

Die $P_{l(x)}^{|m|}$ genügten der Differentialgleichung

$$\left[(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right) \right] \cdot P_{l(x)}^{|m|} = 0$$

Diese schreiben wir um mit Hilfe des Operators

$$\mathbb{D} = \frac{d}{dx}$$

und erhalten dann

$$\mathbb{D} \left[(1-x^2) \mathbb{D} P_{l(x)}^{|m|} \right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] \cdot P_{l(x)}^{|m|} = 0$$

Ebenso gilt, wenn man l durch l' ersetzt:

$$\mathbb{D} \left[(1-x^2) \mathbb{D} P_{l'(x)}^{|m|} \right] + \left[l'(l'+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] \cdot P_{l'(x)}^{|m|} = 0$$

Man bildet jetzt

1. $P_{l'}^{|m|}$ bzw.
2. $P_l^{|m|}$

und erhält die Ausdrücke:

$$P_{l'}^{|m|} \mathbb{D} \left\{ (1 - x^2) \mathbb{D} P_l^{|m|} \right\}$$

und

$$P_l^{|m|} \mathbb{D} \left\{ (1 - x^2) \mathbb{D} P_{l'}^{|m|} \right\}$$

Man beachte:

$$\begin{aligned} P_{l'}^{|m|} \mathbb{D} \left\{ (1 - x^2) \mathbb{D} P_l^{|m|} \right\} &= \mathbb{D} \left\{ P_{l'}^{|m|} (1 - x^2) \mathbb{D} P_l^{|m|} \right\} \\ &\quad - (1 - x^2) (\mathbb{D} P_l^{|m|}) \cdot (\mathbb{D} P_{l'}^{|m|}) \end{aligned}$$

Daher wird

$$\mathbb{D} \left\{ (1 - x^2) \left[P_{l'}^{|m|} (\mathbb{D} P_l^{|m|}) - P_l^{|m|} (\mathbb{D} P_{l'}^{|m|}) \right] \right\} + \underbrace{(l - l') \cdot (l + l' + 1)}_{=l(l+1)-l'(l'+1)-ll'-l'l} P_{l'}^{|m|} P_l^{|m|} = 0$$

Diese Gleichung integriert man bezüglich x von -1 bis $+1$. Der erste Term liefert wegen des Faktors $(1 - x^2)$ keinen Beitrag. Also wird:

$$\int_{-1}^{+1} P_{l'}^{|m|} \cdot P_l^{|m|} dx = 0 \quad \text{für } l' \neq l$$

Wegen $\left[P_{l(x)}^{|m|} \right]^2 \geq 0$ folgt dann:

$$\int_{-1}^{+1} P_{l'(x)}^{|m|} P_{l(x)}^{|m|} dx = \delta_{ll'} \cdot \frac{2}{2l + 1} \cdot \frac{(l + |m|)!}{(l - |m|)!}$$

Damit wird (mit $x = \cos \theta$ und $dx = -\sin \theta d\theta$):

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l'm'(\theta,\varphi)}^* Y_{lm(\theta,\varphi)} \sin \theta d\theta d\varphi &= c_{l'm'} c_{lm} \int_{-1}^{+1} P_{l'(x)}^{|m'|} P_{l(x)}^{|m|} dx \cdot \underbrace{\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi}_{=2\pi\delta_{mm'}} \\ &= \delta_{ll'} \delta_{mm'} \cdot \frac{4\pi}{2l+1} \cdot \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} \cdot c_{l'm'} c_{lm} \end{aligned}$$

Für die Normierungsfaktoren $c_{l|m|}$ wählt man nun (Konvention):

$$c_{l|m|} = (-1)^{\frac{|m|-m}{2}} \cdot \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)}}$$

Dann gilt:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l'm'(\theta,\varphi)}^* Y_{lm(\theta,\varphi)} \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (6.64)$$

Die **Kugelflächenfunktion** $Y_{lm(\theta,\varphi)}$ bilden also einen Satz orthonormaler Funktionen. Mit der obigen Wahl der c_{lm} sind die Y_{lm} dann:

$$Y_{lm(\theta,\varphi)} = (-1)^{\frac{|m|-m}{2}} \cdot \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_{l(\cos\theta)}^{|m|} e^{im\varphi} \quad (6.65)$$

mit $l = 1, 2, 3, \dots$ und $m = -l, -l+1, \dots, l$

Man kann nun zeigen, daß die Y_{lm} einen sog. vollständigen Satz orthonormaler Funktionen bilden, d.h. jede stetige Funktion $f_{(\theta,\varphi)}$, deren Ableitungen noch gewisse Stetigkeitseigenschaften haben läßt sich in einer Reihe entwickeln:

$$f_{(\theta,\varphi)} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} B_{lm} Y_{lm(\theta,\varphi)}$$

Wobei die Koeffizienten B_{lm} durch

$$B_{lm} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm(\theta,\varphi)}^* \cdot f_{(\theta,\varphi)} \sin \theta d\theta d\varphi$$

gegeben sind.

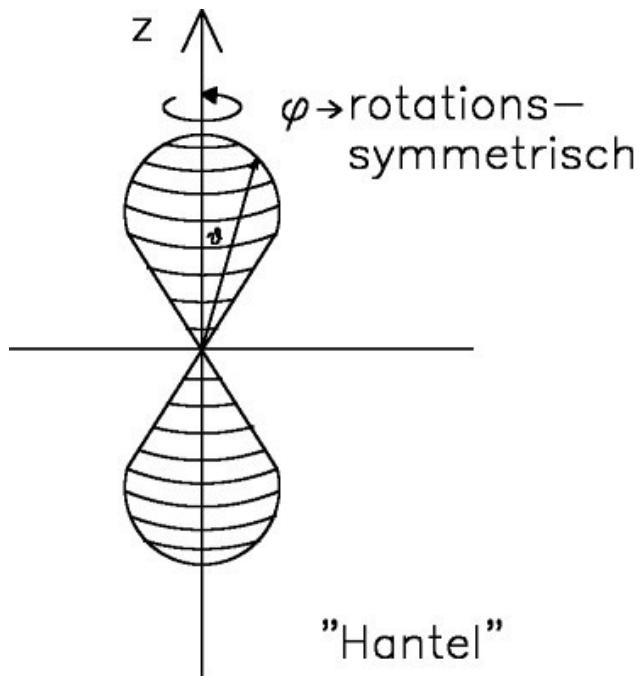


Abbildung 6.11: Winkelabhängige Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

6.4.2 Zur Entartung der Wasserstoff-Eigenzusände

Die l-Entartung

Die l -Entartung oder „zufällige“ Entartung (nur bei H-Atomen → COULOMB-Potential). Diese Entartung ist charakteristisch für ein Potential der Form

$$U_{(r)} = -\frac{\lambda}{r}$$

(im vorangegangenem $\lambda = 2$) und sie tritt auch schon beim klassischen **Kepler-Problem** in folgender Weise auf:

Alle Ellipsen mit gleicher großer Achse gehören zur gleichen Gesamtenergie.

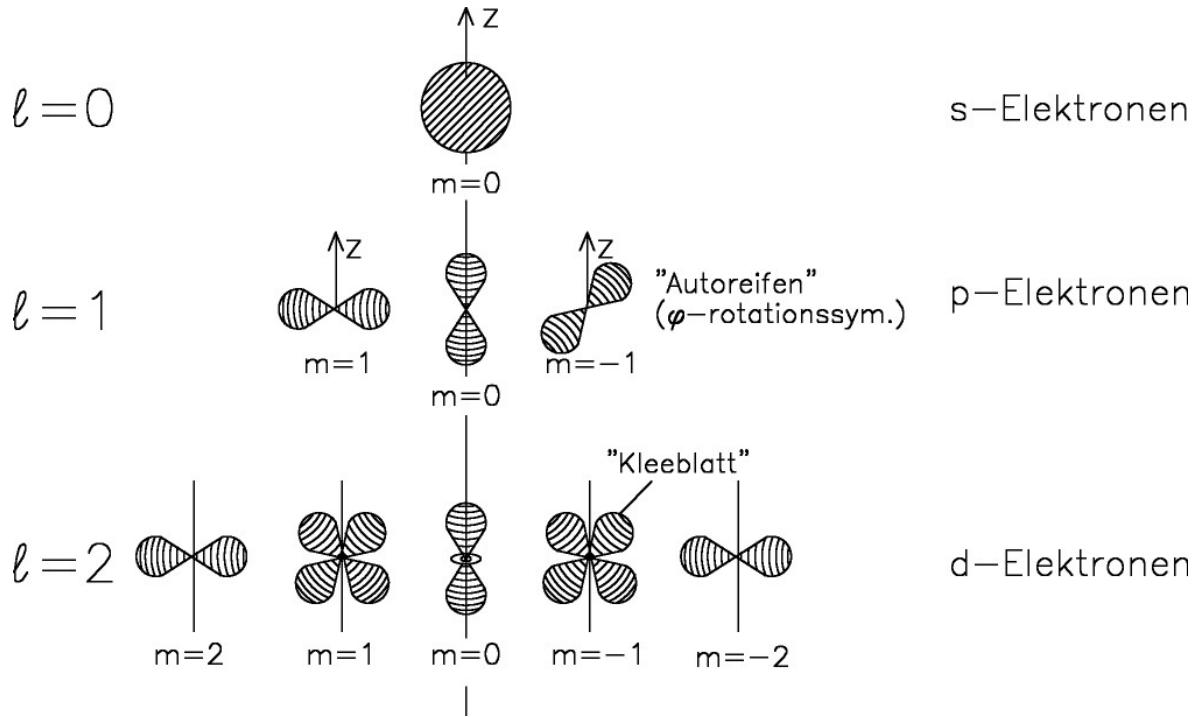


Abbildung 6.12: Darstellung der winkelabhängigen Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

Im folgenden wird gezeigt, daß bereits eine „kleine“ Abänderung des $-\frac{\lambda}{r}$ -Potentials zu einer Aufhebung der l -Entartung führt. Man ersetzt das Potential $\hat{U}_{(r)} = -\frac{2}{r}$ durch:

$$-\frac{2}{r} \left(1 - \frac{\delta}{2r}\right) = -\frac{2}{r} + \frac{\delta}{r^2}$$

(mit $\delta = \text{klein}$)

Man muß dann für $R_{(r)}$ im Radialanteil der SCHRÖDINGER-Gleichung ansetzen:

$$R_{(r)} = r^\beta e^{-\alpha r} f_{(r)}$$

wobei β gegeben ist durch:

$$\beta(\beta+1) = l(l+1) + \delta$$

Setzt man nun $\beta = l + \epsilon$ und $\epsilon = \text{Abweichung von } l$ und ϵ klein, so folgt:

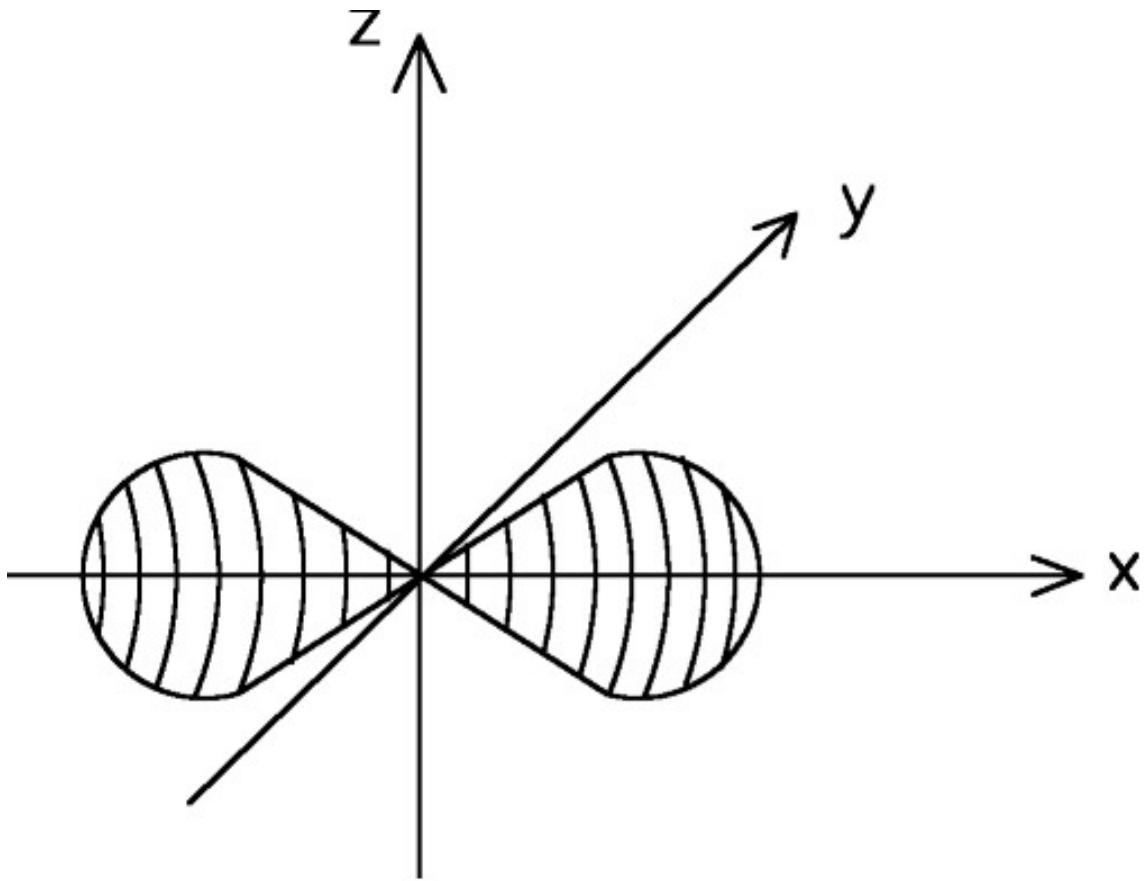


Abbildung 6.13: Darstellung eines p_x -Orbitals.

$$\beta(\beta+1) = (l+\epsilon)^2 + (\beta+\epsilon) = l^2 + l + \delta$$

bzw.

$$l^2 + l + 2\epsilon l + \epsilon + \epsilon^2 = l^2 + l + \delta$$

und wird nun ϵ^2 vernachlässigt, so ergibt sich:

$$\epsilon(2l+1) = \delta$$

$$\epsilon = \frac{1}{2} \cdot \frac{\delta}{l + \frac{1}{2}}$$

Also gilt:

$$\beta \approx l + \frac{1}{2} \cdot \frac{\delta}{l + \frac{1}{2}} \quad (6.66)$$

Macht man wieder für $f_{(r)}$ eine Potenzreihenentwicklung, so liefert die wegen der Normierbarkeit von $R_{(r)}$ zu verlangende Abbruchbedingung in der Rekursionsformel:

$$a_{\nu+1} = a_\nu \cdot \frac{\alpha(\nu + \beta + 1) - 1}{(\nu + 1) \cdot (\nu + 2\beta + 2)} \quad (6.67)$$

mit $\alpha(\nu + \beta + 1) = 1$

$\alpha' = \frac{1}{n'}$ mit $n' = \nu + \beta + 1 = \nu + l + 1 + \epsilon_{(l)}$

mit

$$\epsilon_{(l)} = \frac{1}{2} \cdot \frac{\delta}{l + \frac{1}{2}}$$

Ist \mathcal{E} die Energie, so war $\alpha^2 = -2\mathcal{E}$

⁴

Also gilt:

$$\mathcal{E} = -\frac{1}{2n'^2} = -\frac{1}{2(\nu + l + 1 + \epsilon_{(r)})^2} \quad (6.68)$$

Nun war $\nu + l + 1 = n$.

Also ist jetzt die Energie, wenn man statt \mathcal{E} genauer $\mathcal{E}_{l,n}$ schreibt:

$$\mathcal{E}_{l,n} = \frac{1}{2 \cdot (n + \epsilon_{(l)})^2} \quad (6.69)$$

⁴ Achtung: Überprüfen ob $\alpha^2 = -\mathcal{E}$ ist.

5

Die Energie hängt also jetzt außer von n auch noch von l ab. Zustände zu verschiedenen l gehören jetzt auch zu unterschiedlicher Energie.

Allgemein lässt sich zeigen, daß jede Art von zentralesymmetrischem Zusatzpotential zum Potential $-\lambda/r$ die l -Entartung aufhebt.

Die $|m|$ -Entartung

In jedem zentralesymmetrischen Potential, d.h. in jedem Potential, das nur von $|\vec{r}| = r$ abhängt, liegt die sog. „ m -Entartung“ vor. In jedem zentralesymmetrischen Potential lässt sich der Winkeleanteil der Wellenfunktion separieren:

$$\psi_{(r,\theta,\varphi)} = R_{(r)} \cdot Y_{l,m}(\theta,\varphi) \quad (6.70)$$

Nun ist der Erwartungswert der potentiellen Energie:

$$\langle U \rangle = \int \psi^* U \psi d^3r \quad (6.71)$$

Weil $U_{(\vec{r})}$ nur von r abhängt und nicht von θ bzw. φ wird $\langle U \rangle$:

$$\langle U \rangle = \int_0^\infty R_{nl(r)}^2 U_{(r)} r^2 dr \cdot \underbrace{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm}^* Y_{lm} \sin \theta d\theta d\varphi}_{=1} \quad (6.72)$$

Also hängt für ein festes n und l der Wert von $\langle U \rangle$ nicht von m an. Analog folgt wegen $\Delta_{\theta,\varphi} Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\theta,\varphi)$ für den Erwartungswert der kinetischen Energie:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{p^2}{2m_0} \right\rangle &= - \int_0^\infty R_{nl(r)} \left[\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} \right] \\ &\cdot \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm}^* Y_{lm} \sin \theta d\theta d\varphi \end{aligned}$$

Auch dieser Erwartungswert hängt nicht von m ab. Also gilt für ein zentralesymmetrisches Potential:

⁵ Achtung: Hier die 2 korrigieren.

$$\langle \mathbb{H} \rangle = \left\langle \frac{\mathbb{P}^2}{2m_0} \right\rangle + \langle U \rangle \quad (6.73)$$

hängt nicht von m ab.

Für den „Grad“ der Entartung gilt das Folgende:

- Im zentralesymmetrischen Potential ist jeder Energiewert (Eigenwert von \mathbb{H}) zu festem n und l $(2l+1)$ -fach entartet. Denn zu ϵ_{nl} gehören die $(2l+1)$ linear unabhängigen Eigenfunktionen: $R_{nl}(r)Y_{nl}(\theta,\varphi)$
- Im $-\lambda/r$ -Potential fallen außerdem zu festem n jeweils n -Energiewerte zusammen, entsprechend $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$. In diesem Fall ist der Entartungsgrad n^2 .

Anmerkung 19 (Die Ganzzahligkeit des Bahndrehimpulses):

^aIn vielen Lehrbüchern der Quantenmechanik wird die Ganzzahligkeit des Bahndrehimpulses damit begründet, dass die Wellenfunktion stetig und eindeutig sein müsse. Da die Abhängigkeit vom Azimuthalwinkel φ durch $\exp(im\varphi)$ gegeben ist, wobei m die magnetische Quantenzahl ist, müsste also m ganzzahlig sein. Dieses Argument geht fehl, wie schon Wolfgang Pauli gezeigt hat. Zwar muss das Betragsquadrat der Wellenfunktion stetig und eindeutig sein, nicht aber notwendigerweise die Wellenfunktion selbst. Man benötigt weitere Voraussetzungen über die Wellenfunktionen, um die Ganzzahligkeit des Bahndrehimpulses zu begründen. [369], [220]

^aQuelle: [Quelle:Quelle:\[https://www.uni-muenster.de/Physik.TP/~munsteg/physik_irrtuemer.html\]\(https://www.uni-muenster.de/Physik.TP/~munsteg/physik_irrtuemer.html\)](https://www.uni-muenster.de/Physik.TP/~munsteg/physik_irrtuemer.html)

Zusammenhang zwischen Bahnreihimpuls und atomaren Kreisstrom – Das Bohrsche Magneton

Bohrsches Magneton

Die Impulsstromdichte eines Teilchens war

$$\begin{aligned}\vec{j}_p &= m_0 \rho \vec{v} \\ \text{mit } \rho &= |\psi|^2 \\ \text{und } \vec{v} &= \frac{\hbar}{2m_0} \vec{\nabla} \tilde{\varphi}(\vec{r})\end{aligned}$$

und

$$\psi_{(\vec{r})} = |\psi_{(\vec{r})}| \cdot e^{i\tilde{\varphi}_{(\vec{r})}}$$

Damit ist:

$$\vec{j}_p = \hbar \cdot |\psi|^2 \vec{\nabla} \tilde{\varphi}$$

Dies lässt sich auch in der folgenden Form schreiben:

$$\vec{j}_p = \frac{\hbar}{2i} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

Man definiert nun als Drehimpulsstromdicht:

$$\vec{r} \times \vec{j}_p = \frac{\hbar}{2i} (\psi^* \vec{r} \times \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{r} \vec{\nabla} \psi^*) \quad (6.74)$$

Damit wird der Drehimpuls:

$$\langle \vec{L} \rangle = \int \vec{r} \times \vec{j}_p d^3r$$

also:

$$\langle \vec{L} \rangle = \frac{\hbar}{2i} \int \psi^* r \times \vec{\nabla} \psi d^3r - \frac{\hbar}{2i} \int \psi r \times \vec{\nabla} \psi^* d^3r \quad (6.75)$$

Durch Anwendung des **Gaußschen Satzes** unter Beachtung der Randbedingungen (Normierbarkeit) für $\psi_{(\vec{r})}$ lässt sich zeigen:

$$\int \psi \vec{r} \times \vec{\nabla} \psi^* d^3r = - \int \psi^* \vec{r} \times \vec{\nabla} \psi d^3r$$

Damit wird

$$\langle \mathbb{L} \rangle = \int \psi_{(\vec{r})}^* \vec{\mathbb{L}} \psi_{(\vec{r})} d^3r \quad (6.76)$$

Mit dem **Drehimpulsoperator**

$$\vec{\mathbb{L}} = \vec{r} \times \vec{\mathbb{P}} = \frac{\hbar}{i} (\vec{r} \times \vec{\nabla}) \quad (6.77)$$

$$\langle \vec{L} \rangle = \int \vec{r} \times \vec{j}_{p(\vec{r})} d^3r$$

$$j_p = \frac{\hbar}{2i} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

$$\langle \vec{L} \rangle = \int \psi_{(\vec{r})}^* \vec{\mathbb{L}} \psi_{(r)} d^3r \quad (6.78)$$

mit

$$\vec{\mathbb{L}} = \vec{r} \times \vec{\mathbb{P}} \quad (6.79)$$

$$\vec{\mathbb{P}} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (6.80)$$

$$(6.81)$$

Wegen $\vec{j}_p = \hbar |\psi_{(\vec{r})}|^2 \vec{\nabla} \tilde{\varphi}_{(\vec{r})}$ folgt sofort für Zustände im **zentralsymmetrischen Potential** wegen der generellen Form:

$$\psi_{(r,\theta,\varphi)} = R_{(r)} \cdot \underbrace{Y_{lm(\theta,\varphi)}}_{P_{l(\cos \theta)}^{|m|} e^{im\varphi}} \quad (6.82)$$

dass $\tilde{\varphi}_{(\vec{r})} = \tilde{\varphi}_{(\varphi)} = 0$ für Zustände zu $m = 0$. Also ist in diesen Zuständen zu $m = 0 : j_p = 0$ und daher auch:

$$\vec{r} \times \vec{j}_p = 0 \longrightarrow \vec{\mathbb{L}} = \int \vec{r} \times \vec{j}_p d^3r = 0 \quad (6.83)$$

Der Nablaoperator hat in **sphärischen Polarkoordinaten** die Form:

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (6.84)$$

Damit folgt aus:

To Do 18 (Abbildung einfügen):

Abbildung 6.14: Abbildung zu 4.56

To Do 19 (Abbildung einfügen):

Abbildung 6.15: zweite Abbildung zu 4.56

$$\psi_{(r,\theta,\varphi)} = C_{nl} R_{nl(r)} P_{l(\cos\theta)}^{|m|} e^{i \widehat{m\varphi}}$$

$$\vec{\nabla} \tilde{\varphi}_{(\vec{r})} = \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta}$$

Fehler: Formel überprüfen

$$\vec{r} \times \vec{j}_p = m\hbar |\psi|^2 \frac{1}{\sin \theta} (\vec{e}_r \times \vec{e}_\varphi)$$

Dabei wurde verwendet:

$$\vec{r} = \vec{e}_r \cdot r \quad (6.85)$$

$$\vec{j}_p = m\hbar |\psi|^2 \frac{1}{r \sin \theta} e_\varphi \quad (6.86)$$

Weiterhin gilt:

$$\vec{e}_\theta = -\sin \theta \vec{e}_z + \cos \theta \vec{e}_{\perp z}$$

$$\vec{e}_{\perp z} \perp \vec{e}_z$$

\vec{e}_θ ist der Einheitsvektor in Richtung der Winkelvergrößerung.

Daher wird:

$$\vec{r} \times \vec{j}_p = m\hbar |\psi|^2 (\vec{e}_z - \cot \theta \cdot \vec{e}_{\perp z})$$

und weiter

$$\begin{aligned} \langle \vec{L} \rangle &= \int \vec{r} \times \vec{j}_p d^3r = m\hbar \vec{e}_z \int |\psi|^2 d^3r - \vec{e}_{\perp z} m\hbar \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty |\psi_{(r,\theta,\varphi)}|^2 r^2 dr \cot \theta \sin \theta d\theta dr \\ \langle \vec{L} \rangle &= \vec{e}_z m\hbar - m\hbar \vec{e}_{\perp z} \int \int \int |\psi|^2 r^2 dr \cos \theta d\theta d\varphi \\ \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty |\psi|^2 r^2 dr \cos \theta d\theta d\varphi &= 2\pi \int_0^\infty C_{nl}^2 R_{nl(r)} r^2 dr \cdot \underbrace{\int_0^\pi P_{l(\cos \theta)}^{|m|} {}^2 \cdot \cos \theta d\theta}_{= \int_{-1}^{+1} P_{l(x)}^{|m|} {}^2 \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} dx} \\ &= 0 \quad (\text{Symmetrie}) \end{aligned}$$

wegen

$$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{1}{\sin \theta} = \frac{1}{\sqrt{1-\cos^2 x}}$$

und

$$\begin{aligned} dx &= -d(\cos \theta) \\ &= \sin \theta d\theta \end{aligned}$$

als Integral über eine ungerade Funktion.

Es ergibt sich also:

$$\langle L_z \rangle = m\hbar \tag{6.87}$$

$$\langle L_{\perp z} \rangle = 0 \tag{6.88}$$

Man beachte

$$\vec{r} \times \vec{\nabla} = -\vec{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta}$$

und ferner:

$$-\vec{e}_\theta = \vec{e}_z \sin \theta - \vec{e}_{\perp z} \cos \theta$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned} [\vec{r} \times \vec{\nabla}]_z &= \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ [\vec{r} \times \vec{\nabla}]_{\perp z} &= -\cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{e}_{\perp z} + \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

Also ist

$$\mathbb{L}_z = \frac{\hbar}{i} [\vec{r} \times \vec{\nabla}]_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (6.89)$$

und daher wird

$$\mathbb{L}_z \psi_{nlm(r,\theta,\varphi)} = m\hbar \psi_{nlm(r,\theta,\varphi)}$$

Funktionen ψ_n des Typs

$$\mathbb{A} \psi_n = a_n \psi_n$$

befriedigen (und natürlich normierbar sein müssen) heißen „*Eigenfunktionen*“ des Operators \mathbb{A} . Die a_n werden als „*Eigenwerte*“ von \mathbb{A} bezeichnet. Ist \mathbb{A} HERMITETISCH, dann sind die a_n reell. Im Eigenzuständen verschwindet die quadratische Schwankung von \mathbb{A} :

$$\langle \mathbb{A}^2 \rangle - \langle \mathbb{A} \rangle^2 = \langle \Delta \mathbb{A}^2 \rangle = 0 \quad (6.90)$$

Man beachte:

$$\delta \mathbb{A} = \mathbb{A} - \langle \mathbb{A} \rangle \quad (6.91)$$

bzw.

$$\begin{aligned}\langle \delta A^2 \rangle &= \langle [A - \langle A \rangle]^2 \rangle \\ &= \langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle \\ &= \langle A^2 - 2\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2\end{aligned}$$

Formel überprüfen.

Beispiel:

$$\langle a \rangle = \int a \cdot \omega(a) da \quad (6.92)$$

Hier ist $a = \text{const.} = b$ und somit folgt:

$$\langle a \rangle = b \cdot \int \omega(a) da = b$$

Es gilt somit

$$A^2 \psi_n = a_n \psi$$

und

$$A^2 \psi_n = a_n^2 \psi$$

und somit:

$$\langle A \rangle = \int \psi_n^* A \psi_n d^3r = a_n^2 \cdot \underbrace{\int \psi_n^* \psi_n d^3r}_{=1} \quad (6.93)$$

Andererseits ist

$$\langle A \rangle = \int \psi_n^* A \psi_n d^3r = a_n \cdot \underbrace{\int \psi_n^* \psi_n d^3r}_{=1} \quad (6.94)$$

To Do 20 (Abbildung einfügen):

Abbildung 6.16: 13.12.95

d. h.

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= a_n \\ \langle \mathbb{A} \rangle &= a_n^2 = \langle \mathbb{A}^2 \rangle\end{aligned}$$

Man berechne jetzt das magnetische Moment in einem Zustand $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$, das durch die zugehörige Stromdichte

$$J_e = \frac{l}{m_0} \cdot \vec{j}_p$$

erzeugt wird.

Man berechne dazu den Teilstrom, der in einem Kreisring endlichen Querschnitts (Torus) dF um die z -Achse (*Quantisierungsachse*) fließt.

Die Fläche, die der Torus dabei umschließt sei F_z .

Der durch das Flächenelement fließende Strom ist gegeben durch:

$$\begin{aligned}dI &= \vec{e}_\varphi \cdot \vec{j}_p(r, \theta, \varphi) \cdot dF \frac{e}{m_0} \\ dJ &= \frac{e}{m_0} m \hbar \frac{1}{r \cdot \sin \theta} \cdot |\psi_{nlm}|^2 dF\end{aligned}\tag{6.95}$$

dabei ist $j_p \cdot \frac{\Omega}{m}$ die Ladungsstromdichte.

Das von dJ erzeugte magnetische Moment ist gegeben durch

$$dM = F_z \cdot dJ$$

Als wird:

$$dM = m \cdot \frac{e \cdot \hbar}{2m_0} \cdot 2\pi r \cdot |\psi_{nlm}|^2 \sin \theta \cdot d\theta dr \quad (6.96)$$

Das magnetische Gesamtmoment wird demnach

$$\begin{aligned} \int dM = \langle M \rangle &= m\mu_b 2\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\psi_{nlm}|^2 r^2 dr \sin \theta \cdot d\theta \\ &= m\mu_b 2\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\psi_{nlm}|^2 r^2 dr \sin \theta \cdot d\theta \\ &= m\mu_b 2\pi \underbrace{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty |\psi_{nlm}|^2 r^2 dr \sin \theta \cdot d\theta d\varphi}_{=1} \\ &= m\mu_b 2\pi \end{aligned}$$

Achtung Fehler in obiger Formel!

Dabei wurde die Konstante

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0} \quad (6.97)$$

eingeführt. Sie wird auch als Bohrsches Magenton bezeichnet. Man erhält demnach

$$\langle M \rangle = m \cdot \mu_B \quad (6.98)$$

Da \vec{j}_e nun senkrecht zur z -Achse fließt, verschwinden die Komponenten von \vec{M} senkrecht zur z -Achse.

$$\langle M_z \rangle = m \cdot \mu_B \quad (6.99)$$

$$\langle M_{\perp z} \rangle = 0 \quad (6.100)$$

Diese Beziehung gilt so für jedes **zentralsymmetrisches Potential**.

Aus dem Vergleich von 6.99 mit 6.87 folgt:

$$\langle M_z \rangle = \frac{e}{2m_0} \cdot \langle \mathbb{L}_z \rangle \quad (6.101)$$

Zu diesem Ergebnis gelangt man auch in der klassischen Mechanik für die zeitlichen Mittelwerte von L_z und M_z .

Dies folgt aus:

$$\vec{M} = \vec{j} \cdot \vec{F} = e \frac{v}{L} F \quad (6.102)$$

L : Kreisumfang / Bahnumfang der Teilchen der Ladung e
 $\frac{v}{L} = \frac{1}{T}$: T ist die Umlaufzeit

und

$$L_z = m_0 (\vec{r} \times \vec{v})_z = 2m_0 \frac{dF}{dt} \quad (6.103)$$

(Flächensatz)

Somit folgt

$$\bar{L}_z = \frac{1}{T} \int_0^T L_z \cdot dt = \frac{2m_0}{T} \int_0^T \frac{df}{dt} dt \quad (6.104)$$

d. h. wegen

$$\bar{v} = v = \frac{L}{T} \rightarrow \frac{1}{T} = \frac{v}{L}$$

Achtung: Drehimpuls L bold setzen.

$$\frac{e}{2m_0} \bar{L}_z = e \frac{v}{L} F = \bar{M}_z$$

und somit:

$$\bar{M} = \frac{e}{2m_0} \bar{L}_z \quad (6.105)$$

Dieser quantenmechanisch wie klassisch bestehende Zusammenhang zwischen der z -Komponente des Bahndrehimpulses eines geladenen, umlaufenden Teilchens und der z -Komponente der erzeugten magnetischen Momenteb heißt *magnetomechanischer Parallelismus*.

Diskussion allgemeiner Eigenschaften in WKB-Näherung

WKB-Näherung

Im folgenden werden allgemeine Eigenschaften von $R_e(r)$ und $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ in der WKB-Näherung erläutert.⁶

Man betrachte den Radialanteil (siehe Gl. 6.50) der Schrödinger-Gleichung für den Fall eines zentraalsymmetrischen Potentials

$$\mathbf{R}_{(r)}'' + \frac{2}{r} \mathbf{R}_{(r)}' + \left[\epsilon - U_{(r)} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \cdot \mathbf{R}_{(r)} = 0$$

Man führt hier anstelle $\mathbf{R}_{(r)}$ ein:

$$\hat{\mathbf{R}}_{(r)} = r \cdot \mathbf{R}_{(r)}$$

Dann ergibt sich für $\hat{\mathbf{R}}_{(r)}$

$$\left[\frac{d}{dr^2} - \epsilon - \tilde{U}_{(r)} \right] \cdot \hat{\mathbf{R}}_{(r)} = 0 \quad (6.106)$$

mit

$$\tilde{U}_{(r)} + \underbrace{\frac{l(l+1)}{r^2}}_{\text{„Zentrifugalpotential“}}$$

Zur Bezeichnungsweise „Zentrifugalpotential“ :

Es ist:

$$\frac{i}{\hbar} \cdot (\vec{r} \times \vec{\mathbb{P}}) = \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (6.107)$$

Daraus folgt:

⁶WKB-Näherung: Wentzel-Kramer-Brillion-Näherung

$$\frac{i}{\hbar} \cdot (\vec{r} \times \vec{P}) = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (6.108)$$

Diese Beziehung kann man in der folgenden Form schreiben:

$$\mathbb{L}^2 = \hbar \left[\frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (6.109)$$

Wegen Gl. ?? gilt also:

$$\frac{1}{\hbar^2} (\vec{r} \times \vec{P})^2 \mathbf{Y}_{lm(\theta,\varphi)} = l(l+1) \cdot \mathbf{Y}_{lm(\theta,\varphi)} \quad (6.110)$$

d. h.

$$\mathbb{L}^2 \psi_{nlm}(\vec{r}) = \hbar^2 \cdot l(l+1) \cdot \psi_{nlm}(\vec{r}) \quad (6.111)$$

Die Eigenwerte des Operators \mathbb{L}^2 sind also: $l \cdot (l+1)$.

Der Drehimpuls ist $\hbar \cdot m$.

Anmerkung: Bei einem mathematischen Pendel gibt es keinen Impuls über das zeitliche Mittel, aber $p^2 < 0$.

Daraus folgt:

$$\langle \mathbb{L}^2 \rangle = \hbar \cdot l(l+1) \quad (6.112)$$

Die mittlere Rotationsenergie des Teilchens im Potential $U_{(r)}$ ist somit gegeben durch:

$$E_{rot} = \frac{\langle \mathbb{L}^2 \rangle}{2 \cdot \langle \Theta \rangle} = \frac{\hbar \cdot l(l+1)}{2m_0 \cdot \langle r^3 \rangle} \quad (6.113)$$

Dabei ist $\langle \Theta \rangle$ der Erwartungswert des Drehmoments.

Demnach ist $l(l+1)$ ein Maß für die Rotationsenergie, die für $l = 0$ verschwindet. In diesem Fall ist dann auch die auf das Teilchen wirkende Zentrifugalkraft gleich Null.

Man behandelt jetzt die Differentialgleichung **6.106** und schreibt sie in eine genäherte Form um:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \kappa_{(r)}^2 \right] \cdot \hat{R}_{(r)} \approx \underbrace{\left(\frac{d}{dr} + i\kappa_{(r)} \right) \cdot \left(\frac{d}{dr} - i\kappa_{(r)} \right)}_{= \frac{d^2}{dr^2} + \kappa \cdot \left(1 - \frac{i}{\kappa_{(r)}^2} \cdot \frac{d\kappa_{(r)}}{dr} \right)} \cdot \hat{R}_{(r)} = 0 \quad (6.114)$$

mit

$$\kappa_{(r)} = \sqrt{\epsilon - \tilde{U}_{(r)}}$$

Die Zerlegung des Operators

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \kappa_{(r)}^2 \right]$$

in

$$\frac{d^2}{dr^2} + \kappa \cdot \left(1 - \frac{i}{\kappa_{(r)}^2} \cdot \frac{d\kappa_{(r)}}{dr} \right)$$

ist näherungsweise zulässig, wenn

To Do 21 (Formel überprüfen):

$$\frac{1}{\kappa_{(r)}^2} \cdot \left| \frac{d\kappa_{(r)}}{dr} \right| \leq 1 \quad (6.115)$$

Ist diese Voraussetzung erfüllt, dann sind die Lösungen Vorlesung

$$\left[\frac{d}{dr} \pm i\kappa_{(r)} \right] \cdot \hat{R}_{(r)} = 0$$

auch Lösungen der ursprünglichen Differentialgleichung(**6.106**).

Man erhält dann

$$\mp i\kappa_{(r)} = \frac{1}{\hat{R}_{(r)}} \cdot \frac{d\hat{R}_{(r)}}{dr} \\ = \frac{d}{dr} \ln \hat{R}_{(r)}$$

$$\ln \left(\frac{\hat{R}_{(r)}}{\hat{R}_{(r_0)}} \right) = \mp \int_{r_0}^r \kappa_{(r')} \cdot dr'$$

Durch Antilogarithmieren ergibt sich:

$$\hat{R}_{(r)} = \hat{R}_{(r_0)} = e^{\mp \int_{r_0}^r \kappa_{(r')} \cdot dr'} \quad (6.116)$$

Diese Lösung steht mit der Erhaltung der (Gesamt)-Wahrscheinlichkeit

$$\int_0^1 \hat{R}_{(r)} \cdot dr = 1$$

im Konflikt. Dies sieht man auf folgende Weise ein:

Man betrachte Gl. 6.106 als Schrödinger-Gleichung eines eindimensionalen Problems:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dr^2} + E - \tilde{U}_{(r)} \right] \cdot \hat{R}_{(r)} = 0$$

7

Aus dieser Differentialgleichung lässt sich auf die übliche Weise eine Kontinuitätsgleichung herleiten:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \rho}_{=0 \text{ für zeitunabhängige Zustände}} + \frac{\partial}{\partial r} j = 0$$

Für eine eindimensionale Bewegung ergibt sich als Stromdichte:

⁷Hier benannte Einheiten.

$$j = \frac{1}{2i} \left(\hat{\mathbf{R}}_{(r)}^* \cdot \frac{d}{dr} \hat{\mathbf{R}} - \hat{\mathbf{R}} \frac{d}{dr} \hat{\mathbf{R}}^* \right) = \mp (\hat{\mathbf{R}}_0)^2 \cdot \kappa_{(r)}$$

Da

$$\hat{\mathbf{R}}_0 \approx \frac{1}{\sqrt{\kappa_{(r)}}}$$

wird die Ableitung Null, wie zu erwarten ist \rightarrow darf hier konstant sein.

$$\tilde{U}_{(r)} = 0 \rightarrow \kappa = \sqrt{e}$$

$$\epsilon = \kappa^2$$

$$E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_0}$$

$$\hat{\mathbf{R}}_{(r)} = \hat{\mathbf{R}}_0 \cdot e^{\pm i \kappa r}$$

oder als Stromdichte

$$j = \frac{1}{2i} \left(\hat{\mathbf{R}}^* \frac{d}{dr} \hat{\mathbf{R}} - \hat{\mathbf{R}} \frac{d}{dr} \hat{\mathbf{R}}^* \right) \stackrel{6.116}{=} \mp (\hat{\mathbf{R}}_o)^2 \kappa_{(r)}$$

Danach wäre

$$\frac{dj}{dr} = 0$$

To Do 22 (Abbildung einfügen): Hier fehlt eine Abbildung.

Randbemerkung : Herkömmlich:

$$\langle p \rangle = \int \psi^* \vec{P} \psi \, d\tau^3$$

Hier:

$$\langle p \rangle = \int \vec{j}_{p(r)} \cdot d\tau^3$$

mit

$$\begin{aligned} \vec{j}_p &= |\phi| \vec{\nabla} \phi_{(r)} \\ &= \frac{1}{2} \cdot \left| \psi^* \underbrace{\vec{P}}_{=i\hbar\vec{\nabla}} \psi + \psi \vec{P} \psi^* \right| \end{aligned}$$

Hier fällt der imaginäre Anteil des Integrals fort, wenn periodische Randbedingungen gegeben sind.

Ebene Welle:

$$\vec{j} = \frac{1}{r} \cdot \hbar \vec{k}$$

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = C_{nl} \cdot \mathbf{R}_l(\epsilon_{nl}(r)) \cdot \mathbf{Y}_{lm}(\theta, \phi)$$

$$\underbrace{n_{\theta, \text{phi}}}_{\text{Anzahl der Knoten in } \theta \text{ und } \phi} = n_\theta + n_\phi = l$$

$$E_{\text{rot}} = \frac{\langle \mathbb{L}^2 \rangle}{2\Theta} = \frac{\hbar^2 \cdot l(l+1)}{2\Theta} \quad (6.117)$$

Hieraus ergeben sich folgende Konsequenzen:

- Wenige Knoten bedeuten geringe Energie.
- Die Energie kann auf θ und ψ verteilt werden.
- $l = 0$ bedeutet keine Rotationsenergie.

To Do 23 (Abbildung einfügen): Hier fehlt eine Abbildung.

Kommentar: Dass bei $l = 0$ keine Rotationsenergie vorhanden ist, ist eine direkte Konsequenz der Vakuumfluktuationen.

Beispiel: Gasmoleküle in der Atmosphäre.

Beispiel: Bei einem Übergang von 3s \rightarrow 3p. Hier wird die Energie in Rotationsenergie gesteckt.

Zur Anzahl der radialen Knoten: Der Oszillatatorische Anteil der Radialfunktion wird durch das LAGURRE-Polynom bestimmt. Dies ist ein Polynom $(n - l - 1)$ tem Grades und hat $n - l - 1$ Nullstellen. Diesen Nullstellen entsprechen konzentrische Knotenkugeln um $\vec{r} = 0$. Ihre Anzahl ist also:

$$n_r = n - l - 1$$

$$n_\theta + n_\phi = l$$

Für mindestens zufällig entartete Zustände zu verschiedenen l gilt:

$$n = n_r + l + 1 = \text{const.}$$

Demnach ist die Gesamtknotenzahl aller n^2 -Zustände, die miteinander entartet sind, d. h. zur gleichen Energie $\epsilon = \frac{1}{n^2}$ gehören:

$$n_{r\theta\phi} = n_r + n_\theta + n_\phi = n - 1 = \text{const.}$$

Eigenzustände und klassische Bahnen

Eigenzustände

In diesem Abschnitt wird zur Erläuterung des Zusammenhangs zwischen $\psi_{nlm(r,\theta,\phi)}$ und den klassischen Bahnen zur gleichen Energie $\epsilon = -\frac{1}{n^2}$ der Spezialfall $n_r = 0$ und $m = l \gg 1$, ($n = m + 1$) diskutiert.

Nach 6.119 haben diese Zustände die folgende Form:

$$\psi_{m+1,m,m(r,\theta,\phi)} = \mathbf{B}_m \xi^m e^{-\xi} (\sin \theta)^m e^{im\phi}$$

mit

$$\xi = \frac{r}{n} = \frac{r}{m+1} \quad (6.118)$$

\mathbf{B} ist so zu wählen, dass

$$\int |\psi_{r,\theta,\phi}|^2 \cdot d^3r = 1$$

Das Quadrat des Radialanteils, d. h. die Funktion

$$\mathbf{R}_{m(\xi)}^2 = \mathbf{B}_m^2 \xi^{2m} \cdot e^{-2\xi}$$

hat ein Maximum an der Stelle ξ_m , definiert durch

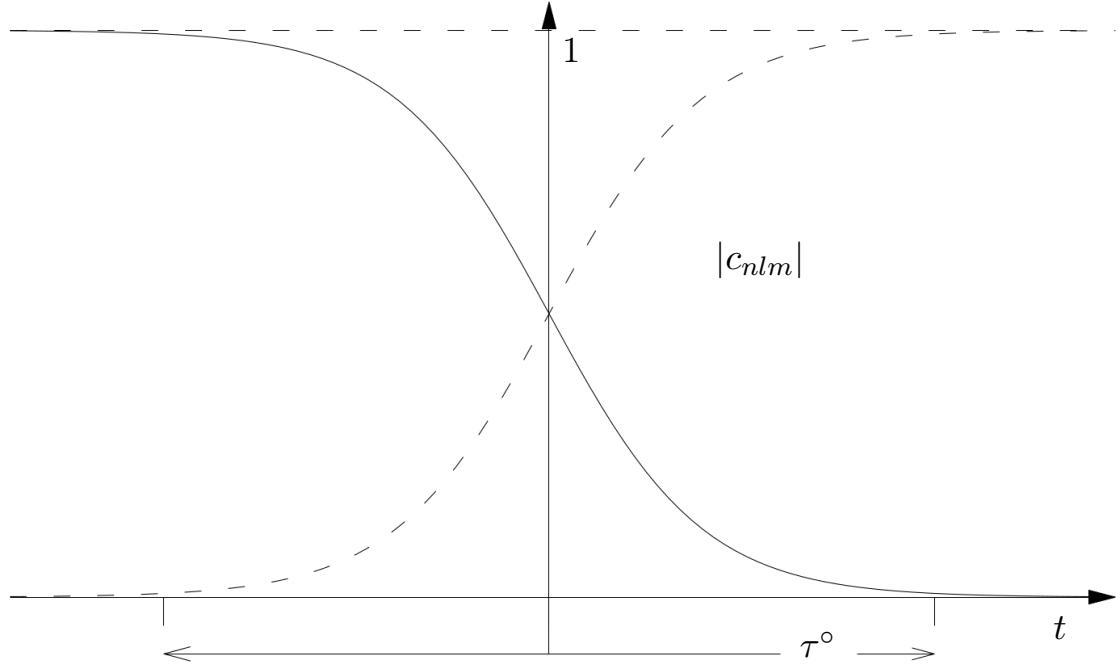
$$\frac{d}{d\xi} \mathbf{R}_{m(\xi)}^2 = \mathbf{B}_m^2 \cdot \left(\frac{2m}{\xi} - 2 \right) \cdot \xi^{2m} e^{-2\xi} = 0$$

Also ist $\xi_m = m$, da die restliche Gleichung monoton fallend ist.

Setzt man nun aus „Schönheitsgründen“

$$\mathbf{B}_m^2 = \frac{e^{2m}}{m^{2m}}$$

anstelle des aus $\int |\psi|^2 \cdot dr^3 = 1$ folgenden Wertes, so ergibt sich als Verlauf von $\mathbf{R}_{m(\xi)}^2$ für $m = 10$ bzw. $m = 40$ die in ?? dargestellte Funktion.



Die beiden Kurven sind für so große m praktisch kongruent. Man ersetze $\mathbf{R}_{m(\xi)}$ durch ein TAYLOR-Polynom zweiten Grades und beachte:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} \cdot \frac{d^2}{d\xi^2} \mathbf{R}_{(m(\xi))} \Big|_{\xi_m} &= \mathbf{B}_m^2 \cdot \left(\frac{d}{d\xi} \left(\frac{m}{\xi} - 1 \right) \cdot \xi^{2m} e^{-2\xi} \right) \Big|_{\xi_m} \\
 &= -\mathbf{B}_m^2 \frac{m}{\xi} \xi^{2m} e^{-2\xi} \Big|_{\xi_m} \\
 &= -\frac{1}{m}
 \end{aligned}$$

Hieraus folgt

$$\frac{1}{\mathbf{B}_m^2} \cdot \mathbf{R}_{m(\xi)}^2 = 1 - \frac{1}{m} (\xi - xi_m)^2$$

Hier fällt die erste Ableitung aufgrund des Minimums heraus.

Die Halbertsbreite δ_m dieser Kurve ist gegeben durch:

To Do 24 (Hier Abbildung einfügen.):

$$\frac{1}{\mathbf{B}_m^2} \cdot \mathbf{R}_{(\xi_m \pm \delta_{m/2})}^2 = \frac{1}{2}$$

bzw.

$$1 - \frac{1}{m} \cdot \frac{\delta_m^2}{4} = \frac{1}{2}$$

$$\delta_m = \sqrt{2m} \quad (6.119)$$

oder

$$\frac{\delta_m}{\xi_m} = \sqrt{\frac{2}{m}} \quad (6.120)$$

Die relative Halbwertsbreite nimmt also mit wachsendem m wie $m^{-\frac{3}{2}}$ ab. Der Radius maximaler Aufenthaltswahrscheinlichkeit ergibt sich zu

$$\hat{r}_m = r_m a_0 = (m+1) \xi_m a_0 = m(m+1) a_0 \quad (6.121)$$

Analog zu $\mathbf{R}_{m(\xi)}^2$ verhält sich der Winkelanteil von $\psi_{(r,\theta,\phi)}$ (siehe Abb. ??).

Das entsprechende **Taylor-Polynom** zweiten Grades lautet hier:

$$\sin^{2m} \theta = 1 - m \cdot \left(\theta - \frac{\pi}{2} \right)^2$$

Daraus ergibt sich die Halbwertsbreite $\delta_m^{(\theta)}$ zu:

$$\delta_m^{(\theta)} = \frac{1}{\sqrt{2m}}$$

Demnach zieht sich die **Aufenthaltswahrscheinlichkeit** mit wachsendem m immer schärfer auf einen äquatorialen Kreis vom Radius \hat{r}_m zusammen.

Andererseits gehört zu einer kreisförmigen KEPPLER-Bahn vom Radius \hat{r}_m die Gesamtenergie:

⁸

$$E = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0\hat{r}_m} \quad (6.122)$$

Anmerkung :

$$\begin{aligned} 2 \langle T \rangle &= -\langle v \rangle \\ \langle v \rangle + \langle T \rangle &= \frac{1}{2} \langle v \rangle = E \end{aligned}$$

(daher die 8)

was sich mit ??

$$\begin{aligned} 1 \text{Ryd} &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \cdot \frac{1}{a_0} \\ &\stackrel{??}{=} \frac{\hbar^2}{2m_0} \cdot \frac{1}{a_0} \cdot \frac{e^2 m_0}{\hbar^2 4\pi\epsilon_0} \\ &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} \end{aligned}$$

in folgender Form schreiben lässt:

$$E = -1 \text{Ryd} \cdot \frac{a_0}{\hat{r}_m} \quad (6.123)$$

Setzt man diese Energie gleich der des Zustandes $\psi_{m+1,m,m(r,\theta,\phi)}$

$$E_{m+1} = -\frac{1}{(m+1)^2} \cdot 1 \text{Ryd}$$

so ergibt sich für den Radius der klassischen **Keplerbahn** für diese Energie:

$$\hat{r}_m^{klassisch} = (m+1)^2 a_0 \stackrel{m \gg 1}{\approx} m(m+1)a_0 \quad (6.124)$$

der also für $m \gg 1$ mit dem Radius der Mittellinie des *Fokussierungsschlauches* überbestimmt.

⁸Achtung bei der Unterscheidung zwischen der **Eulerschen Zahl** e und der **Elementarladung** e

Hier Abbildung einfügen.

Anmerkung 20:

Der Grundzustand ist ein rein quantenmechanischer Zustand und deshalb knotenlos.

Die Orthogonalität von Eigenzuständen

Man betrachte ein Einteilchensystem, beschrieben durch die **Schrödinger-Gleichung**

$$\mathbb{H}\psi_{(\vec{r})} = E\psi_{(\vec{r})}$$

mit

$$\mathbb{H} = -\frac{1}{2}\vec{\nabla}^2 + \mathbf{U}_{(\vec{r})}$$

Zur Vereinfachung kann man annehmen, dass $\mathbf{U}_{(\vec{r})}$ keinerlei Symmetrie besitzen soll. Bei Systemen, z. B. mit Zentralsymmetrie, kann man für die folgenden Überlegungen annehmen, dass man durch Einschalten einer sehr schwachen unsymmetrischen Störung die ursprüngliche Zentralsymmetrie aufhebt („bricken“). Man betrachte nun zwei Eigenzustände $\psi_{n'}$ und ψ_n , deren Energien wegen der gemachten Voraussetzungen jedenfalls voneinander verschieden sind:

$$E_{n'} \neq E_n$$

Anmerkung 21:

Zufällige Entartung bei $1/r$. Die Entartung ist immer mit einer Symmetrie bedingt.

Dann gilt

Dann gilt

$$\begin{aligned}\mathbb{H}\psi_n &= E_n\psi_n \\ \mathbb{H}\psi_{n'} &= E_{n'}\psi_{n'}\end{aligned}$$

bzw.

$$\mathbb{H}P\psi_{n'}^* = E_{n'}\psi_{n'}^*$$

Hieraus folgt

$$\int \psi_{n'}^* \mathbb{H} \psi_n d^3r - \int \psi_n \mathbb{H} \psi_{n'}^* d^3r = (E_n - E_{n'}) \cdot \int \psi_{n'}^* \psi_n d^3r$$

Nun ist

$$\begin{aligned} \int \psi_{n'}^* \mathbb{H} \psi_n d^3r &= \underbrace{-\frac{1}{2} \int \psi_{n'}^* \Delta \psi_n d^3r}_{\substack{\text{(Greenscher Satz)} \\ = \int \psi_n \Delta \psi_{n'}^* d^2r}} + \underbrace{\int \psi_{n'}^* \mathbf{U}(\vec{r}) \psi_{n'}^* d^3r}_{\int \psi_n \mathbf{U}(\vec{r}) \psi_n^* d^3r} \\ &= \int \psi \mathbb{H} \psi_{(n')}^* d^3r \end{aligned}$$

Dies resultiert aus der Hermitizität des Operators. Also verschwindet die linke Seite in der obigen Gleichung:

$$(E_n - E_{n'}) \cdot \int \psi_{(\vec{r})}^* \psi_{(\vec{r})} d^3r = 0$$

für $n' \neq n$. Wegen der getroffenen Voraussetzungen gilt also:

$$\int \psi_{n'(\vec{r})}^* \psi_{n(\vec{r})} d^3r = 0$$

für $n' \neq n$.

Diese Gleichung fasst man üblicherweise mit der Normierungsbedingung für die Eigenzustände zusammen in der Form:

$$\int \psi_{n'(\vec{r})}^* \psi_{n(\vec{r})} d^3r = \delta_{nn'} \quad (6.125)$$

To Do 25 (Formel einrahmen.):

Man sagt, die Funktionen $\psi_{n'(\vec{r})}$ und $\psi_{n(\vec{r})}$ (für $n' \neq n$) sind zueinander *orthogonal*.

Beachte:

Bei Vektoren gilt:

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_{\nu=1}^3 a_\nu \cdot b_\nu = 0$$

wenn \vec{a} und \vec{b} zueinander orthogonal sind.

Es stellt sich heraus, dass zu gleichem **Hamiltonoperator** im allgemeinen ein abzählbar unendlicher Satz von Eigenfunktionen existiert, der *vollständig* ist in dem Sinne, dass sich jede *nicht-pathologische* Funktion $F(\vec{r})$ in Fourierscher Weise nach folgenden Faktoren entwickeln lässt:

$$\int \left| F(\vec{r}) - \sum_{n=1}^{n_{max}} c_n \cdot \psi_n(\vec{r}) \right|^2 \cdot d^r r = \epsilon_{n_{max}}$$

mit der Eigenschaft: $\epsilon_{n_{max}} \rightarrow 0$, wenn $n_{max} \rightarrow \infty$ gegen Unendlich strebt.

Es gilt als:

$$F(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(\vec{r})$$

To Do 26 (Formel einrahmen.):

Die Koeffizienten c_n bestimmen sich auf folgende Weise:

$$F(\vec{r}) \psi_{n'(\vec{r})} d^3 r = \sum_{n=1}^{n_{max}} c_n \underbrace{\int \psi_{n'(\vec{r})}^* \psi_n(\vec{r}) d^3 r}_{\delta_{n'n}}$$

To Do 27 (Text überprüfen.): Prinzip der endgültigen Koeffizienten bei Entwicklung der Orthogonalitäten

$$\Rightarrow c_n = \int F(\vec{r}) \psi_{n'(\vec{r})}^* d^3 r$$

Diese Entwicklung von Funktionen $F(\vec{r})$ nach vollständigen orthonormierten Funktionssätzen $\{\psi_n(\vec{r})\}$ liefert ein Verfahren endgültiger Koeffizientenbestimmung. Schon bestimmte Koeffizienten werden durch die Bestimmung weiterer Koeffizienten nicht mehr verändert.

Die Serienspektren des Wasserstoffatoms

Man betrachte ein einzelnes Wasserstoffatom in einem angeregten Zustand $\psi_{n'l'm'}$ zu Energie $E_{n'}$ mit $n' > 1$. Ein Übergang in eine Zustand niedrigerer Energie ist nur möglich, wenn es die Energie in ein anderes System abgeben kann. Bei einem einzelnen H-Atom kommt als Partnersystem nur das Vakuum infrage, das von einem Teilchen endlicher Masse m_0 und endlicher Ladung seine Energie nur in Form elektromagnetischer Strahlung aufnehmen kann⁹

Die Frage, die sich hier stellt, ist welcher Mechanismus den Übergang $E_{n'} \rightarrow E_n$ bewirkt.

Grundsätzlich erfolgen alle Anregungen primär aus dem Grundzustand und zwar innerhalb einer endlichen Zeitspanne.

Als Konsequenz hieraus ergeben sich stationäre Zustände:

$$\psi_{nml}(\vec{r},t) = \hat{\psi}_{nml}(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

Stationäre Zustände können bei solchen Anregungen nicht sauber parapariert werden. Der in Wirklichkeit auftretende (präparierte) Zustand $\psi_{(\vec{r},t)}$ lässt sich aber stets in der folgenden Form entwickeln:

$$\psi_{(\vec{r},t)} = \sum_{n,l,m} c_{nlm} \hat{\psi}_{nml}(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (6.126)$$

Dabei nutzt man aus, dass die Eigenfunktionen $\hat{\psi}_{nml}(\vec{r})$ im Allgemeinen ein vollständiges Orthogonalsystem bilden.

Man beachte:

$$\mathbb{H}\hat{\psi}_{(\vec{r},t)} = \sum_{nlm} c_{nlm} \underbrace{\left[\mathbb{H}\hat{\psi}_{nml}(\vec{r}) \right]}_{E_n \hat{\psi}_{nml}(\vec{r})} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

Andererseit gilt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{(\vec{r},t)} = \sum_{nlm} c_{nlm} E_n \hat{\psi}_{nml}(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

Die Koeffizienten c_{nlm} in Gl. 6.126 erhält man in „Fourierscher Weise“. Multipliziert man auf beiden Seiten mit $\hat{\psi}_{n'l'm'(\vec{r})}^*$ und integriert man über den Definitionsbereich der Eigenlösungen, so erhält man:

⁹Gravitationsstrahlung ist hier ein vernachlässigbares Phänomen.

To Do 28 (Formel falsch.): Achtung Formel falsch

$$c_{nlm} = \int \hat{\psi}_{nlm}^*(\vec{r}) \psi_{nlm}(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} d^3 r$$

Da die Koeffizienten c_{nlm} nicht von der Zeit abhängen, darf in dieser Beziehung $t = 0$ gesetzt werden. Nimmt man der Einfachheit halber an, dass in der Summe ?? nur zwei, wesentlich von Null verschiedene Koeffizienten auftreten ($c_{n'l'm'}$ und c_{nlm}), so ergibt sich:

$$\psi_{(\vec{r},t)} = c_{n'l'm'} \cdot \hat{\psi}_{n'l'm'}(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n'} t} + c_{nlm} \cdot \hat{\psi}_{nlm}(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (6.127)$$

Man kann nun der Frage nachgehen, ob in einem solchen „unreinen“ Zustand des Elektrons ein zeitabhängiges **Dipolmoment** auftritt, das nach dem Axiom ?? zu einer Strahlungsemission führt. Ist das der Fall, dann müsste die Energie des Elektrons sukzessiv abgeben, bis es den Zustand geringerer Energie exakt eingestellt hat. Der **Erwartungswert** der Energie im Zustand 6.138 ist gegeben durch:

$$\langle \mathbb{H} \rangle = E = |c_{n'l'm'}|^2 E_{n'} + |c_{nlm}|^2 E_n$$

aus $\int \psi_{(\vec{r},t)}^* \mathbb{H} \psi_{(\vec{r},t)} d^3 r \dots$ ¹⁰

oder wegen

$$\int |\psi_{(\vec{r},t)}|^2 d^3 r = |c_{n'l'm'}|^2 + |c_{nlm}|^2 = 1 \quad (6.128)$$

$$E = E_{n'} - (E_{n'} - E_n) \cdot |c_{nlm}|^2$$

Eine Energieabnahme im **Wasserstoffatom** ist somit nur möglich, wenn

$$\begin{aligned} c_{n'l'm'} &= c_{nlm}(t) \\ c_{nlm} &= c_{nlm}(t) \end{aligned}$$

Man kann jetzt zeigen, dass im Zustand 6.138 tatsächlich ein oszillierendes Dipolmoment auftritt, also Strahlung emittiert wird. Das entstehende Strahlungsfeld wird durch die Felder $\vec{A}_{(\vec{r},t)}$ und

¹⁰Jede beliebige Energie zwischen $E_{n'}$ und E_n ist beim Übergang realisierbar, die Natur macht keine Sprünge.

$\varphi_{(\vec{r},t)}$ beschrieben (siehe folgender Abschnitt ??). Diese wirken auf das Elektron zurück, so dass der **Hamiltonoperator** die folgende Form hat:

$$\mathbb{H}' = \frac{(\vec{\mathbb{P}} - e\vec{A}_{(\vec{r},t)})^2}{2m_0} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \varphi_{(\vec{r},t)}$$

Anmerkung: Die besondere Form in der $\vec{A}_{(\vec{r},t)}$ hier auftritt, wird in Kapitel ?? hergeleitet.

Der Zustand $\psi_{(\vec{r},t)}$ hat jetzt der modifizierten, zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung zu genügen:

$$\mathbb{H}'\psi_{(\vec{r},t)} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{(\vec{r},t)}$$

Es ist zu beachten, dass die Schrödinger-Gleichung jetzt eine *nichtlineare* partielle Differentialgleichung darstellt, da $\vec{A}_{(\vec{r},t)}$ und $\varphi_{(\vec{r},t)}$ von $\psi_{(\vec{r},t)}$ abhängen.

Wegen des Auftretens von $\vec{A}_{(\vec{r},t)}$ und $\varphi_{(\vec{r},t)}$ in \mathbb{H}' sind $\hat{\psi}'_{n'l'm'(\vec{r})} e^{-\frac{i}{m}E_n t}$ und $\hat{\psi}_{nlm(\vec{r})} e^{-\frac{i}{m}E_n t}$ nicht mehr einzelne Lösungen der **Schrödinger-Gleichung**, sondern nur noch in der **Linearkombination** mit *zeitabhängigen* Koeffizienten.

Da die Strahlungsemision mit einer sukzessiven Energieabnahme des **Wasserstoffatoms** verbunden ist, bietet sich als physikalischer Ansatz für die Zeitabhängigkeit der Koeffizienten an:

$$\begin{aligned} |c_{n'l'm'(t)}|^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \tanh \left(2 \cdot \frac{t}{\tau} \right) \right) \\ |c_{nlm(t)}|^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(2 \cdot \frac{t}{\tau} \right) \right) \end{aligned}$$

Dieser Ansatz garantiert die Gültigkeit von **6.128**:

$$|c_{n'l'm'(t)}|^2 + |c_{nlm(t)}|^2 = 1$$

To Do 29 (Abbildung einfügen.):

Außerdem gewährleistet der Ansatz

$$\begin{aligned} c_{n'l'm'(t)} &= \begin{cases} \approx 1 & \text{für } t \ll -\tau/2 \\ = 0 & \text{für } t \gg +\tau/2 \end{cases} \\ c_{nlm(t)} &= \begin{cases} \approx 1 & \text{für } t \gg -\tau/2 \\ = 0 & \text{für } t \ll +\tau/2 \end{cases} \end{aligned}$$

Man bilde zunächst:

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r},t) &= w(\vec{r},t) \\ &= \psi_{(\vec{r},t)}^* \psi_{(\vec{r},t)} \\ &= |c_{n'l'm'(t)}|^2 \cdot |\hat{\psi}_{n'l'm'(\vec{r},t)}|^2 + |c_{nlm(t)}|^2 \cdot |\hat{\psi}_{nlm(\vec{r},t)}|^2 \\ &\quad + 2 \cdot |c_{n'l'm'(t)}^* c_{nlm(\vec{r})}| \cdot |\hat{\psi}_{n'l'm'(\vec{r})} \hat{\psi}_{nlm(\vec{r})}^*| \cdot \cos(\varphi \Delta_m + wt) \end{aligned}$$

To Do 30 (Formel unvollständig.):

mit

$$\begin{aligned} w_{nn'} &= \frac{1}{\hbar} \cdot (E_{n'} - E_n) \\ \Delta m &= m' - m \\ \alpha &= \arg(c_{n'l'm'(t)} c_{nlm(t)} c) \end{aligned}$$

Anmerkung: $E_{n'} - E_n$ ist die BOHRsche Bedingung. Sie kommt hier heraus, ist aber keine Bedingung die hier vorausgesetzt wird.

Da der positive Kern des Wasserstoffatoms bei $r = 0$ liegt, folgt für das Dipolmoment im Zustand $\psi_{(\vec{r},t)}$:

$$\vec{P}_0 = \int e \vec{r} \rho_{(\vec{r},t)} d^3 r \quad (6.129)$$

To Do 31 (Formel überprüfeb.):

Hierbei ist

$$\begin{aligned}\vec{P}_0 &= \text{Dipolmoment} \\ \vec{r} &= \text{Verbindungsvektor Elektron-Proton}\end{aligned}$$

$$\vec{P}_0 = 2 \cdot \left| c_{n'l'm'(t)}^* c_{nlm(t)} \right| \cdot \vec{P}_{n'n} \cdot \cos(\varphi \Delta m - w_{n'n} t - \alpha)$$

mit

$$\vec{P}_{n'n} = \int \hat{\psi}_{n'l'm'(r)}^* \hat{\psi}_{nlm(r)} d^3 r \quad (6.130)$$

Dies ist das sog. *Dipolmatrixelement*. Jeder Zustand in einem zentraalsymmetrischen Potential hat ein Dipolmoment.

Der Zeitverlauf von $\left| c_{n'l'm'(t)}^* c_{nlm(t)} \right|$ hat die Form:

$$2 \left| c_{n'l'm'(t)}^* c_{nlm(t)} \right| = \frac{1}{\cosh \frac{2t}{\tau}}$$

To Do 32 (Abbildung einfügen.):

Man stellt somit fest, dass während der Übergangszeit τ ein **Dipolmoment** auftritt, das mit der Frequenz

$$\omega_{n'n} = \frac{1}{\hbar} \cdot (E_{n'} - E_n) \quad (6.131)$$

To Do 33 (Formel falsch.): w durch omega ersetzen

oszilliert und zwar in der z-Achse wenn $\Delta m = 0$.

Man beachte hierzu:

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

mit

$$\begin{aligned} x &= r \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi \\ y &= r \cdot \sin \theta \cdot \sin \varphi \\ z &= r \cdot \cos \theta \end{aligned}$$

$$\vec{P}_D = P_x \vec{e}_x \cdot P_y \vec{e}_y \cdot P_z \vec{e}_z$$

und weiterhin gilt $P_x = P_y = 0$ wenn $\Delta m = 0$, da

$$\int_0^{2\pi} \sin \varphi d\varphi = \int_0^{2\pi} \cos \varphi d\varphi = 0$$

To Do 34 (Anmerkung einfügen.):

wegen

$$\begin{aligned} P_x &= e \iiint x \cdot \rho(r) r^2 dr \cdot \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= e \int_0^{2\pi} \varphi \left[\int_0^\pi \int_0^\infty \underbrace{\rho(r,\theta)}_{\text{Axialsymmetrie}} r^3 dr \cdot \sin^2 \theta d\theta \right] d\varphi \\ P_y &= e \int_0^{2\pi} \sin \varphi [\dots] d\varphi \end{aligned}$$

Ist $\Delta m = \pm 1$, so stellt \vec{P}_D einen mit der Frequenz $\omega_{n'n}$ linksherum kreisenden Dipol dar. Demzufolge muss das emittierte Licht bezüglich der z-Achse linkszirkular polarisiert sein.

Für $\Delta m = -1$ ist es entsprechend rechtszirkular polarisiert.

$$\Delta m = \begin{cases} +1 & \text{linkszirkular polarisiert} & \text{keine Emission } \perp z \\ 0 & \text{linear polarisiert} & \text{keine Emission } \parallel z \\ -1 & \text{rechtszirkular polarisiert} & \text{keine Emission } \perp z \end{cases}$$

Die Intensität der Strahlung wird im Abschnitt **6.4.2** behandelt.

To Do 35 (Bearbeiten.): Das Dipolmoment entsteht auch durch Beimengungen.

Elektrische Dipolstrahlung

Dipolstrahlung

Aus der **Maxwellschen-Gleichung**

$$\dot{\vec{B}} = -\operatorname{rot} \vec{E}$$

folgt nach der Einführung des **Vektorpotentials A**:

$$\vec{B} = \operatorname{rot} \vec{A}$$

die Beziehung

$$\operatorname{rot} (\vec{E} + \dot{\vec{A}}) = 0$$

bzw.

$$\vec{E} + \dot{\vec{A}} - \vec{\nabla}\phi$$

Dies ergibt zusammen mit der 2. Maxwellschen-Gleichung:

$$\frac{1}{c^2} \dot{\vec{E}} \mu_0 \vec{j} = \operatorname{rot} \vec{B}$$

mit $c^2 = \frac{1}{\epsilon_0 \mu_0}$ führt dies auf die inhomogenen Wellengleichungen:

$$\Delta\phi - \frac{1}{c^2} \ddot{\phi} = -\frac{1}{\epsilon_0} \rho_{(\vec{r},t)}$$

$$\Delta\vec{a} - \frac{1}{c^2} \ddot{\vec{a}} = -\mu_0 \vec{j}_{(\vec{r},t)}$$

sofern gilt:

$$\operatorname{div} \vec{A} = \frac{1}{c^2} \dot{\phi} \quad (6.132)$$

Die Lösung von Gl. 6.4.2 hat die Form eines *retadierten Poisson-Integrals*.

$$\vec{A}_{(\vec{r},t)} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\vec{j}_{(\vec{r},t-\frac{|\vec{r}-\vec{r}'|}{c})}}{|\vec{r}' - \vec{r}|} d^3 r'$$

Für den ins Auge gefassten Anwendungsfall ist j nur innerhalb des Atomvolumens vom Durchmesser $\approx 10^{-8}\text{m}$ wesentlich von Null verschieden.

Man kann die abgestrahlte Energie in hinreichend großer Entfernung vom Atom zu berechnen. Dann gilt:

$$|\vec{r} - \vec{r}'| \approx |\vec{r}| = r$$

Also wird:

$$\vec{A}_{(\vec{r},t)} = \frac{\mu_0}{4\pi r} \cdot \int \vec{j}_{(\vec{r}',t-\frac{r}{c})} \dot{d}^2 r \quad (6.133)$$

Man kann nun nach HERTZ zur Vereinfachung folgende Abkürzung einführen:

$$\dot{\Pi} = \frac{1}{\mu_0} \vec{A}_{(\vec{r},t)}$$

und

$$\vec{j}_{(t-\frac{r}{c})} = \int \vec{j}_{(\vec{r}',t-\frac{r}{c})} d^3 r' \quad (6.134)$$

Damit geht Gl. 6.133 über in

$$4\pi \cdot \dot{\vec{\Pi}} = \frac{1}{r} \vec{J}_{(t-\frac{r}{c})} \quad (6.135)$$

und Gl. 6.132 nimmt die folgende Form an:

$$\epsilon_0 \dot{\phi} = -\operatorname{div} \dot{\vec{\Pi}}$$

Also wird

$$\begin{aligned} \vec{H} &= \frac{1}{\mu_0} \vec{B} = \operatorname{rot} \dot{\vec{\Pi}} \\ D &= \operatorname{grad} \operatorname{div} \dot{\vec{\Pi}} - \frac{1}{c^2} \ddot{\vec{\Pi}} \end{aligned}$$

Da \vec{j} symmetrisch in t und $\frac{r}{c}$ ist, gilt:

$$\frac{\partial}{\partial r} \vec{j} = -\frac{1}{c} \dot{\vec{j}}$$

Setzt man jetzt in die Gleichung für \vec{D} , $\vec{\Pi}$ bzw. $\dot{\vec{\Pi}}$ aus Gl. 6.135 ein, so wird unter Vernachlässigung aller Terme vom Typ r^κ mit $\kappa > 1$ in einem sphärischen Polarkoordinatensystem mit $\vec{j} \parallel \vec{e}_z$:

$$4\pi\epsilon E_\theta = -\frac{\sin\theta}{c^2 r} \cdot j_{t-\frac{r}{c}}$$

$$E_r \approx 0$$

$$4\pi E_\phi = -\frac{\sin\theta}{cr} \cdot j_{t-\frac{r}{c}}$$

$$H_r = H_\theta = H_\phi = 0$$

Der Poyntingvektor hat dann nur eine nicht verschwindende r -Komponente.

$$\begin{aligned} S_r &= (\vec{E} \times \vec{H}) = E_\theta H_\phi \vec{e}_r \\ &= \frac{1}{16\pi^2\epsilon_0 c^3} \frac{\sin^2 \theta}{r^2} j_{(t-\frac{r}{c})}^2 \vec{e}_r \end{aligned}$$

Die aus einer Kugel vom Radius R um $r = 0$ autretende Energie pro Zeiteinheit ist demnach gegeben durch:

$$\begin{aligned} S_{tot} &= \int_0^\pi S_{r(\theta)} \underbrace{2\pi r^2 \sin \theta d\theta}_{=dF=R^2 d\Omega} \\ &= \frac{j^2}{8\pi\epsilon_0 c^3} \cdot \underbrace{\int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta}_{=4/3} \end{aligned}$$

$$S_{tot} = \frac{1}{6\pi\epsilon_0 c^3} \cdot j^2 \quad (6.136)$$

Nun gilt nach Gl. ??

$$(\vec{r}\Delta - \Delta \vec{r}) \psi_{(\vec{r},t)} = -2\vec{\nabla} \psi_{(\vec{r},t)} \quad (6.137)$$

Diese Beziehung kann man auch in folgender Form schreiben:

$$\frac{1}{\hbar} (\vec{r}\mathbb{H} - \mathbb{H}\vec{r}) \cdot \psi_{(\vec{r},t)} = i \frac{-i\hbar}{m_0} \vec{\nabla} \psi_{(\vec{r},t)}$$

oder

To Do 36 (Doppelungen korrigieren.):

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} (\vec{r}\mathbb{H} - \mathbb{H}\vec{r}) \cdot \psi_{(\vec{r},t)} &= \frac{\hbar}{m_0} \vec{\mathbb{P}} \psi_{(\vec{r},t)} \\ \frac{1}{\hbar} (\vec{r}\mathbb{H} - \mathbb{H}\vec{r}) \cdot \psi_{(\vec{r},t)} &= \frac{\hbar}{m_0} \vec{\mathbb{P}} \end{aligned}$$

Damit nimmt wegen

$$\vec{j}_e = \frac{e\hbar}{2im_0} \cdot (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

die Stromdichte \vec{J} die folgende Form an:

$$\vec{J} = \int \vec{j} d^3r = \frac{e\hbar}{im_0} \int \psi^* d^3r$$

bzw.

To Do 37 (Doppelungen korrigieren.):

$$\frac{1}{\hbar} (\vec{r}\mathbb{H} - \mathbb{H}\vec{r}) \psi_{(\vec{r},t)} = i \cdot \frac{-i\hbar}{m_0} \vec{\nabla} \psi_{(\vec{r},t)}$$

oder

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} (\vec{r}\mathbb{H} - \mathbb{H}\vec{r}) \psi_{(\vec{r},t)} &= \frac{i\hbar}{m_0} \mathbb{P} \psi_{(\vec{r},t)} \\ \frac{1}{\hbar} (\vec{r}\mathbb{H} - \mathbb{H}\vec{r}) &= \frac{i\hbar}{m_0} \mathbb{P} \end{aligned}$$

Damit nimmt wegen

$$\vec{j}_e = \frac{e\hbar}{i2m_0} \cdot (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

$\dot{\vec{J}}$ die folgende Form an:

$$\begin{aligned} \vec{J} &= \int \vec{j}_e d^3r \\ &= \frac{e\hbar}{im_0} \int \psi^* \vec{\nabla} \psi d^3r \\ &= \frac{e\hbar}{im_0} \left[\int \psi^* \vec{r} \mathbb{H} \psi d^3r - \int \psi^* \vec{r} \mathbb{H} \vec{r} \psi d^3r \right] \\ &= \frac{e\hbar}{im_0} \left[\int \psi^* \vec{r} \mathbb{H} \psi d^3r - \int (\mathbb{H} \psi^*) \vec{r} \vec{r} \psi d^3r \right] \end{aligned}$$

und somit

$$\vec{J} = 2 \left| C_{n'l'm'(t)}^* C_{nlm(t)} \right| \cdot \frac{E_n}{\hbar} \int \hat{\psi}_{n'l'm'}^* e \vec{r} \hat{\psi}_{nlm} d^3 - \left| \frac{E_n}{\hbar} \int \hat{\psi}_{n'l'm'}^* e \vec{r} \hat{\psi}_{nlm} d^3 \right| \cdot \cos(\omega_{n'n} \cdot t - \alpha) \quad (6.138)$$

Mit Verwendung von 6.129 und 6.131 kann man das Ergebnis in folgender Weise schreiben:

$$\vec{J}_{(t)} = -2\omega_{n'n} \cdot \left| C_{n'l'm'(t)}^* C_{nlm(t)} \right| \cdot |P_{n'n}| \cdot \cos(\omega_{n'n} \cdot t - \alpha')$$

To Do 38 (Hier fehlt noch was.):

Man kann hier im folgenden die zeitveränderlichkeit des Vorfaktors:

$$2 \cdot \left| C_{n'l'm'(t)}^* C_{nlm(t)} \right| = \frac{1}{\cosh(\frac{2t}{\tau})}$$

gegenüber dem Faktor $\cos(\omega_{n'n} \cdot t - \alpha')$ vernachlässigen.

Man verlangt demnach

$$\omega_{n'n}\tau \gg 1 \quad (6.139)$$

Anmerkung 22:

Optische Übergänge finden etwa in folgenden Bereichen statt:

$$\begin{aligned} \omega_{n'n} &\approx 10^{15} \dots 10^{16} \text{Hz} \\ 1/\tau &\approx 10^9 \text{s}^{-1} \\ \omega_{n'n}\tau &\approx 10^6 \dots 10^7 \end{aligned}$$

Dann wird

$$\mathbf{S}_{tot(t)} = \frac{\omega_{n'n}^4}{12\pi\epsilon_0 c^3} \cdot \frac{|P_{n'n}|^2}{\cosh(\frac{2t}{\tau})} \cdot [1 - \cos(2\omega_{n'n} \cdot t + 2\alpha')] \quad (6.140)$$

Man integriert jetzt diesen Ausdruck über eine Schwingungsperiode

$$T = \frac{2\pi}{\omega_{n'n}}$$

und erhält

$$\bar{\mathbf{S}}_{tot(\bar{t})} = \frac{\omega_{n'n}^4}{12\pi\epsilon_0 c^3} \cdot \frac{|P_{n'n}|^2}{\cosh\left(\frac{2\bar{t}}{\tau}\right)}$$

mit $\bar{t} \in (t, t + \tau)$.

Daraus ergibt sich durch Integration bezüglich \bar{t} von $-\infty$ bis $+\infty$ wegen

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\cosh\left(\frac{2\bar{t}}{\tau}\right)} d\bar{t} = \tau$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\mathbf{S}}_{tot(\bar{t})} d\bar{t} = \frac{\omega_{n'n}^4}{12\pi\epsilon_0 c^3} \cdot |P_{n'n}|^2 \cdot \tau \stackrel{!}{=} E_{n'} - E_n \stackrel{6.131}{=} \hbar\omega_{n'n} \quad (6.141)$$

Daraus ergibt sich für die Zeitdauer τ des Übergangs:

$$??\tau = \frac{12\pi\epsilon_0 c^3 \hbar}{|P_{n'n}|^2 \cdot \omega_{n'n}^3} \quad (6.142)$$

Es ist üblich die Größe

$$??W_{n'n} = \frac{1}{\tau} = \frac{\omega_{n'n}^3}{12\pi\epsilon_0 c^3 \hbar} \cdot |P_{n'n}|^2 \quad (6.143)$$

als *Übergangswahrscheinlichkeit* (genauer: *Übergangsrate*) für den Übergang $E_{n'} \rightarrow E_n$ zu bezeichnen. Der berechnete Übergang kommt offensichtlich ohne Einwirkung von außen, also von sich aus, zustande und wird daher als *Spontanübergang* oder *spontane Emission* bezeichnet.

Anmerkung 23 (Klassische Herleitung):

Eine klassische Herleitung erfolgt durch EINSTEIN schon vor der Quantentheorie.

To Do 39 (Hier fehlt noch was.):

Die natürliche Linienbreite der Spektrallinien

Zur Berechnung der natürlichen **Linienbreite** der **Spektrallinien** wird auf folgende beiden Formel zurückgegriffen:

$$4\pi\epsilon_0 E_\nu = -\frac{\sin \theta}{c^2 r} \dot{J}_{(t-\frac{|r|}{c})}$$

und

$$\dot{J}_{(t)} = \frac{\omega_{n'n}^2}{\cosh(\frac{2t}{\tau})} \cdot |P_{n'n}|^2 \cdot \sin(\omega_{n'n} t + \alpha')$$

Also wir die Feldstärke E im Kollimatorspalt eines Spektralapparates an der Stelle $\vec{r} = \vec{r}_0$:

$$E_{(t,r_0)} = \text{const.} \cdot \frac{1}{\cosh(\frac{2t}{\tau})} \cdot \cos(\omega_{n'n} t)$$

Wobei hier folgende Vereinfachung getroffen wurde:

$$\alpha' = \frac{\pi}{2} - \frac{|\vec{r}_0|}{c}$$

Eine Skizze des Prinzips für den Nachweis und die Wellenlängenbestimmung des emittierten Lichtes findet sich in Abb. 6.4.2.

Anmerkung 24:

Übergänge in sichtbare Licht sind keine Übergänge in den Grundzustand (für das H-Atom). Wegen des Vorfaktors $\sinh^{-1}(2t/\tau)$ ist $E_{\theta(t,r_0)}$ *keine* harmonische Zeitfunktion mehr, d. h. das FOURIER-Spektrum von $E_{\theta(t,r_0)}$ hat eine endliche Breite. Da nun der Spektralapparat verschiedene Lichtfrequenzen in der Schirmebene verschiedene Orte zuweist, muss die zu $E_{n'} \rightarrow E_n$ gehörende Spektrallinie darf mit einer endlichen Breite um den Schwerpunkt $\omega_{n'n}$ erscheinen.

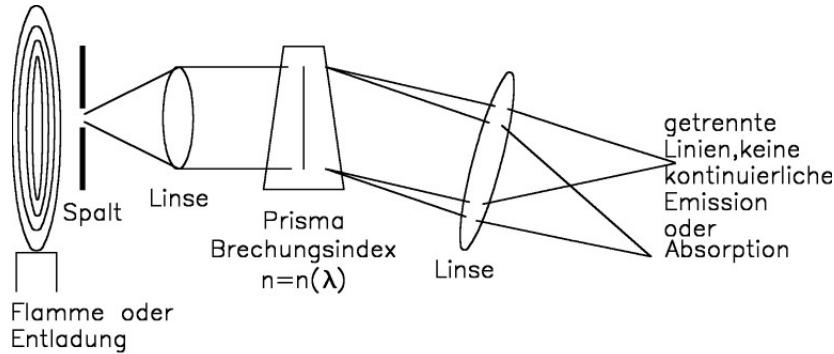


Abbildung 6.17: Prinzipieller Aufbau eines einfachen Spektrometers.

Sei $A_{(\omega)}$ die Fouriertransformierte von $E_{\theta(t,r_0)}$ also:

$$E_{\theta(t,r_0)} = \int_{-\infty}^{+\infty} A_{(\omega)} \cdot e^{i\omega t} d\omega$$

so wird

$$A_{(\omega)} = \frac{1}{2\pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} E_{(\theta(t',r_0))} \cdot e^{i\omega t'} dt'$$

Da $E_{(\theta(t',r_0))}$ eine reellwertige Zeitfunktion ist, gilt:

$$\begin{aligned} A_{(\omega)} &= \mathcal{R}A_{(\omega)} \\ &= \frac{1}{2\pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} E_{(\theta(t',r_0))} \cdot \cos(\omega t') dt' \end{aligned}$$

also ergibt sich mit Kombination von Gl. ??:

$$A_{1(\omega)} = \frac{\text{const.}}{\pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos((\omega_{n'n} - \omega)t')}{\cosh(\frac{2t}{\tau})} \cdot dt' + \frac{\text{const.}}{\pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos((\omega_{n'n} - \omega)t')}{\cosh(\frac{2t}{\tau})} \cdot dt'$$

To Do 40 (Formel überprüfen):

Also wird wegen

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos((\omega_{n'n} - \omega)t')}{\cosh(\frac{2t}{\tau})} \cdot dt' = \frac{\pi\tau}{\cosh[(\omega_{n'n} \pm \omega) \cdot \frac{\pi\tau}{4}]}$$

Man beachte jetzt Gl. 6.139: $\omega_{n'n}\tau \gg 1$ und dass

$$\frac{\pi}{\cosh[(\omega_{n'n} \pm \omega) \cdot \frac{\pi\tau}{4}]} \ll 1$$

für alle ω .

Daher gilt:

$$A_{1(\omega)} \approx \text{const.} \cdot \frac{\tau}{\cosh[(\omega_{n'n} + \omega) \cdot \frac{\pi\tau}{4}]} \ll 1$$

und damit wird die Lichtintensität im Kollimatorspalt:

$$\begin{aligned} I_\omega &\approx |A_{1(\omega)}|^2 \\ &\approx \text{const.}^2 \frac{\tau^2}{\cosh^2[(\omega_{n'n} - \omega) \cdot \frac{\pi\tau}{4}]} \end{aligned}$$

To Do 41 (Abbildung fehlt.):

Entwickelt man diese Funktion von ω um die Stelle $\omega_{n'n}$ nach TAYLOR bis zum Glied zweiter Ordnung, so ergibt sich:

$$I_\omega = 4 \cdot \text{const.} \cdot \frac{1}{\left(\frac{1}{2\tau'} - (\omega - \omega_{n'n})^2\right)^2} \quad (6.144)$$

mit $\tau' = \pi/4 \cdot \tau$.

Dieser charakteristische Verlauf wird als LORENTZ-Kurve bezeichnet. Die Halbwertsbreite dieser Kurve beträgt:

$$\Delta\omega_H = \frac{1}{\tau'} \quad (6.145)$$

Daraus folgt für die relative Halbwertsbreite:

$$\frac{\Delta\omega_H}{\omega_{n'n}} = \frac{1}{\omega_{n'n}\tau'} \approx 10^{-5} \dots 10^{-6} \quad (6.146)$$

To Do 42 (Hier fehlt noch etwas.):

Unterschied natürliche Linienbreite und Dopplerverbreiterung

Es gibt hier einen Unterschied zwischen der **natürlichen Linienbreite** und der **Dopplerverbreiterung**. Man muss beachten, dass Photonen auf geraden Bahnen laufen und nicht „verwackelt“ sind.

To Do 43 (Abschnitt überarbeiten): Dieser Abschnitt muss noch überarbeitet werden.

Anmerkung 25:

Die im allgemeinen immer auftretende **Dopplerverbreiterung** der Spektrallinien ist wesentlich größer als die natürliche Linienbreite, kann aber in der sog. dopplerfreien Spektroskopie experimentell unterdrückt werden.

Auswahlregeln für Dipolübergänge

Auswahlregel

Die Komponenten des Dipolmatrixelements (??):

$$P_{n'n}^{(i)} = e \cdot \int \psi_{n'l'm'}^*(\vec{r}) \xi_i \psi_{nlm}(\vec{r}) d^3r \quad (6.147)$$

¹¹ sind nur für bestimmte Übergänge von Null verschieden. Um das einzusehen, kann man schreiben:

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = C_{nlm} \mathbf{R}_{nl(r)} \mathbf{P}_{l(\cos\theta)}^{|m|} \cdot e^{im\varphi}$$

¹¹ $i = 1, 2, 3$ zählt die Koordinantenrichtungen durch.

und man kann $\psi_{nlm}(\vec{r})$ in Gl. ?? einsetzen:

$$P_{n'n}^{(i)} = C_{n'l'm'}C_{nlm} \cdot \int_0^\infty \mathbf{R}_{n'l'(\vec{r})} \mathbf{R}_{nl(\vec{r})} r^3 dr \cdot \sum_{n=1}^2 a_n^{(i)} \int_0^{2\pi} e^{-i[(m'-m)+M_n^{(i)}]} d\varphi$$

wegen

$$d^3r = r^2 dr \cdot \sin \theta d\theta d\varphi \cdot \int_{-1}^{+1} \mathbf{P}_{l'(\cos \theta)}^{|m'|} \mathbf{P}_{l(\cos \theta)}^{|m|} \cdot (b_i \sin \theta + c_i \cos \theta) d\cos \theta$$

mit

$$\begin{aligned} a_1^{(1)} &= a_2^{(2)} = 1/2 \\ a_1^{(2)} &= -a_2^{(1)} = 1/2i \\ a_1^{(3)} &= a_2^{(3)} = 1/2 \\ b_3 &= 0 \\ c_1 &= c_2 = 0 \\ c_3 &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} M_1^{(1)} &= -M_2^{(1)} = 1 \\ M_1^{(2)} &= -M_2^{(2)} = 1 \\ M_1^{(3)} &= +M_2^{(3)} = 0 \end{aligned}$$

und mit

$$\begin{aligned} x_1 &= r \cdot \sin \theta \cos \varphi \\ x_2 &= r \cdot \cos \theta \cos \varphi \\ x_3 &= r \cdot \cos \theta \end{aligned}$$

Für das Integral über r gilt generell:

$$\int_0^\infty \mathbf{R}_{(n'l'(r))} \mathbf{R}_{nl} r^3 dr \neq 0$$

für alle $n'l'$, nl . ¹²

Andererseits ist:

$$\int_0^{2\pi} e^{\pm i(m' - m \pm 1)\varphi} d\varphi = 0$$

für $\Delta m = \pm 1$ und $\Delta m = m' - n$.

Also wird für $\Delta m = 0$

$$\mathbf{P}_{n'n}^{(1)} = \mathbf{P}_{n'n}^{(2)} = 0 \quad (6.148)$$

für $m' = m$.

Dass die z -Komponente von $\vec{\mathbf{P}}_{n'n}$ nicht verschwindet folgt aus der Rekursionsformel:

$$(2l + 1) \cos \theta \cdot \mathbf{P}_{l(\cos \theta)}^{|m|} = (l + |m|) \mathbf{P}_{l-1(\cos \theta)}^{|m|} + (l + |m| + 1) \mathbf{P}_{l+1(\cos \theta)}^{|m|} + \quad (6.149)$$

und aus

$$\int \mathbf{P}_{l'(\cos \theta)}^{|m|} \mathbf{P}_{l(\cos \theta)}^{|m|} d \cos \theta = \begin{cases} \frac{2}{2l+1} \cdot \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} & \text{für } l' = l \\ 0 & \text{für } l' \neq l \end{cases}$$

Es ist also

$$\int \mathbf{P}_{l'(\cos \theta)}^{|m|} \mathbf{P}_{l(\cos \theta)}^{|m|} \cos \theta d \cos \theta \neq 0$$

für $m' = m$ und $l' - l = \pm 1$.

Hieraus folgt:

$$\mathbf{P}_{n'n}^{(3)} \neq 0$$

für $m' = m$ und $\Delta l = \pm 1$.

Zur Auswertung der anderen Integrale über θ benutzt man die Rekursionsformel

¹²Wenn r^2 nicht unbedingt $\neq 0 \rightarrow$ Orthogonalität.

$$\mathbf{P}_{l(\cos\theta)}^{|m|} \sin\theta = \frac{1}{2l+1} \cdot \left(\mathbf{P}_{l+1(\cos\theta)}^{|m|+1} - \mathbf{P}_{l(\cos\theta)}^{|m|} + 1_{l-1(\cos\theta)} \right) \quad (6.150)$$

aus der wiederum folgt:

$$\int_{-1}^{+1} \mathbf{P}_{l'(\cos\theta)}^{|m'|} \mathbf{P}_{l(\cos\theta)}^{|m|} \sin\theta d\cos\theta \neq 0$$

falls $\Delta l = \pm 1$.

Man findet dann:

$$\mathbf{P}_{n'n}^1 = \pm i \mathbf{P}_{n'n}^2 = \pm e^{i\frac{\pi}{2}} \mathbf{P}_{n'n}^3$$

Die x - und die y -Komponenten schwingen also mit einer Phasenverschiebung von $\pi/2$ gegeneinander, d. h. das Dipolmoment führt in der xy-Ebene eine zirkulare Bewegung aus.

Allgemein kann man feststellen, dass Dipolübergänge nur zwischen Zuständen auftreten können für die gilt:

$$\Delta l = \pm 1$$

und

$$\Delta m = \pm 1, 0$$

Klassifikation der Linien des Wasserstoffatoms

BALMER¹³ hatte für die vier sichtbaren Linien des H-Spektrums die folgende Formel aufgestellt:

$$\lambda_m = B \frac{n^2}{n^2 - 4}$$

mit $n = 3, 4, 5, 6$, wobei die Konstante

¹³Schullehrer in Basel.

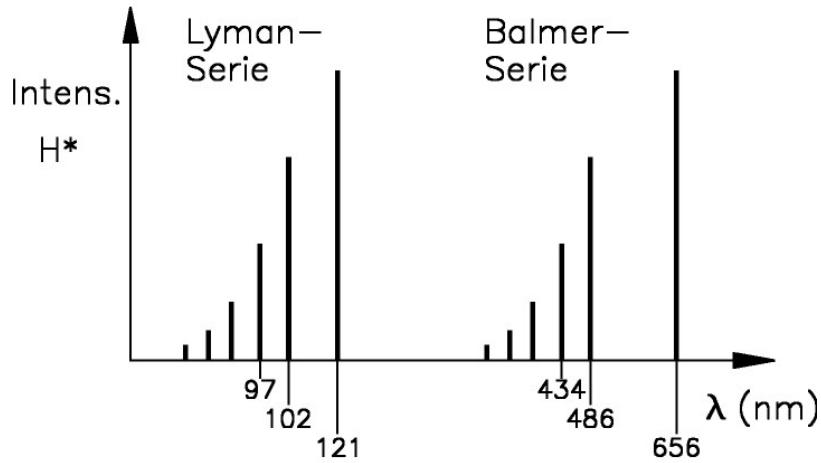


Abbildung 6.18: Vereinfaches Spektrum des Wassersoffs.

$$B = 3645,81 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$$

bezeichnet und $\lambda : m$ die zu den beobachteten Linie gehörige Wellenlänge.

Schreibt man diese Beziehung für die Frequenz

$$\omega_n = \frac{2\pi c}{\lambda_n}$$

um, so nimmt die Formel folgende Form an:

$$\omega_n = \frac{1}{\hbar} \cdot \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{Ryd.}$$

Die Formel nach BALMER stimmt somit genau mit der Beziehung für die Übergangsfrequenz $\omega_{n'n}$ überein,

$$\omega_n = \frac{1}{\hbar} \cdot \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{Ryd.}$$

wenn man hierin $n' = 2$ setzt.

Zusätzlich müssen auch die Linien zu $n' = 1, 3, 4, 5$ auftreten, aber diese liegen sämtlich außerhalb des sichtbaren Spektralbereichs und zwar für $n' = 1$ im Ultravioletten und für $n' > 2$ im Infraroten. Die durch n' gekennzeichneten Linien werden nach ihren Entdeckern benannt.

$n' = 1$	Lyman	(1906)	UV Lyman-Serie
$n' = 2$	Balmer	(1885)	vis Balmer-Serie
$n' = 3$	Ritz, Paschen	(1908)	IR Ritz-Serie , Paschen-Serie
$n' = 4$	Brackett, Pickery	(1922), (1897)	IR Brackett-Serie Pickery-Serie
$n' = 5$	Pfund	(1924)	IR Pfund-Serie

Üblicherweise gibt man die Übergänge nach dem in Abb. ?? gezeigten Schema an.

$$\begin{aligned}\langle \vec{L}_2 \rangle &= m_2 \hbar \vec{e}_z \\ \langle \vec{L}_1 \rangle &= m_1 \hbar \vec{e}_z \\ \langle \vec{L} \rangle &= \Delta m \hbar \vec{e}_z\end{aligned}$$

Das Photon muss demnach $\pm \hbar$ an Drehimpuls aufnehmen.

Anmerkung 26 (Achtung):

Linear polarisierte Photonen haben keinen Drehimpuls.

6.5 Das quantenmechanische Einteilchensystem bei Anwesenheit eines Magnetfeldes

Verfolgt man die Herleitung unserer quantenmechanischen Bewegungsgleichung ?? zurück, so erkennt man, dass nirgendwo davon Gebrauch gemacht worden ist, dass das äußere Kraftfeld nicht von der Zeit abhängt. Wir kann dher die Gültigkeit von ?? auch für ein zeitabhängiges Feldannehmen, wenn seine Darstellbarkeit in der Form

$$\vec{F}_e = -\vec{\nabla}U_{(r,t)}$$

gewährleistet ist.¹⁴

Diese Tatsache erlaubt es die Erweiterung der bisherigen Herleitungen auf den Fall, dass neben dem Feld \vec{F}_e noch ein zeitabhängiges magnetisches Feld $\vec{B}_{(r,t)}$ auftritt, in dem das Teilchen die

¹⁴Hier wurde \vec{F} mit dem Index e versehen, um anzudeuten, dass dieses Kraftfeld im allgemeinen nur Teil eines Gesamtkraftfeldes ist.

zusätzliche Kraft $e\vec{v} \times \vec{B}$ erfährt, wenn es die Ladung e trägt. Die Gesamtkraft, welche ein Teilchen in einem zeitabhängigen elektrischen Feld $\vec{E}_{(r,t)}$ und einem magnetischen Feld $\vec{B}_{(r,t)}$ erfährt, ist gegeben durch:

$$\vec{F} = e\vec{E}_{(r,t)} + e\vec{v}_{(r,t)} \times \vec{B}_{(r,t)} \quad (6.151)$$

Damit nimmt die Bewegungsgleichung ??) die Form an:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} - (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} + \nu \Delta \vec{u} = \frac{e}{m_0} \vec{E}_{(r,t)} + \frac{e}{m_0} \vec{v}_{(r,t)} \times \vec{B}_{(r,t)} \quad (6.152)$$

Es hat sich als zweckmäßig erweisen, anstelle von \vec{B} das zugehörige Vektorpotential \vec{A} , definiert durch:

$$\vec{B}_{(r,t)} \text{rot } \vec{A}_{(r,t)} \quad (6.153)$$

Wegen der allgemeinen Gültigkeit der Maxwellschen Gleichung

$$\text{rot } \vec{E}_{(r,t)} = -\dot{\vec{B}}_{(r,t)}$$

folgt mit Verwendung von 6.153:

$$\text{rot } (\vec{E} + \dot{\vec{A}}) = \vec{0}$$

Nach Gl. ?? war das elektrische Feld gegeben durch das Induktionsgesetz;

$$\vec{E}_{(r,t)} = -\dot{\vec{A}}_{(r,t)} - \vec{\nabla}\phi_{(r,t)} \quad (6.154)$$

Man betrachte ein System mit einem Teilchen der Ladung e in einem elektrostatischen Potential $\phi_{(r,t)}$. Zur Zeit $t = 0$ werde ein Magentfeld eingeschaltet, das nach der Zeit τ die Stärke $\vec{B}_{(r,t)}$ angenommen hat.

Bei Anwesenheit des Magnetfeldes $\vec{B}_{(r,t)}$ gilt für die Gesamtkraft auf ein Teilchen der Ladung e (LORENTZ-Kraft):

$$\vec{F}_{(r,t)} = e \cdot \vec{E}_{(r,t)} + e \cdot \vec{v}_{(r,t)} \times \vec{B}_{(r,t)} \quad (6.155)$$

Die Bewegungsgleichung ?? nimmt daher die folgende Form an:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \vec{\nabla}) \vec{v} - (\vec{U} \vec{\nabla}) \vec{U} + \nu \delta \vec{U} = \frac{e}{m_0} \vec{E} - \frac{e}{m_0} \vec{v} \times \vec{B} \quad (6.156)$$

15

Bei Abwesenheit eines Magnetfeldes galt allgemein wegen $\text{rot } \vec{v}_{(\vec{r},t)} = 0$ für jedes Integral über

$$\vec{P}_{(\vec{r},t)} = m_0 \vec{v}_{(\vec{r},t)}$$

das keine Wirbellinie von $\vec{v}_{(\vec{r},t)}$ umschließt:

$$\oint \vec{P}_{(\vec{r},t)} d\vec{r} = 0 \quad (6.157)$$

Unabhängig von der Impulsänderung, welche das Teilchen durch die Wirkung von \vec{F} erfährt, bleibt also jedes Ringintegral über \vec{p} , das keine Wirbellinie umschließt, in jedem Augenblick gleich Null.

Schaltet man das Magnetfeld ein, so entsteht wegen des Induktionsgesetzes längs des Integrationsweges eine elektrische Ringspannung:

$$\oint \vec{E}_{(\vec{r}',t)} dr' = -\frac{\partial}{\partial t} \int_F \vec{B}_{(\vec{r}',t)} dr' \quad (6.158)$$

$$= -\frac{\partial}{\partial t} \oint \vec{A}_{(\vec{r}',t)} dr' \quad (6.159)$$

$$(6.160)$$

Die links stehende Kraft $e\vec{E}$ greift während des Einschaltens zusätzlich zur Kraft $\vec{F}_e = -\vec{\nabla}e\varphi$ an. Sie muss zu einer zeitlichen Änderung des Impulses führen, die zusätzlich zu der von \vec{F}_e bewirkten auftritt:

$$\dot{\vec{P}}_{add} = e\vec{E}$$

bzw.

¹⁵Früher: $= 1/m_0 \cdot F$.

$$\oint \dot{\vec{P}}_{add(\vec{r}',t)} dr' = e \oint \vec{E}_{(\vec{r}',t)} dr'$$

6.157

$$\oint \dot{\vec{P}}_{(\vec{r},t)} dr'$$

Dieser Beziehung gibt man mit Hilfe von **6.158** die folgende Form:

$$\frac{\partial}{\partial t} \oint \vec{P}_{(\vec{r},t)} dr' = -\frac{\partial}{\partial t} \oint e \vec{A}_{(\vec{r},t)} dr'$$

Integriert man diese Gleichung über t von 0 bis τ und nimmt an, dass $\vec{B}_{(\vec{r},t=0)} = 0$ und damit auch $\vec{A}_{(\vec{r},t=0)} = 0$, so bekommt man wegen **6.157**:

$$\oint \vec{P}_{(\vec{r},t)} dr' = - \oint e \vec{A}_{(\vec{r},t)} dr'$$

oder mit $P = m_0 v$

$$\oint \left(\vec{v}_{(\vec{r},t)} + \frac{e}{m_0} \vec{A}_{(\vec{r},t)} \right) dr' = 0$$

Zieht man diese Ringintegrale auf eine Punkt \vec{r} zusammen, so folgt mit Hilfe des **Stokeschen Satzes**:

$$\text{rot} \left[\vec{v}_{(\vec{r},t)} + \frac{e}{m_0} \vec{A}_{(\vec{r},t)} \right] dr' = \vec{0}$$

bzw.¹⁶

$$\text{rot} \vec{v}_{(\vec{r},t)} = -\frac{e}{m_0} \text{rot} \underbrace{\vec{A}_{(\vec{r},t)}}_{=\vec{B}_{(\vec{r},t)}} \quad (6.161)$$

Also muss sich das Feld $\vec{v} + e/m_0 \cdot \vec{A}$ als Gradient einer skalaren Funktion darstellen lassen, die man mit $frm-e\nu\varphi_{(\vec{r},t)}$ bezeichnen kann:

$$\vec{v} + \frac{e}{m_0} \vec{A}_{(\vec{r},t)} = 2\nu \vec{\nabla} \varphi \quad (6.162)$$

¹⁶Mit Ausnahme von Punkten auf Wirbellinien (Quantisierungsachse, aber integrierbare Unendlichkeit)

Diese Beziehung steht jetzt anstelle der früheren (??):

$$\vec{v} = 2\nu \vec{\nabla} \varphi \quad (\text{siehe } ??) \quad (6.163)$$

Die Gleichung ??

$$\vec{u} = -\nu \vec{\nabla} \ln \rho \quad (6.164)$$

bleibt dagegen von der Anwesenheit des Magnetfeldes unbeeinflusst, da sie als Definitionsgleichung der Diffusionsgeschwindigkeit \vec{u} anzusehen ist. Daher gilt auch unverändert

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} = \nu \vec{\nabla} \operatorname{div} \vec{v} - \vec{\nabla} (\vec{u} \cdot \vec{v}) \quad (6.165)$$

Ebenso gilt wegen 6.164 unverändert:

$$(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} = \frac{1}{2} \vec{\nabla} u^2 \quad (6.166)$$

Anstelle der entsprechenden Beziehung für $(\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v}$ erhält man in der allgemein gültigen Beziehung

$$(\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} = \frac{1}{2} \vec{\nabla} v^2 - \vec{v} \times \operatorname{rot} \vec{v}$$

jetzt

$$(\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \stackrel{??}{=} \frac{1}{2} \vec{\nabla} v^2 + \frac{e}{m_0} (\vec{v} \times \vec{B}) \quad (6.167)$$

Führt man die Gleichungen 6.166 und 6.167 in 6.156 ein und deminiert \vec{E} mit Hilfe von 6.154, so ergibt sich:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\vec{v} + \frac{e}{m_0} \vec{A} \right) = -\frac{1}{m_0} \vec{\nabla} \underbrace{U}_{U=e\phi} - \frac{1}{2} \vec{\nabla} v^2 + \frac{1}{2} \vec{\nabla} u^2 - \nu \Delta \vec{u} \quad (6.168)$$

Multipliziert man mit ?? und subtrahiert 6.165, so ergibt sich die zu den früheren Ergebnis (ohne Magnetfeld) analoge *komplexe Bewegungsgleichung*:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(-\vec{u} + i \left(v + \frac{e}{m_0} \vec{A} \right) \right) = \frac{i}{2} \vec{\nabla} (-\vec{u} + i\vec{v})^2 + i\nu \vec{\nabla} (\operatorname{div} (-\vec{u} + i\vec{v})) - \frac{i}{m_0} \vec{\nabla} U \quad (6.169)$$

Man beachte, dass wegen Gl. 6.163 und 6.164 gilt

$$2\nu \vec{\nabla} \ln \psi = -\vec{u} + i \left(v + \frac{e}{m_0} \vec{A} \right) \quad (6.170)$$

wenn man wie in ?? setzt, dass

$$\psi(\vec{r},t) = \sqrt{\rho_{(\vec{r},t)}} \cdot e^{i\varphi_{(\vec{r},t)}}$$

Mit Hilfe von 6.170 lässt sich die linke Seite von 6.169 schreiben:

$$\vec{\nabla} \left(\frac{\partial}{\partial t} 2\nu \ln \psi \right) = \vec{\nabla} \left(\frac{1}{m_0 \psi} 2m_0 \nu \frac{\partial}{\partial t} \psi \right) \quad (6.171)$$

Für die rechte Seite von 6.169 verwendet man 6.170 in der Form:

$$-\vec{u} + i\vec{v} = 2\nu \ln \psi - z \frac{e}{m_0} \vec{A}$$

bzw.

$$(-\vec{u} + i\vec{v})^2 = 4\nu^2 (\vec{\nabla} \ln \psi)^2 - 4\nu i \frac{e}{m_0} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \ln \psi - \left(\frac{e}{m_0} \vec{A} \right)^2$$

Also wird:

$$\frac{1}{2} \vec{\nabla} (-\vec{u} + i\vec{v})^2 = 2\nu^2 \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \ln \psi)^2 - 2i\nu \frac{e}{m_0} \vec{\nabla} (\vec{A} \cdot \vec{\nabla} \ln \psi) - \frac{1}{2} \vec{\nabla} \left(\frac{2}{m_0} \vec{A} \right)^2$$

wegen

$$\operatorname{div} (\vec{\nabla} \ln \psi) = \frac{1}{\psi} \delta \psi - (\vec{\nabla} \ln \psi)^2$$

kann man für den zweiten Term auf der rechten Seite von 6.169 schreiben:

$$\nu \cdot \vec{\nabla} (-\vec{u} - iv)^2 + i\nu \cdot \vec{\nabla} (\operatorname{div} (-\vec{u} - iv))^2 + \vec{\nabla} \left(\frac{1}{\psi} 2\nu^2 \Delta \psi - i\nu \frac{e}{m_0} \psi \Delta \vec{A} \right)$$

Also wird

$$\frac{i}{2} \vec{\nabla} (-\vec{u} - iv)^2 + i\nu \cdot \vec{\nabla} (\operatorname{div} (-\vec{u} - iv)) = -i\vec{\nabla} \left[\frac{1}{m_0 \psi} \left(2\nu^2 m_0 \Delta + i\nu e (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) i2\nu r (\vec{A} \vec{\nabla}) + \frac{1}{2m_0} (e\vec{A})^2 \right) \psi \right]$$

Dieser Ausdruck lässt sich mit Verwendung von

$$\vec{P} = -i\hbar \vec{\nabla}$$

und

$$\nu = \frac{\hbar}{2m_0}$$

in folgende Form schreiben:

$$\frac{i}{2} \vec{\nabla} (-\vec{u} - iv)^2 + i \frac{\hbar}{2m_0} \vec{\nabla} (\operatorname{div} (-\vec{u} - iv)) = -i\vec{\nabla} \left[\frac{1}{\psi} \frac{(\vec{P} - e\vec{A})^2}{2m_0} \psi \right]$$

¹⁷

Also sind die linke und die rechte Seite von 6.169 als Gradient einer skalaren Funktion darstellbar und man erhält aufgrund der gleichen Schlussfolgerung wie in Abschnitt ?? nach Fortlassen des Gradienten und Multiplikation mit ψ :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{(\vec{r},t)} = \left\{ \frac{(\vec{P} - e\vec{A}_{(\vec{r},t)})^2}{2m_0} + \mathbf{U}_{(\vec{r},t)} \right\} \psi_{(\vec{r},t)}$$

Dies ist die SCHRÖDINGER-Gleichung bei Anwesenheit eines Magnetfeldes. Die wird üblicherweise in folgender Form geschrieben:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{(\vec{r},t)} = \mathbb{H} \psi_{(\vec{r},t)} \quad (6.172)$$

¹⁷Dies ist die rechte Seite von 6.169 bis auf den Term $-\frac{i}{m_0} \vec{\nabla} \mathbf{U}$.

mit

$$\mathbb{H} = \frac{1}{2m_0} \vec{\mathbb{P}}'^2 + \mathbf{U}_{(\vec{r},t)} \quad (6.173)$$

und

$$\vec{\mathbb{P}}' = \vec{\mathbb{P}} - e\vec{A}_{(\vec{r},t)} \quad (6.174)$$

To Do 44 (Formel falsch):

Die elektrischen Stromdichte nimmt mit Verwendung von 6.163 und $2\nu = \frac{\hbar}{2m_0}$ die Form an:

$$\vec{j}_e = e\rho_{(\vec{r},t)}\vec{v}_{(\vec{r},t)} = \frac{e}{m_0} \cdot |\psi_{(\vec{r},t)}|^2 \cdot \left(\underbrace{\hbar\vec{\nabla}\varphi_{(\vec{r},t)} - e\vec{A}_{(\vec{r},t)}}_{\substack{\text{6.163=} \\ m_0\nu}} \right)$$

Wegen

$$\nabla\psi = \psi i\vec{\nabla}\varphi + \psi \frac{1}{|\psi|} \vec{\nabla}\psi$$

mit

$$\psi = |\psi| e^{i\varphi}$$

ist also

$$\psi^* (-i\hbar\vec{\nabla}) \psi = |\psi|^2 \hbar\vec{\nabla}\varphi - i\hbar|\psi|\vec{\nabla}|\psi|$$

To Do 45 (Formel falsch): Formel überprüfen.

und entsprechend:

$$\psi(i\hbar\vec{\nabla})\psi^* = |\psi|^2 \hbar\vec{\nabla}\varphi + i\hbar|\psi|$$

Demnach ist

$$|\psi|^2 \hbar\vec{\nabla}\varphi = \frac{\hbar}{2i} (\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*)$$

Man kann damit der elektrischen Stromdichte die folgende Form geben:

$$\vec{j}_e = \frac{e\hbar}{2im_0} (\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*) - \underbrace{\frac{e^2}{m_0}}_{\text{dielektrischer Anteil der Stromdichte}} \underbrace{|\psi|^2 \vec{A}}_{(6.175)}$$

oder auch

$$\vec{j}_e = \frac{e}{2m_0} (\psi^*\vec{P}\psi + \psi\vec{P}\psi^*) \quad (6.176)$$

18

6.5.1 Das Wasserstoffatom im homogenen Magentfeld

Der normale Zeeman-Effekt

Das Vektorpotential eines homogenen Magnetfeldes kann in folgender Form dargestellt werden:

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B}_0 \times \vec{r}$$

wobei \vec{B}_0 für das magentische Feld steht. In Kugelkoordinaten nimmt dieser Ausdruck die folgende Form an:

$$\begin{aligned} \vec{A}_\varphi &= \frac{1}{2} \vec{B}_0 r \sin \theta d\vec{e}_\theta \\ \vec{A}_r &= 0 \\ \vec{A}_\theta &= 0 \end{aligned}$$

¹⁸Rayleigh-Streuung : $S \propto |\vec{p}| \propto \omega^4$

sofern die z-Achse mit der Richtung von \vec{B}_0 zusammenfällt.

Also wird:

$$-\frac{e}{m_0} \vec{A} \vec{\mathbb{P}} = i \frac{e\hbar}{2m_0} B_0 \frac{\partial}{\partial \varphi} \stackrel{??}{=} i\mu_b B_0 \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (6.177)$$

Für hinreichend schwache Magnetfelder ($B_0 < 10$ T) darf näherungsweise $(\mathbb{P} - eA)^2 = \mathbb{P} - 2eA\mathbb{P}$ gesetzt werden. Daher hat man für $\operatorname{div} \vec{A} = \vec{\nabla} \cdot \vec{A}$ benutzt. Im Rahmen dieser Näherung tritt dann in der SCHRÖDINGER-Gleichung des H-Atoms nur der Term **6.177** zusätzlich auf.

Aus dem Ansatz

$$\psi_{(r,\theta,\varphi)} = \mathbf{R}_{(r)} \Theta_{(\theta)} e^{im\varphi}$$

nimmt dieser Zusatzterm die folgende Form an:

$$-\frac{e}{m_0} \vec{A} \vec{\mathbb{P}} \psi_{(r,\theta,\varphi)} = -m\mu_B B_0 \psi_{(r,\theta,\varphi)}$$

Er liefert also zur Radialgleichung ?? nur einen Beitrag der additiv zum Term $-E\mathbf{R}_{(r)}$ hinzukommt, so dass beide Ausdrücke zu

$$-E\mathbf{R}_{(r)} = -(E - m\mu_B B_0) \mathbf{R}_{(r)}$$

zusammengefasst werden können. Die übrige Rechnung läuft dann wie zuvor ohne Magnetfeld und man das Ergebnis sofort hinschreiben:

$$E'_n = -\frac{1}{n} \cdot 1 \text{ Ryd.} + m\mu_B B_0 \quad (6.178)$$

Die m-Entartung aller Niveaus wird also aufgehoben. Da die Lösungen der Schrödinger-Gleichung mit dem Störterm **6.177** identisch mit sind mit denen des ungestörten Systems, bleiben die im Abschnitt ?? hergeleiteten Auswahlregeln für optische Dipolübergänge erhalten. Demnach sind für den Übergang $4p \rightarrow 3d$ ¹⁹ die in Abb. ?? gezeigten Interkombinationen möglich.

To Do 46 (Abbildung fehlt):

¹⁹ 1. Linie der RITZ-PASCHEN-Serie

Anmerkung 27:

Man beachte: Von jedem der $3p$ -Niveaus sind drei entsprechende Übergänge zu $\Delta m = -1$ möglich.

Für die Frequenzen des ausgestrahlten Lichtes gilt für $\Delta m = 0$:

$$\omega_{n'n} = \frac{1}{\hbar} (E'_n - E'_{n'}) = \frac{1}{\hbar} [(E_{n'} + m\mu_B B_0) - (E_n + m\mu_B B_0)] - \omega_{n'n}^0$$

wobei $\omega_{n'n}^0$ die Frequenz ohne Magnetfeld ist.

Emissionslinien zu $\Delta m = +1$ verschieben sich einheitlich um $+\frac{1}{\hbar}\mu_B B_0$ und solche zu $\Delta m = -1$ um $-\frac{1}{\hbar}\mu_B B_0$.

Dies bedeutet, dass jeder der Linien im **Wasserstoffspektrum** in drei Linien aufspaltet, wobei zwei Linien symmetrisch zu einer unverschobenen Linie sind. Diese drei Linien werden *normales ZEEMANsches Triplett* genannt.

To Do 47 (Fehlender Text): Hier fehlt noch die Anmerkung aus dem Skript.

Quantisierungsachse

Es stellt sich nun die Frage, was dafür spricht – wie bisher geschehen – die Quantisierungsachse des betrachteten Atoms parallel zu \vec{B}_0 anzunehmen.

Das magnetische Moment eines Elektrons in einem Zustand $\psi_{nlm}(\vec{r})$ war nach ?? gegeben durch:

$$\langle \vec{M} \rangle = m\mu_B \cdot \vec{e}_z$$

Die Orientierungsenergie dieses Moments im Feld \vec{B}_0 berechnet sich zu

$$E_{m\mu} = -\langle \vec{M} \rangle \vec{B}_0 = -|m|\mu_B B_0 \cos \gamma$$

wobei $\gamma \angle (\langle \vec{M} \rangle, \vec{B}_0)$. Die Gesamtenergie in diesem Zustand ist also:

$$\tilde{E}_n = -\frac{1}{n^2} \text{Ryd} - |m|\mu_B B_0 \cos \gamma$$

Nun sind Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung solche, die den Erwartungswert von \mathbb{H}

$$\mathbb{H} = \frac{1}{2m_0} (\vec{\mathbb{P}} - e\vec{A})^2 + U_{(r)}$$

zum Extremum machen.

Wegen

$$\mathbb{H} = \vec{E}_n \xrightarrow{\text{Extremum}} E_n^{extr.} = -\frac{1}{n^2} \text{Ryd} + m\mu_B B_0$$

Wegen $m < 0$ einer Orientierung von $\langle \vec{M} \rangle$ parallel zu \vec{B}_0 entspricht und $m > 0$ einer Orientierung antiparallel zu \vec{B}_0 .

Die mit den Übergängen zu $\Delta m = 0$ bzw. $\delta m \pm 1$ verbinden Linien des LORENTZSchen Tripletts zeigen bei Beobachtung in verschiedenen Richtungen zum magnetischen Feld bestimmte Polarisierungen

To Do 48 (Abbildungen fehlen.): Bild 1, Bild 2, Bild 3

Nach den bisher gemachten Näherungen hat man den Term $\frac{e^2}{m_0} \vec{A}^2$, der sich aus $\frac{\vec{\mathbb{P}}}{e\vec{A}} 2m_0$ als quadratischer Form ergibt, bisher vernachlässigt. Dies gilt für Felder > 10 Tesla nicht mehr. Nach **6.175** gilt:

$$\vec{\mathfrak{a}}_e = \frac{e\hbar}{2im_0} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) - \frac{e^2}{m_0} \vec{A}_{(r)} \cdot |\psi_{(r)}|^2$$

Im homogenen Magnetfeld ($\vec{B}_0 \parallel \vec{e}_z$) war

$$\begin{aligned} \vec{A}_{(r)} &= \vec{A}_{\theta} = 0 \\ \vec{A}_{\varphi} &= \frac{1}{2} B_0 r \sin \varphi \vec{e}_{\varphi} \end{aligned}$$

Betrachtet man einen Zustand mit $m = 0$, so verschwindet der obige Klammerausdruck für $\vec{\mathfrak{a}}_e$, weil ψ in diesem Fall reellwertig wird.

Man erhält also:

$$\vec{\mathfrak{a}}_e = -\frac{e}{\hbar} \mu_B B_0 r \sin \theta |\psi_{nl0(\vec{r})}|^2 \vec{e}_{\varphi} = \vec{J}_{\varphi}$$

Bildet man wie im Abschnitt ?? aus \vec{J}_φ das magnetische Moment, so wird:

$$\langle \vec{M} \rangle = \mu_B B_0 \frac{e}{\hbar} G_{nl0} \vec{e}_z$$

mit

$$G_{nl0} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\psi_{nl0(r,\theta,\varphi)}|^2 r^4 dr \cdot \sin^2 \theta d\theta \cdot d\varphi$$

und daher ergibt sich für die Gesamtenergie:

$$\begin{aligned} E_{nl0} &= E_{nl0}^{\text{ungeb.}} - \langle M \rangle \cdot B_0 \\ &= E_{nl0}^{\text{ungeb.}} + \frac{e}{\hbar} \mu_B B_0^1 G_{nl0} \end{aligned}$$

To Do 49 (Abbildung fehlt):

Ein entsprechender Effekt (Zusatzeffekt) tritt auch bei den Zuständen zu $m \neq 0$ auf, so dass sich der oben eingezeichnete, resultierende Verlauf als Funktion von B_0 ergibt.

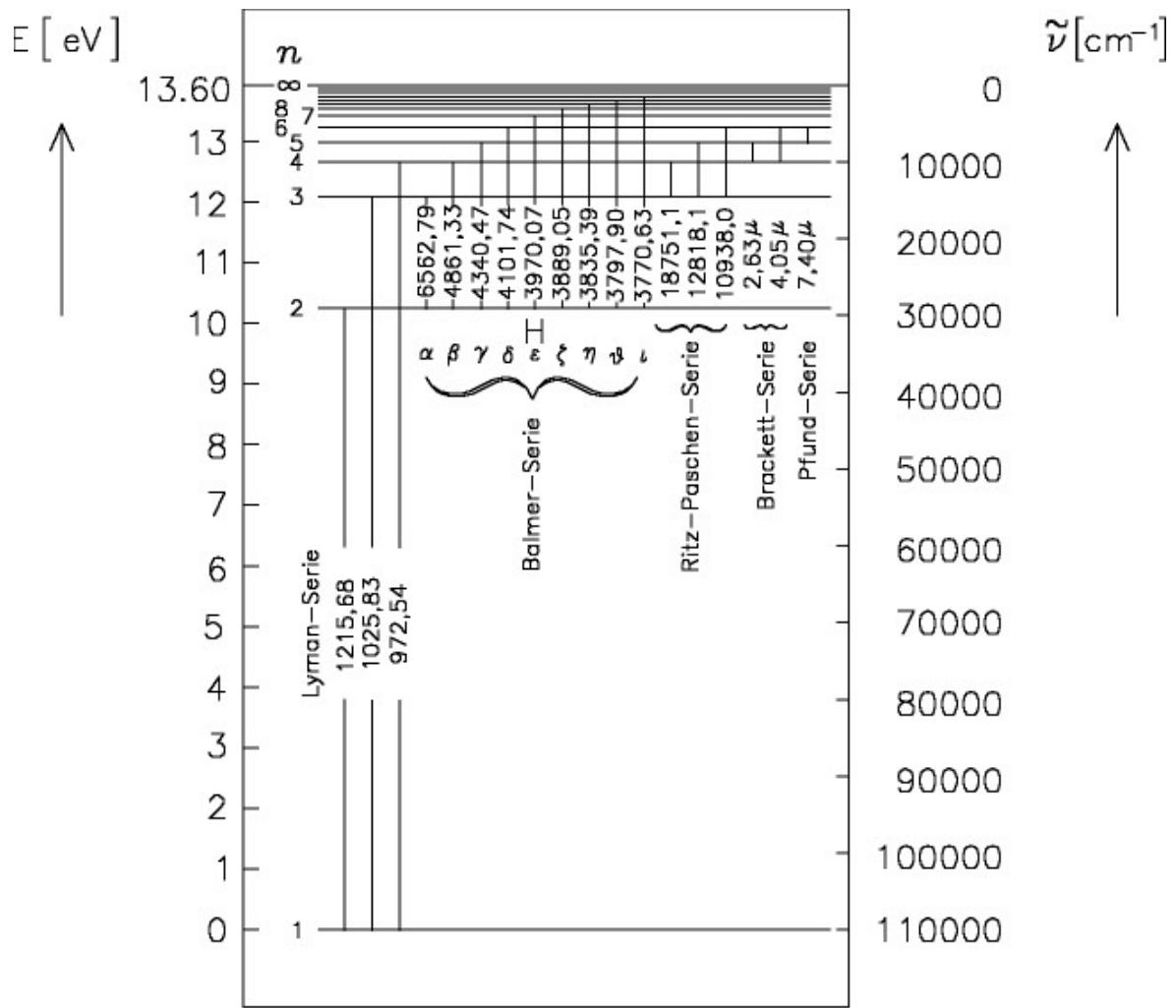


Abbildung 6.19: Termschema des Wasserstoffatoms.

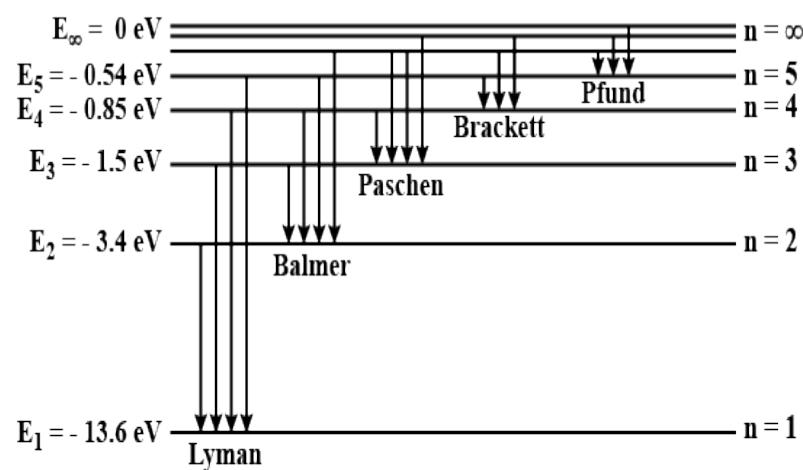


Abbildung 6.20: Energieschema des Wasserstoffatoms.

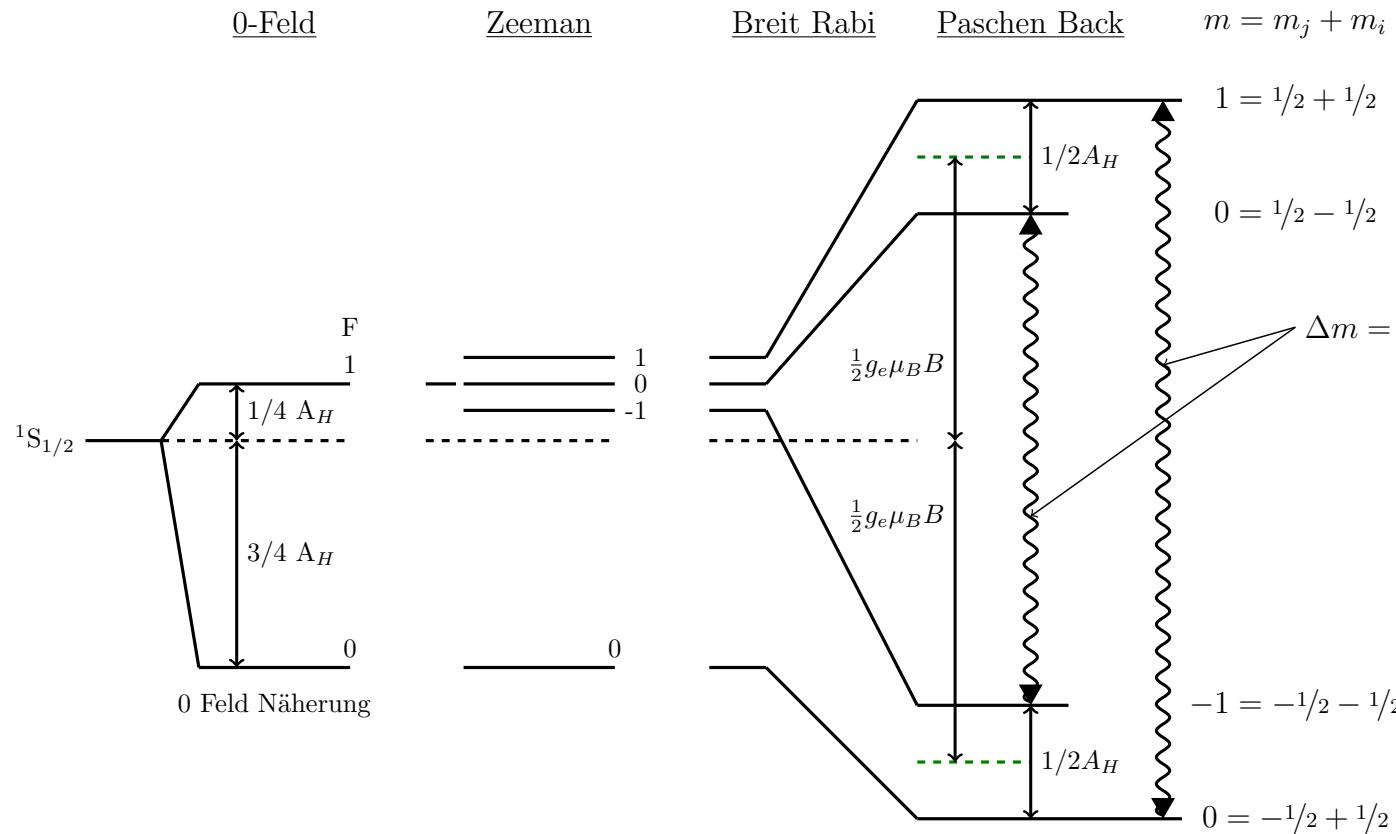


Abbildung 6.21: Aufspaltung der Wasserstofflinien im magentschen Feld.

?? Abb. fehlt noch

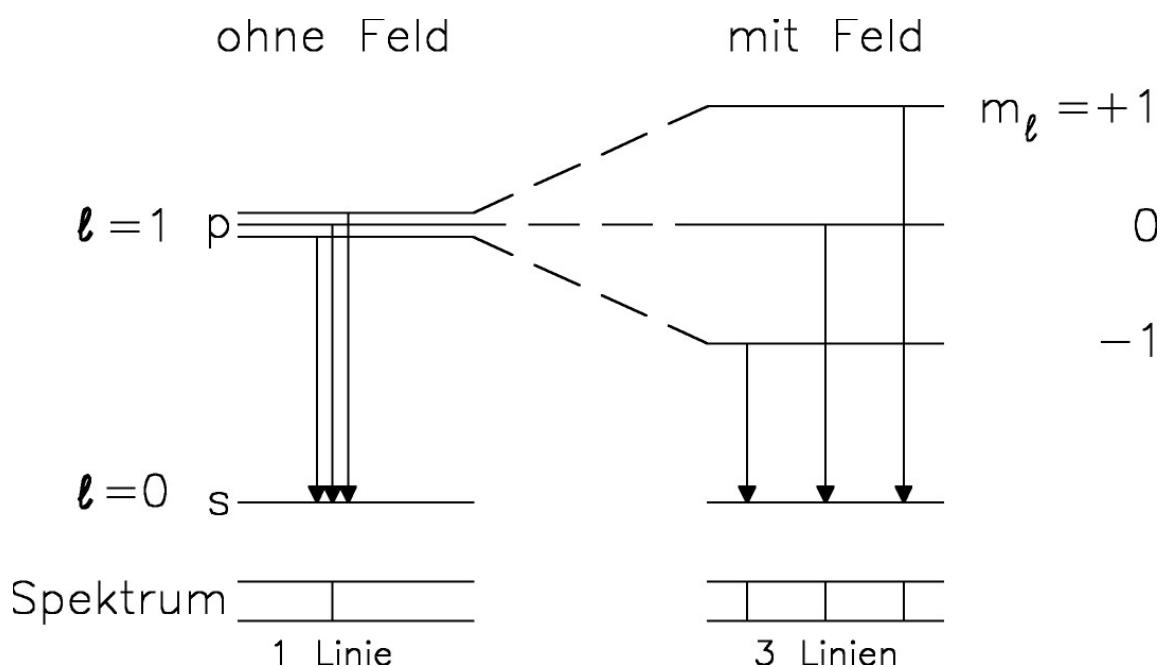


Abbildung 6.22: Der *normale* Zeeman-Effekt entsteht durch Wechselwirkung mit dem Magnetfeld des Elektronenbahndrehimpulses des Elektrons. Die Aufspaltung sehr klein: $\mu_B = 0,4669 \text{ cm}^{-1} T^{-1}$ ($1T = 10.000$ Gauß), z. B.: $2T$ entsprechend etwa 1 cm^{-1} Aufspaltung.

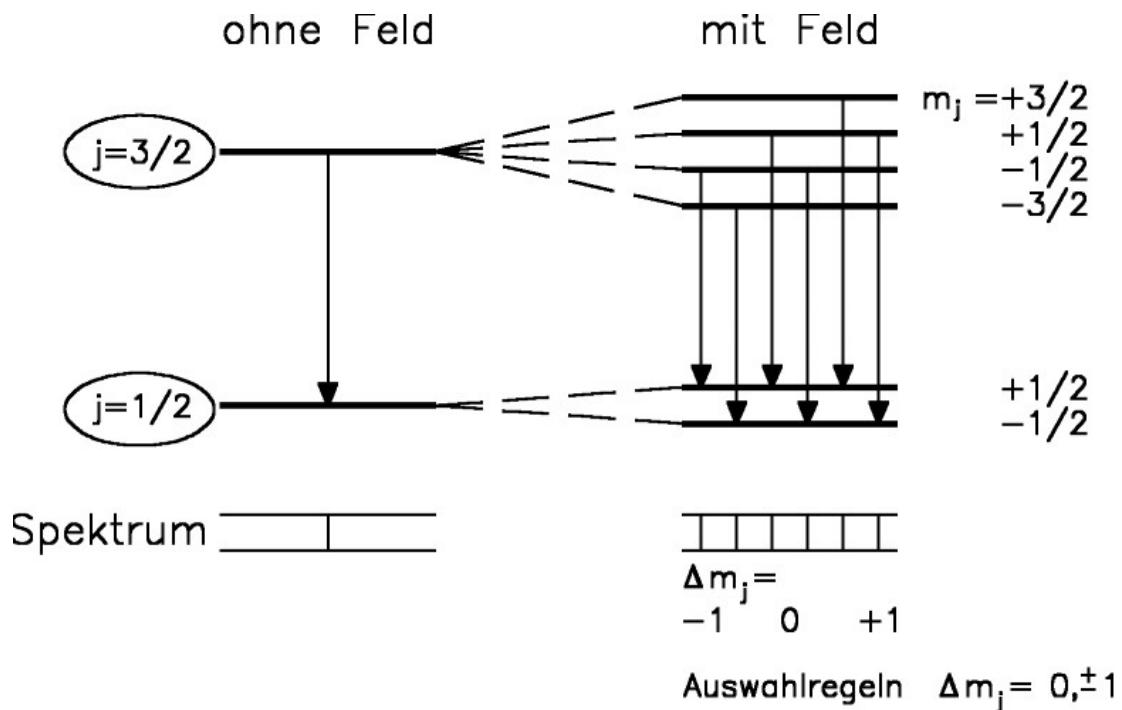


Abbildung 6.23: Anormeler Zeemann-Effekt: Der Zustand mit dem höheren Gesamtdrehimpuls j ist bei Spin-Bahn-Kopplung auf Grund der Orientierung der magnetischen Momente immer der Zustand mit der höheren Energie. Die Abbildung zeigt den Übergang zwischen dem energieärmsten oberen ($j = 3/2$) und unteren ($j = 1/2$) Zustand und die Aufspaltung im Magnetfeld. Die beobachteten spektralen Übergänge sind durch Pfeile gekennzeichnet.

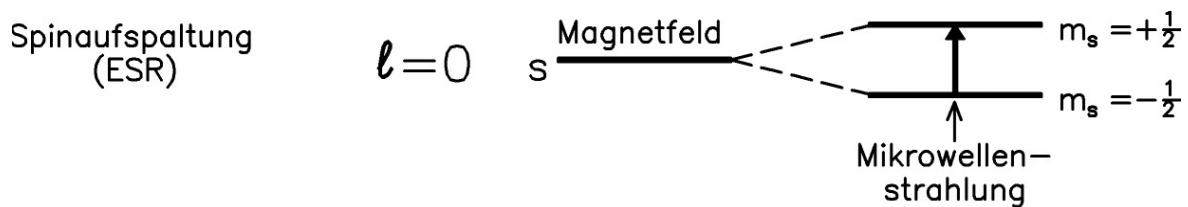


Abbildung 6.24: Wenn das äußere magnetische Feld sehr stark ist, dann entkoppeln die magnetischen Momente von Bahndrehimpuls und Spin und orientieren sich unabhängig voneinander zum äußeren Feld: Absorptionen zwischen den Spin- und Bahndrehimpulsniveaus bei unterschiedlichen Wellenlängen. Die Absorption zwischen den Spinniveaus liegt im Mikrowellenbereich für Magnetfeldstärken im Kilogaussbereich. Die Elektronenspinresonanz (ESR-)Spektroskopie dient zum Nachweis von Teilchen mit ungepaartem Spin (Radikale).

7 Der Teilchenspin

In diesem Abschnitt wird eine Herleitung des Teilchenspins im Rahmen der Stochastischen Mechanik gegeben. Die allgemeinen Aspekte wird im Abschnitt 17.1.8 beschrieben ebenso wie der experimentelle Nachweis (siehe Abb. 17.1.8 und 17.11).

Man betrachte ein Teilchen der Ruhemasse m_0 in einem zentralesymmetrischen Potential und beschränke sich zunächst auf Zustände mit $l = 0$. Es sei also:

$$Psi_{(\vec{r})} = \psi_{n00(\vec{r})}$$

Man denke sich willkürlich eine Achse durch das Potentialzentrum gelegt und identifiziere diese mit der z-Achse. Wenn das Teilchen an eine Stelle \vec{r} gelangt ist, besitzt es dort einen bestimmten, wenn auch nicht angebbaren Impuls \vec{p} . Die φ -Komponente von \vec{p} sei p_φ ¹

Man sammelt aus der $\psi_{(\vec{r})}$ definierenden Schar alle diejenigen Scharelemente aus, bei denen man das Teilchen an verschiedenen Stellen des Raumes mit positivem p_φ hat. Diese Elemente sollen die Menge M_\uparrow definieren. Entsprechend sei M_\downarrow gebildet. Die relative Anzahl der Elemente zu gleichem \vec{r} ist die Wahrscheinlichkeit $W_{(\vec{r})} = w_{(\vec{r})} d^3r$ mit der das Teilchen im Volumenelement d^3r um \vec{r} herum angetroffen wird.

Es gilt dann also:

$$w_{(\vec{r})} = w_{\uparrow(\vec{r})} + w_{\downarrow(\vec{r})} \quad (7.1)$$

Daraus folgt *nicht*:

$$\psi_{(\vec{r})} = \psi_{\uparrow(\vec{r})} + \psi_{\downarrow(\vec{r})} \quad (\text{gilt nicht!})$$

denn es ist

¹ Man hat hier, wie zuvor, ein spezifisches Polarkoordinatensystem mit dem Ursprung im Potentialzentrum und mit der Achse $\varphi = 0$ parallel zur z-Achse eingeführt.

$$\psi_{(\vec{r})}^* \psi_{(\vec{r})} = \underbrace{\psi_{\uparrow(\vec{r})}^* \psi_{\uparrow(\vec{r})}}_{w_{\uparrow(\vec{r})}} + \underbrace{\psi_{\downarrow(\vec{r})}^* \psi_{\downarrow(\vec{r})}}_{w_{\downarrow(\vec{r})}} + \psi_{\uparrow(\vec{r})}^* \psi_{\downarrow(\vec{r})} + \psi_{\downarrow(\vec{r})}^* \psi_{\uparrow(\vec{r})}$$

Andererseits wurde $\vec{\psi}_{\uparrow(\downarrow)(\vec{r})}$ gerade als ein Zustand konstruiert zu dem ein positiver (bzw. negativer) Drehimpuls gehört. Diesen von $\langle \mathbb{L} \rangle$ verschiedenen Drehimpuls des Teilchens im Zustand $\vec{\psi}_{\uparrow(\downarrow)(\vec{r})}$, des als Eigenzustand realisiert werden kann, wird als *Spin* des Teilchens bezeichnet. Aufgrund des magnetomechanischen Parallelismus ist zu erwarten, dass mi diesem Spin ein elektromagnetisches Moment verbunden ist.

Später wird gezeigt, dass dies gleich dem **Bohrsches Magneton** ist:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0} \quad (7.2)$$

Ohne äußeres Magnetfeld sind diese beiden Zustände $\psi_{\uparrow(\downarrow)(\vec{r})}$ miteinander entartet, d. h. jede Linearkombination aus ihnen ist wieder eine Lösung der Schrödinger-Gleichung. Bei Anwesenheit eines Magnetfeldes $\vec{B} = B_z \vec{e}_z$ ergibt mit 7.2 für die Dichte $U_{mag(\vec{r})}$ der *Spinentartungsenergie*:

$$U_{mag(\vec{r})} = \mu_B B_z \left(\psi_{\uparrow(\vec{r})}^* \cdots \psi_{\uparrow(\vec{r})} - \psi_{\downarrow(\vec{r})}^* \cdots \psi_{\downarrow(\vec{r})} \right) \quad (7.3)$$

Dieser Ausdruck lässt sich mit der Matrix

$$\bar{\bar{B}} = \begin{pmatrix} B_z & 0 \\ 0 & -B_z \end{pmatrix} \quad (7.4)$$

in die folgende Form schreiben

$$U_{mag(\vec{r})} = \mu_B B_z \left(\vec{\psi}_{(\vec{r})}^* \bar{\bar{B}} \vec{\psi}_{(\vec{r})} \right) \quad (7.5)$$

Entsprechend kann

$$\psi_{\uparrow(\vec{r})}^* \mathbb{H} \psi_{\uparrow(\vec{r})} + \psi_{\downarrow(\vec{r})}^* \mathbb{H} \psi_{\downarrow(\vec{r})}$$

in der folgenden Form geschrieben werden:

$$\vec{\psi}_{(\vec{r})}^* \mathbb{H} \vec{\psi}_{(\vec{r})}$$

mit

$$\mathbb{H} = \frac{1}{2m_0} (\vec{\mathbb{P}} - e\vec{\mathbb{A}})^2 + U_{(\vec{r})}$$

Also wird der Erwartungswert der Gesamtenergie bei Anwesenheit eines Magnetfeldes:

$$\begin{aligned}\langle \mathbb{H}' \rangle &= \int U_{mag(\vec{r})} d^3r \\ \rightarrow \langle \mathbb{H}' \rangle &= \int \vec{\psi}_{(\vec{r})}^* \{ \mathbb{H} \bar{1} - \mu_B \bar{B} \} \cdot \vec{\psi}_{(\vec{r})} d^3r\end{aligned}$$

Die Minimierung von $\langle \mathbb{H}' \rangle$ unter Konstanthaltung von

$$\int \vec{\psi}_{(\vec{r})}^* \vec{\psi}_{(\vec{r})} d^3r = \int (|\vec{\psi}_{\uparrow(\vec{r})}|^2 + |\vec{\psi}_{\downarrow(\vec{r})}|^2) d^3r = 1 \quad (7.6)$$

liefert

$$(\mathbb{H} \bar{1} - \mu_B \bar{B}) \vec{\psi}_{(\vec{r})} = E \vec{\psi}_{(\vec{r})} \quad (7.7)$$

mit

$$\mathbb{H} = \frac{1}{2m_0} (\vec{\mathbb{P}} - e\vec{A}_{(\vec{r})})^2 + U_{(\vec{r})}$$

To Do 50 (Abbildung fehlt): Abbildung Spin fehlt Link zitieren: <http://www7b.biglobe.ne.jp/kcy05t/spin.html>

1. Widerspruch: Es gibt Ströme, aber keine bewegten Ladungen.
2. Widerspruch: Das Elektron dreht sich nicht, hat aber trotzdem einen Spin.
3. Widerspruch: Spin wird in Einheiten des Drehimpulses, ist aber kein Spin-Drehimpuls.

Wobei $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ definiert sind durch:

$$\begin{aligned}\alpha &= e^{\frac{i}{2}(\psi+\varphi)} \\ \beta &= ie^{\frac{i}{2}(\psi-\varphi)} \cdot \sin \frac{\theta}{2} \\ \gamma &= ie^{\frac{i}{2}(\psi+\varphi)} \cdot \sin \frac{\theta}{2} \\ \delta &= e^{-\frac{i}{2}(\psi+\varphi)} \cdot \cos \frac{\theta}{2}\end{aligned}$$

Dann gilt hier zunächst einmal:

$$\overline{\bar{Q}}\overline{\bar{Q}}^+ = \overline{\bar{Q}}\overline{\bar{Q}} = 1$$

und es stellt sich heraus, dass

$$\overline{\bar{P}}'_{(x',y',z')} = \overline{\bar{Q}}\overline{\bar{P}}\overline{\bar{Q}}^+$$

genau die gleiche Transformation $(x, y, z) \rightarrow (x', y', z')$ beschreibt wie

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} \overline{\bar{A}} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Ferner: Beschreiben $\overline{\bar{A}}_1$ und $\overline{\bar{A}}_2$ bzw. $\overline{\bar{Q}}_1$ und $\overline{\bar{Q}}_2$ nacheinander ausgeführte Koordinatendrehungen und ist

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} \overline{\bar{A}} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

so gilt

$$\overline{\bar{A}} = \overline{\bar{A}}_1 \cdot \overline{\bar{A}}_2$$

und entsprechend

$$\bar{\bar{Q}} = \bar{\bar{Q}}_1 \cdot \bar{\bar{Q}}_2$$

Die Elemente $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ heißen

CAYLEY-KLEINSche Parameter.

Nach 7.4 war

$$\bar{\bar{B}} = B_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_z & 0 \\ 0 & -B_z \end{pmatrix}$$

Entsprechend gilt für den Punkt $\vec{r} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ z \end{pmatrix}$

7.0.1 Die Cayley-Kleinschen Parameter und die Paulischen Spinmatrizen

Die modifizierte Schrödinger-Gleichung (7.7) ist in ihrer Form spezialisiert durch die Annahme:

$$\vec{B} = B_z \vec{e}_z$$

wobei \vec{e}_b gleichzeitig die Richtung des Spins bezeichnet. Man kann im folgenden von dieser Spezialisierung befreien. Dazu denke man sich das Koordinatensystem gedreht. Diese Drehung kann durch die drei sog. Euler-Winkel beschrieben werden. Es gilt:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \bar{\bar{A}} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

mit $\bar{\bar{A}} = \bar{\bar{B}} \bar{\bar{C}} \bar{\bar{D}}$

Dabei ist

$$\bar{\bar{D}} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

die Drehung um die ursprüngliche z-Achse.

Ferner

$$\bar{\bar{C}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

das Verkippen der z-Achse längs der neuen x-Achse um den Winke θ .

Und schließlich

$$\bar{\bar{B}} = \begin{pmatrix} \cos \psi & \sin \psi & 0 \\ -\sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

die Drehung der neuen (ξ', η') -Achsen in ihrer durch θ festgelegten Ebene um den Winkel ψ .

Von FELIX KLEIN stammt nun folgende Überlegung:

Wenn

$$\bar{\bar{P}} := \begin{pmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{pmatrix} \quad (7.8)$$

und

$$\bar{\bar{Q}}_{(\theta, \varphi, \psi)} := \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \quad (7.9)$$

und

$$\bar{\bar{Q}}_{(\theta, \varphi, \psi)}^+ := \begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \\ \gamma^* & \delta^* \end{pmatrix} \quad (7.10)$$

ist.²

$$\bar{\bar{P}} = \begin{pmatrix} z & 0 \\ 0 & z \end{pmatrix}$$

²Transponent und Konjugent

Man kann jetzt fordern, dass sich $\bar{\bar{B}}$ unter Drehung des Koordinatensystems wie der Vektor \vec{B} transformieren soll, d. h. analog zu $\bar{\bar{P}}$:

$$\bar{\bar{B}}' = \bar{\bar{Q}} \bar{\bar{B}} \bar{\bar{Q}}^+$$

Entsprechend muss bei dieser Koordinatendrehung $\vec{\psi}_{(r)} \rightarrow \vec{\psi}'_{(r)}$ übergehen, so dass

$$\vec{\psi}^+ \bar{\bar{B}} \vec{\psi} = \vec{\psi}'^+ \bar{\bar{B}}' \vec{\psi}'$$

³ gilt, d. h. es muss natürlich verlagt werden, dass sich die magnetische Wechselwirkung zwischen Spinnmoment und dem magnetischen Feld \vec{B} nicht ändert, wenn man die Lage des Koordinatensystems durch Drehung verändert. Man kann nun behaupten, dass folgender Zusammenhang gilt:

$$\vec{\psi}' = \bar{\bar{Q}} \vec{\psi}_{(r)}$$

⁴

und

$$\vec{\psi}'^+ = [\bar{\bar{Q}} \vec{\psi}_{(r)}]^+ = \vec{\psi}^+ \bar{\bar{Q}}^+$$

dann wird

$$\vec{\psi}^+ \bar{\bar{Q}}' \vec{\psi}' = \vec{\psi}^+ \bar{\bar{Q}}' \bar{\bar{B}}' \bar{\bar{Q}} \vec{\psi}$$

To Do 51 (Formel falsch): Formel falsch (Indices)

Da nun

$$\bar{\bar{B}} = \bar{\bar{Q}}^+ \bar{\bar{B}}' \bar{\bar{Q}}$$

gelten sollte, folgt hieraus:

³Die Wechselwirkungsenergie darf sich nicht durch die Koordinatentransformation ändern (Invarianz).

⁴Transponent und kongruent.

$$\bar{\bar{Q}} \bar{\bar{B}} \bar{\bar{Q}}^+ = \underbrace{\bar{\bar{Q}} \bar{\bar{Q}}^+}_{\bar{1}} \bar{\bar{B}}' \underbrace{\bar{\bar{Q}} \bar{\bar{Q}}^+}_{\bar{1}}$$

Da nun nach den obigen Gleichungen

$$\psi^+ \bar{\bar{B}}' \psi' = \bar{\psi}^+ \bar{\bar{B}} \bar{\psi}$$

zu verlangen ist, muss gelten:

$$\bar{\bar{Q}}^+ \bar{\bar{B}}' \bar{\bar{Q}} = \bar{\bar{B}}$$

bzw.

$$\bar{\bar{Q}} \bar{\bar{Q}}^+ \bar{\bar{B}}' \bar{\bar{Q}} \bar{\bar{Q}}^+ = \bar{\bar{Q}} \bar{\bar{B}} \bar{\bar{Q}}'$$

Wenn sich also $\bar{\bar{B}}$ wie der Vektor \vec{B} unter Koordinatendrehung transformieren soll und die magnetische Wechselwirkungsenergie unter dieser Drehung invariant bleiben soll, dann muss sich $\vec{\psi}_{(r)}$ in der Form

$$\vec{\psi}'_{(r)} \bar{\bar{Q}} \vec{\psi}_{(r)} \tag{7.11}$$

transformieren.

Für eine allgemeine Lage des Koordinatensystems hat $\bar{\bar{B}}$ die zu (7.8) analoge Form

$$\bar{\bar{B}} = \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_z \\ B_x + iB_z & -B_z \end{pmatrix}$$

Diese Matrix lässt sich in die entsprechende Summe zerlegen:

$$\bar{\bar{B}} = B_x \bar{\sigma}_x + B_y \bar{\sigma}_y + B_z \bar{\sigma}_z$$

mit

$$\bar{\bar{\sigma}}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.12)$$

$$\bar{\bar{\sigma}}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (7.13)$$

$$\bar{\bar{\sigma}}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.14)$$

(7.15)

Diese Matrizen werden in der Quantenmechanik als PAULISCHE-Spinmatrizen bezeichnet.

Formal kann man ?? auch in der Form schreiben:

$$\bar{\bar{B}} = \vec{B} \cdot \vec{\sigma}$$

Wobei $\vec{\sigma}$ ein Vector ist, dessen Komponente die **Pauli-Matrizen** sind.

Danach kann man **7.7** in der folgenden Form schreiben:

$$\left(\mathbb{H}\bar{1} - \mu_B \vec{B} \vec{\sigma} \right) \vec{\psi}_{(r)} = E \vec{\psi}_{(r)} \quad (7.16)$$

Diese Gleichung wird als *nichtrelativistische Pauli-Gleichung* bezeichnet.

$$\mathbb{J} = \mathbb{L} + \mathbb{S} \quad (7.17)$$

mit

$$\vec{s} = \begin{pmatrix} \bar{\bar{s}}_1 \\ \bar{\bar{s}}_2 \\ \bar{\bar{s}}_3 \end{pmatrix}$$

und

$$\bar{\bar{s}}_i = \frac{\hbar}{2} \hat{\bar{\bar{\sigma}}}_i$$

Man beachte nun folgenden Zusammenhang:

Sei \mathbb{A} ein Operator in der nichtrelativistischen Quantenmechanik (z. B. $\vec{\mathbb{L}}$, $\vec{\mathbb{P}}$), so folgt für die Zeitabhängigkeit seines Erwartungswertes:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbb{A}_{(\vec{r},t)} \rangle &= \frac{\partial}{\partial t} \int \psi_{(\vec{r},t)}^* \mathbb{A}_{(\vec{r},t)} \psi_{(\vec{r},t)} d^3 r \\ &= \underbrace{\left\langle \frac{\partial \mathbb{A}_{(\vec{r},t)}}{\partial t} \right\rangle}_{i\hbar} + \int \dot{\psi}_{(\vec{r},t)}^* \mathbb{A}_{(\vec{r},t)} \psi_{(\vec{r},t)} d^3 r + \int \psi_{(\vec{r},t)}^* \mathbb{A}_{(\vec{r},t)} \dot{\psi}_{(\vec{r},t)} d^3 r\end{aligned}$$

In den letzten beiden Integralen ersetze man die Zeitableitung der Wellenfunktion mit Hilfe der Schrödingergleichung:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbb{A} \rangle = \underbrace{\left\langle \frac{\partial \mathbb{A}_{(\vec{r},t)}}{\partial t} \right\rangle}_{i\hbar} + \int \psi_{(\vec{r},t)}^* [\mathbb{H}, \mathbb{A}] \psi_{(\vec{r},t)} d^3 r$$

mit $[\mathbb{H}, \mathbb{A}] = \mathbb{H}\mathbb{A} - \mathbb{A}\mathbb{H}$ und wegen

$$\begin{aligned}-i\hbar\psi &= \mathbb{H}\psi^* \\ -i\hbar\dot{\psi} &= \mathbb{H}\psi\end{aligned}$$

Dabei wurde folgender Zusammenhang benutzt:

$$\int (\mathbb{H}\psi^*) \mathbb{A}\psi d^3 r = \int \psi^* \mathbb{H}(\mathbb{A}\psi) d^3 r$$

wegen

$$\mathbb{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + \mathbf{U}_{(r)}$$

gilt:

$$\begin{aligned}\int \Delta\psi^* \mathbb{A}\psi d^3 r &= \int \psi^* \Delta \mathbb{A}\psi d^3 r \\ \int (\Delta u) v d^3 r &= \int u \Delta v d^3 r + \int [u \vec{\nabla} v - v \vec{\nabla} u] d^3 r\end{aligned}$$

To Do 52 (Formel falsch): groÙe oder kleine u,v?

Und ist somit zeitabhängig, somit gilt:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbb{A} \rangle = \int \psi_{(\vec{r},t)}^* [\mathbb{H}, \mathbb{A}] \psi_{(\vec{r},t)} d^3r$$

Dieser Zusammenhang wird oft in der folgenden Kurzform geschrieben:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \vec{\mathbb{A}} = [\mathbb{H}, \mathbb{A}]$$

Dies ist die sog. Bewegungsgleichung von \mathbb{A} . Wenn \mathbb{H} und \mathbb{A} vertauschbar sind handelt es sich um eine Erhaltungsgröße.

Verschwindet die linke Seite, vertauscht \mathbb{A} also mit \mathbb{H} , so sagt man, dass \mathbb{A} in diesem Falle eine Erhaltungsgröße des Systems beschreibt.

Beispiel $[\mathbb{H}, \mathbb{L}_z]$:⁵

Die Drehimpulskomponente in z-Richtung ist hier¹ eine Erhaltungsgröße.

Im relativistischen Fall gilt die obige Gleichung nur für die z-Komponente des Gesamtdrehimpulsoperators.

$$\vec{\mathbb{J}} = \vec{\mathbb{L}} + \vec{\mathbb{S}}$$

Im folgenden betrachte man ein freies Teilchen, das sich im Potential $\mathbf{U}_{(r)} = 0$, d. h. kräftefrei in z-Richtung bewegt.

Man kann nun die Dirac-Gleichung in diesem Falle mit folgendem Ansatz lösen:

$$\vec{\psi}_{(r)} = \frac{1}{\sqrt{\nu}} \left[c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ikz} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ikz} \right]$$

mit $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$ und $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ wegen

$$V \vec{\psi}_{(r)} d^3r = 1$$

⁵Wenn $\mathbf{U}_{(r)}$ zentra尔斯ymmetrisch ist.

To Do 53 (Formel falsch): Formel überprüfen.

Die Dirac-Gleichung vereinfacht sich im vorliegenden Falle:

$$\mathbf{H}_D \vec{\psi}_{(r)} = (c\bar{a}_3 \mathbf{P}_z + m_0 c^2 \bar{a}_0) \vec{\psi}_{(r)} = \mathbf{E} \vec{\psi}_{(r)}$$

da $\vec{\psi}_{(r)}$ nicht von x und y abhängt.

Hieraus folgt dann

$$\mathbf{H}_D \vec{\psi}_{(r)} = \left[c \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \mathbf{P}_z + \left[m_0 c^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \vec{\psi}_{(r)} = \mathbf{E} \vec{\psi}_{(r)}$$

mit c = Lichtgeschwindigkeit. Mit diesem Ansatz ergibt sich hieraus: ⁶

$$\frac{c\hbar k}{\sqrt{v}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{P}_z \left\{ c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\} e^{ikz} + m_0 c^2 \frac{1}{\sqrt{v}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \left\{ c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\} e^{ikz} = \mathbf{E} \vec{\psi}_{(r)}$$

$(\mathbb{P}_z = e^{ikz} = \hbar k e^{ikz} \text{ wegen } \mathbb{P}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z})$

mit $\sqrt{V} e^{ikz} \rightarrow$

$$c\hbar k \left[c_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right] + m_0 c^2 \left[c_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} - c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right] = \mathbf{E} \left\{ c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}$$

Man erhält hieraus zwei Gleichungen:

$$\begin{aligned} c\hbar c_2 + m_0 c^2 c_1 &= \mathbf{E}_{c1} \\ c\hbar c_1 + m_0 c^2 c_2 &= \mathbf{E}_{c2} \end{aligned}$$

⁶ Anthroposophischer Ansatz!

Oder anders geschrieben:

$$\begin{aligned} c_1(\mathbf{E}m_0c^2) + c_2(-c\hbar k) &= 0 \\ c_1(-c\hbar k) + c_2(\mathbf{E}m_0c^2) &= 0 \end{aligned}$$

Dieses Gleichungssystem hat nur dann eine nichtverschwindende Lösung, wenn die Determinante verschwindet, d. h.:

$$\mathbf{E}^2 - m_0^2 c^4 - \hbar^2 k^2 c^2 = 0$$

oder

$$\mathbf{E}^2 = m_0^2 c^4 + \hbar^2 k^2 c^2$$

Dies ist aber gerade der relativistische Energie-Impuls-Zusammenhang von dem man in der Herleitung der DIRAC-Gleichung ausgegangen war. Man berechne jetzt c_1 und c_2 als Funktion von $\hbar k$. Aus der ersten der beiden obigen Gleichungen folgt:

$$\underbrace{c_1^2 \mathbf{E}_{kin}^2}_{=(\mathbf{E}-m_0c^2)^2} = c_2^2 c_2^2 p^2$$

Aus der Normierungsbedingung folgt:

$$c_1^2 = 1 - c_2^2$$

wenn $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned}
 E_{kin}^2 &= c_2^2 (E^2 - m_0^2 c^4 + E_{kin}^2) \\
 &= c_2^2 \left[\underbrace{(E - m_0 c^2)}_{=K_{kin}} \cdot (E + m_0 c^2) + E_{kin}^2 \right] \\
 &= c_2^2 E_{kin} \left[E + \underbrace{E_{kin} m_0 c^2}_{=E} \right] \\
 &= c_2^2 E_{kin} 2E
 \end{aligned}$$

oder

$$c_2 = \sqrt{\frac{E_{kin}}{2E}}$$

Wenn also $E_{kin} \gg m_0 c^2$, dann wird $E \approx E_{kin}$

$$\lim_{\substack{E_{kin} \rightarrow E \\ \hbar k \gg m_0 c}} c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Für große Impulse werden die Komponenten gleich.

Andererseits erhält man im nichtrelativistischen Grenzfall

$$\hbar k \ll m_0 c$$

bzw.

$$E \approx m_0 c^2$$

oder

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m_0 v^2$$

Abbildung 7.1: Photoelektrischer Effekt in GaAs mit zirkular-polarisiertem Licht

wegen

$$c_2 = \sqrt{\frac{E_{kin}}{2E}} = \sqrt{\frac{\frac{m_0}{2}v}{2m_0c^2}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{v}{c}$$

Polarisierte Elektronen

To Do 54 (Abbildung fehlt):

Man kann jetzt den Erwartungswert des Gesamtdrehimpulses in diesem Zustand eines freien Teilchens untersuchen. Dazu wird der folgende Ausdruck gebildet:

$$\begin{aligned} \langle \vec{J} \rangle &= \int \vec{\psi}_{(r)}^+ \mathbb{J} \vec{\psi}_{(r)} dr^3 \\ &= \underbrace{\int \vec{\psi}_{(r)}^+ \underbrace{\mathbb{L}}_{\mathbb{L}_z = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}} \underbrace{\vec{\psi}_{(r)}}_{\text{Ortsanteil: } e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta}} dr^3}_{=0} + \int \vec{\psi}_{(r)}^+ \mathbb{S} \vec{\psi}_{(r)} dr^3 \end{aligned}$$

To Do 55 (Text überprüfen): Text hier unleserlich, überprüfen.

d. h.

$$\langle \mathbb{J} \rangle = \frac{\hbar}{2} \vec{e}_z \quad (7.18)$$

Hätte man anstelle des obigen Ansatz den folgenden gewählt:

$$\vec{\psi}_{(r)} = \frac{1}{v} \left[c_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ikz} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{ikz} \right]$$

mit $c_1^2 + c_2^2 = 1$ und unverändert $c_2 = \sqrt{\frac{E_{kin}}{2E}}$, so stellt auch dieser Zustand eine Lösung der **Dirac-Gleichung** zu $\mathbf{U}_{(r)} = 0$ dar, aber es ergibt sich

$$\langle \mathbb{J} \rangle = -\frac{\hbar}{2} \vec{e}_z$$

Der Gesamtdrehimpuls eines *freien* Teilchens ist also dem Betrag nach immer gleich $\hbar/2$.

Die Dirac-Gleichung in Näherungsform

Man schreibe zunächst die Gleichung ?? in ihren Komponenten aus:

$$(\mathbf{E} - m_0 c^2 - \mathbb{U}_{(r)}) \psi_1 - c (\mathbb{P}_x - i \mathbb{P}_y) \psi_4 - (\mathbb{P}_z \psi_3) = 0 \quad (7.19)$$

$$(\mathbf{E} - m_0 c^2 - \mathbb{U}_{(r)}) \psi_2 - c (\mathbb{P}_x - i \mathbb{P}_y) \psi_3 - (\mathbb{P}_z \psi_4) = 0 \quad (7.20)$$

$$(\mathbf{E} + m_0 c^2 - \mathbb{U}_{(r)}) \psi_3 - c (\mathbb{P}_x - i \mathbb{P}_y) \psi_2 - (\mathbb{P}_z \psi_3) = 0 \quad (7.21)$$

$$(\mathbf{E} + m_0 c^2 - \mathbb{U}_{(r)}) \psi_4 - c (\mathbb{P}_x - i \mathbb{P}_y) \psi_1 - (\mathbb{P}_z \psi_2) = 0 \quad (7.22)$$

Man führt jetzt zur Abkürzung $\mathbf{E}' = \mathbf{E} - m_0 c^2$ ein und fasst die obigen vier Gleichungen zusammen:

$$(\mathbf{E}' \mathbf{U}_{(r)}) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = c \vec{\sigma} \vec{\mathbb{P}} \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (7.23)$$

$$(2m_0 c^2 + \mathbf{E}' \mathbf{U}_{(r)}) \begin{pmatrix} P s i_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = c \vec{\sigma} \vec{\mathbb{P}} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (7.24)$$

(7.25)

Man kann nun folgendes voraussetzen:

$$2m_0 c^2 + \mathbf{E}' \mathbf{U}_{(r)} \approx 2m_0 c^2$$

wegen $\mathbf{E}' = \mathbf{E} - m_0 c^2$ und $2m_0 c^2 \gg E' \mathbf{U}_{(r)}$.

Man beachte hierbei, dass für Elektronen gilt:

$$2m_0^2 \approx 1 \text{ MeV} = 10^6 \text{ eV}$$

Die obige Voraussetzung ist bei Atomen nur für Abstände des betreffenden Elektrons $< 10^{-3} r_b$ ⁷ vom Atomkern *nicht* mehr erfüllt.

⁷ r_b : Bohrscher-Radius

Unter dieser Voraussetzung kann dann Gl. 7.25 in folgender Form geschrieben werden:

$$\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2m_0c} \sigma \mathbb{P} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

Dabei wurde bereits \mathbb{P} durch $\vec{\mathbb{P}} = \mathbb{P} - e\vec{A}_{(o)}$ ersetzt, um den allgemeinen Fall bei Anwesenheit eines Magnetfeldes schon mit erfassen zu können. Man eliminierte mit Hilfe der obigen Gleichung $\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$ aus Gl. 7.24:

$$(\mathbf{E}' - \mathbf{U}_{(r)}) \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \underbrace{\frac{1}{2m_0} (\vec{\sigma} \vec{\mathbb{P}}) (\vec{\sigma} \vec{\mathbb{P}})}_{= \frac{e\hbar}{2m_0} \sigma B} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (7.26)$$

Dabei ist $\frac{e\hbar}{2m_0}$ das BOHRsche Magneton.

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a}) \cdot (\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \bar{\bar{1}} (\vec{a} \cdot \vec{b}) + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$$

Dabei sind \vec{a} und \vec{b} zwei beliebige Vektoren, die eine ebene Fläche aufspannen. In diese kann man ohne Beschränkung der Allgemeinheit die x/y -Ebene legen und außerdem die z -Achse mit der Richtung von \vec{a} identifizieren.

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ a_z \end{pmatrix}$$

und

$$b_y = 0$$

Man erhält dann

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \cdot \vec{a}) \cdot (\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) &= \bar{\bar{\sigma}}_z a_z (\bar{\bar{\sigma}}_z b_z + \bar{\bar{\sigma}}_x b_x) \\ &= \bar{\bar{1}} \underbrace{(a_z b_z)}_{\text{hier speziell } (\vec{a} \cdot \vec{b})} + i \bar{\bar{\sigma}}_y \underbrace{a_z b_x}_{= (\vec{a} \times \vec{b})_y} \\ &\quad \text{hier speziell: } = i \vec{\sigma} (\vec{a} \times \vec{b}) \end{aligned}$$

wegen $\bar{\sigma}_z \bar{\sigma}_x = i\bar{\sigma}_y$.

Identifiziert man \vec{a}, \vec{b} mit \mathbb{P} so folgt aus Gl. ??:

$$(\vec{\sigma}\mathbb{P})(\vec{\sigma}\mathbb{P}) = \bar{\mathbb{1}}\vec{\mathbb{P}}^2 + i\vec{\sigma}(\mathbb{P} \times \mathbb{P})$$

Nun ist

$$\begin{aligned} (\vec{\mathbb{P}} \times \mathbb{P}) &= (\vec{\mathbb{P}} - e\vec{A}) \times (\vec{\mathbb{P}} e\vec{A}) \\ &= \vec{\mathbb{P}} \times \vec{\mathbb{P}} - ee\vec{A} \times \vec{\mathbb{P}} - e \times \vec{\mathbb{P}} \times \vec{A}e^2 \underbrace{(\vec{A} \times \vec{A})}_{=0} = 0 \end{aligned}$$

bzw.

$$(\vec{\mathbb{P}} \times \mathbb{P}) \vec{\psi} = (-i\hbar) \cdot (-i\hbar) \underbrace{[\vec{\nabla} \times \vec{\nabla}]}_{=\text{rot } \vec{\psi} = 0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

wegen $\vec{\nabla}(\vec{a}) = \text{rot } \vec{a}$

Man beachte ferner:

$$\begin{aligned} \vec{\mathbb{P}} \times \vec{A} \vec{\psi} &= \underbrace{(\mathbb{P} \times \vec{A}) \psi}_{=-i\hbar \underbrace{\vec{\nabla} \times \vec{A}}_{=\text{rot } \vec{A} = \vec{B}}} + \underbrace{(\vec{\mathbb{P}} \vec{\psi}) \times \vec{A}}_{=-\vec{A} \times \vec{\mathbb{P}} \vec{\psi}} \end{aligned}$$

Also wird

$$\frac{1}{2m_0} (\vec{\sigma} \vec{\mathbb{P}}') \cdot (\vec{\sigma} \mathbb{P}') = \bar{\mathbb{1}} \cdot \frac{\mathbb{P}'^2}{2m_0} - \frac{e\hbar}{2m_0} \vec{\sigma} \vec{B}$$

Führt man diesen Ausdruck in 7.26 ein, so lässt sich das Ergebnis wie folgt schreiben:

$$(\mathbb{H} - \mu_B \vec{\sigma} \vec{B}) \vec{\psi}_{(r)} = \mathbf{E}' \vec{\psi}_{(r)} \quad (7.27)$$

mit

$$\mathbb{H} = \frac{1}{2m_0} \mathbb{P}'^2 + \mathbf{U}_{(r)}$$

und

$$\vec{\mathbb{P}}' = \mathbb{P} - e\vec{A}_{(r)}$$

Ferner wurde Gl. ?? übernommen:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0} \quad (\text{Bohrsche-Magneton})$$

Die Gleichung 7.27 ist offensichtlich indentisch mit der PAULI-Gleichung (7.16). Dort musste die Größe des magnetischen Momentes allerdings als bekannt vorausgesetzt werden.

Man kann die bisherige Näherungsform

$$2m_0c^2 + \mathbf{E}' - \mathbf{U}_{(r)} \approx 2m_0c^2$$

etwas weitertreiben in der Form

$$2m_0c^2 + \mathbf{E}' - \mathbf{U}_{(r)} = 2m_0c^2 \left(1 + \frac{\mathbf{E}' - \mathbf{U}_{(r)}}{2m_0c^2} \right)$$

unter der Voraussetzung

$$\frac{\mathbf{E}' - \mathbf{U}_{(r)}}{2m_0c^2} \ll 1$$

was in einem Atom wiederum bis auf einen Abstand $< 10^{-3}r_B$ vom Kernort gewährleistet ist.

Man erhält dann für Gl. 7.25:

$$\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2m_0c} \left(1 + \frac{\mathbf{E}' - \mathbf{U}_{(r)}}{2m_0c^2} \right) (\vec{\sigma} \vec{\mathbb{P}}) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

8

Dies in Gl. 7.24 eingesetzt liefert gegenüber dem zuvor berachteten Ausdruck auf der rechten Seite einen Zusatzterm.

$$(\mathbf{E}' - \mathbf{U}_{(r)}) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2m_0c} \left[(\vec{\sigma}\vec{\mathbb{P}}')(\mathbb{P}'\vec{\sigma}) - (\vec{\sigma}\vec{\mathbb{P}}') \frac{\mathbf{E}' - \mathbf{U}_{(r)}}{2m_0c^2} (\vec{\sigma}\vec{\mathbb{P}}') \right] \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (7.28)$$

Nun war

$$(\vec{\sigma}\vec{\mathbb{P}}')(\mathbb{P}'\vec{\sigma}) = \bar{1} \frac{\mathbb{P}^2}{2m_0} - \mu_B \vec{\sigma} \vec{B}$$

Da der Gesamtausdruck $(\vec{\sigma}\vec{\mathbb{P}}') \frac{\mathbf{E}' - \mathbf{U}_{(r)}}{2m_0c^2} (\vec{\sigma}\vec{\mathbb{P}}')$ nur in Kernnähe merklich von Null verschieden sein kann und dort der Effekt von $\mathbf{U}_{(r)}$ viel größer ist als der von $A_{(r)}$ ⁹, so kann man in guter Näherung \mathbb{P}' durch \mathbb{P} ersetzen. Dann wird:

$$(\vec{\sigma}\mathbb{P}) \frac{\mathbf{E}' - \mathbf{U}_{(r)}}{2m_0c^2} (\vec{\sigma}\vec{\mathbb{P}}) = \frac{\mathbf{E}'}{2m_0c^2} \underbrace{(\vec{\sigma}\vec{\mathbb{P}})(\vec{\sigma}\mathbb{P})}_{=\mathbb{P}^2} - \frac{1}{2m_0c^2} (\vec{\sigma}\vec{\mathbb{P}}) \mathbf{U}_{(r)} (\vec{\sigma}\vec{\mathbb{P}})$$

Nebenrechnung 1 (Nebenrechnung):

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma}\vec{\mathbb{P}}) \mathbf{U}_{(r)} (\vec{\sigma}\vec{\mathbb{P}}) &= -i\hbar (\vec{\sigma}\vec{\nabla} \mathbf{U}_{(r)}) (\vec{\sigma}\vec{\mathbb{P}}) \\ &= -i\hbar \bar{1} \vec{\nabla} \mathbf{U} \mathbb{P} - i^2 \sigma \hbar (\vec{\nabla} \mathbf{U} \times \mathbb{P}) \end{aligned}$$

Wegen $\vec{\nabla} \mathbf{U} = -e\vec{\mathbf{E}}$ ergibt sich somit

$$(\vec{\sigma}\vec{\mathbb{P}}) \mathbf{U}_{(r)} (\vec{\sigma}\vec{\mathbb{P}}) = -\vec{\sigma} e \hbar (\vec{\mathbf{E}} \times \vec{\mathbb{P}}) - i \hbar (\vec{\nabla} \mathbf{U} \mathbb{P})$$

Die Gleichung 7.28 kann dann auf die folgende Form gebracht werden

$$\mathbf{E}' \left(1 + \frac{\mathbb{P}^2}{4m_0^2 c^2} \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \left[\frac{1}{2m_0} \vec{\mathbb{P}}^2 + \mathbf{U}_{(r)} - \mu_B \vec{\sigma} \vec{B} + \frac{(\vec{\sigma}\mathbb{P}) \mathbf{U}_{(r)} (\vec{\sigma}\vec{\mathbb{P}})}{4m_0^2 c^2} \right] \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (7.29)$$

⁸Wegen $\frac{1}{1+q} \approx 1 - q$ für $q \ll 1$.

⁹Wenn das zugehörige Magentfeld ein durch $A_{(r)}$ realisiertes äußeres Feld darstellt.

Auf diese Gleichung wende man den Operator $\left(1 - \frac{\mathbb{P}}{4m_0^2 c^2}\right)$ an und vernachlässige alle Terme die $1/c^2$ in höherer als 1. Ordnung enthalten.

$$\mathbf{E}' \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \left[\left(1 - \frac{\mathbb{P}}{4m_0^2 c^2}\right) \left(\frac{1}{2m_0} \vec{\mathbb{P}}^2 + \mathbf{U}_{\text{(r)}} - \mu_b \vec{\sigma} \vec{B} + \frac{(\vec{\sigma} \mathbb{P}) \mathbf{U}_{\text{(r)}} (\vec{\sigma} \vec{\mathbb{P}})}{4m_0^2 c^2} \right) \right] \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (7.30)$$

Diese Gleichung hat die Bauweise

$$\mathbb{H} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \mathbf{U}' \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (7.31)$$

Es ist jetzt zu beachten, dass der **Bispinor (Weyl-Gleichung)**

$$\vec{\psi} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix}$$

auf 1 normiert ist.

$$\sum_{i=1}^4 \int |\psi_{i\text{(r)}}|^2 d^3r = 1$$

Für die in Gl. 7.30 auftretenden Komponenten ψ_1 und ψ_2 gilt demnach *nicht*:

$$\int [|\psi_i|^2 + |\psi_i|^2] d^3r = 1$$

Man führt deshalb einen renormierten **Spinor**

$$\vec{\psi}_0 = \begin{pmatrix} \psi_{1\text{(r)}}^0 \\ \psi_{2\text{(r)}}^0 \end{pmatrix}$$

mit folgender Eigenschaft ein:

$$\int \vec{\psi}_0^+ \vec{\psi}_0 d^3r = 0 = \sum_{i=1}^2 |\psi_{i\text{(r)}}^0|^2$$

Man führe $\psi_{(r)}^0$ versuchsweise über folgende Vorschrift ein:

$$\begin{pmatrix} \psi_1^0 \\ \psi_2^0 \end{pmatrix} = \underbrace{\mathbb{O} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}}_{\vec{\psi} = \mathbb{O}^{-1} \vec{\psi}_0}$$

mit

$$\left. \begin{array}{l} \mathbb{O} = 1 + \frac{\mathbb{P}^2}{8m_0^2 c^2} \\ \mathbb{O}^{-1} \approx 1 - \frac{\mathbb{P}^2}{8m_0^2 c^2} \end{array} \right\} \text{hermitesche Operatoren}$$

Damit bekommt man

$$\begin{aligned} \int \vec{\psi}^+ \vec{\psi} d^3 r &= \int (\mathbb{O}^{-1} \vec{\psi}_0^+) \cdot (\mathbb{O}^{-1} \vec{\psi}_0) dr^3 \\ &= \int \vec{\psi}_0^+ \mathbb{O}^{-2} \vec{\psi}_0 dr^3 \\ &\approx \int \vec{\psi}_0^+ \left(1 - \frac{\mathbb{P}}{2m_0 c^2} \right) \vec{\psi}_0 dr^3 \Rightarrow \left(\frac{\mathbb{P}}{2m_0 c^2} \rightarrow \text{vernachlässigt} \right) \end{aligned}$$

To Do 56 (Formel falsch): Hier fehlt noch etwas in der Formel

$$1 - \frac{\langle \mathbb{P} \rangle}{2m_0 c^2} = N \quad (\text{Norm des Spinors})$$

$$= \int (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) dr^3$$

Nebenrechnung 2 (Zur Rechtfertigung des Renormierungsansatzes):

Sei $\vec{\psi}_{12} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ und entsprechend $\vec{\psi}_{34} = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$

dann soll sein:

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \sqrt{N} \underbrace{\begin{pmatrix} \psi_1^0 \\ \psi_2^0 \end{pmatrix}}_{=\psi_0}$$

mit

$$\int \left(|\psi_{1(r)}^0|^2 + |\psi_{2(r)}^0|^2 \right) dr^3 = 1$$

In der ursprünglichen Näherung

$$2m_0c^2 + \mathbf{E}' - \mathbf{U}_{(r)} \approx 2m_0c^2$$

galt

$$\begin{aligned} \vec{\psi}_{34} &= \frac{1}{2m_0c} (\vec{\sigma} \vec{\mathbb{P}}) \psi_{12} \\ &= \frac{1}{2m_0c} (\vec{\sigma} \vec{\mathbb{P}}) \sqrt{N} \psi_{12} \end{aligned}$$

Daraus folgt:

$$\vec{\psi}^+ \vec{\psi} = \left(\underbrace{\sqrt{N} \psi_{12}^{+0}}_{=\vec{\psi}_{12}^+}, \underbrace{\sqrt{N} \vec{\mathbb{P}}^* \vec{\psi}_{12}^{0+} \frac{\bar{\sigma}^+}{2m_0c}}_{\vec{\psi}_{34}^+} \right) \begin{pmatrix} \sqrt{N} \vec{\psi}_{12}^0 \\ \sqrt{N} \bar{\vec{f}} \vec{\psi}_{12}^0 \end{pmatrix}$$

mit

$$\vec{\psi}^+ \vec{\psi} = (\vec{\psi}_{12}^+, \vec{\psi}_{34}^+) \begin{pmatrix} \vec{\psi}_{12}^0 \\ \vec{\psi}_{34}^0 \end{pmatrix}$$

und

$$\bar{\vec{f}} = \frac{1}{2m_0c} (\vec{\sigma} \vec{\mathbb{P}})$$

Dabei wurde berücksichtigt: $(\bar{a}\vec{c})^+ = \vec{c})^+ \bar{a}^+$

Also wird

8 Quantenmechanik nichtrelativistischer Mehrteilchensysteme

To Do 57 (Kapitel / Section fehlt noch.):

8.1 Die Schrödinger-Gleichung für N wechselwirkende nichtrelativistische Teilchen

To Do 58 (Kapitel / Section fehlt noch.):

8.2 N nichtwechselwirkende Teilchen

To Do 59 (Kapitel / Section fehlt noch.):

8.3 Das Pauli-Prinzip

To Do 60 (Kapitel / Section fehlt noch.):

8.4 Das Hartreesche Näherungsverfahren zur Bestimmung der N-Teilchen-Wellenfunktion

To Do 61 (Kapitel / Section fehlt noch.):

8.5 Antisymmetrisierung der Wellenfunktion. Slater-Determinante und Entwicklungen nach Slater-Determinanten (CI-Entwicklung)

To Do 62 (Kapitel / Section fehlt noch.):

8.6 Das Näherungsverfahren von Hartree und Fock

To Do 63 (Kapitel / Section fehlt noch.):

8.7 Zusammenhang zwischen der Gesamtenergie und den Einteilchenenergien

To Do 64 (Kapitel / Section fehlt noch.):

8.8 Das Theorem von Koopmans

To Do 65 (Kapitel / Section fehlt noch.):

9 Störungstheorie

To Do 66 (Kapitel / Section fehlt noch.):

9.1 Diracsche Störungstheorie. Fermis „Goldene Regel“ der Quantenmechanik

To Do 67 (Kapitel / Section fehlt noch.):

9.2 Zeitabhängige Störungsrechnung 2. Ordnung

To Do 68 (Kapitel / Section fehlt noch.):

9.3 Schrödingersche (zeitunabhängige) Störungstheorie

To Do 69 (Kapitel / Section fehlt noch.):

9.4 Zeitunabhängige Störungstheorie bei Anwesenheit von Entartungen

To Do 70 (Kapitel / Section fehlt noch.):

9.5 Aufspaltung von zwei miteinander entarteten Zuständen in einem Störpotential

To Do 71 (Kapitel / Section fehlt noch.):

10 Das statistische Atommodell von Thomas und Fermi

To Do 72 (Kapitel / Section fehlt noch.):

10.1 Die Thomas-Fermi-Dirac-Methode

To Do 73 (Kapitel / Section fehlt noch.):

11 Das Periodensystem der Elemente

To Do 74 (Kapitel / Section fehlt noch.):

11.1 Die Greensche-Funktion einer linearen Differentialgleichung 2. Ordnung und das Additionstheorem der Kugelflächefunktionen

To Do 75 (Kapitel / Section fehlt noch.):

11.2 Der Schalenaufbau der Atome

To Do 76 (Kapitel / Section fehlt noch.):

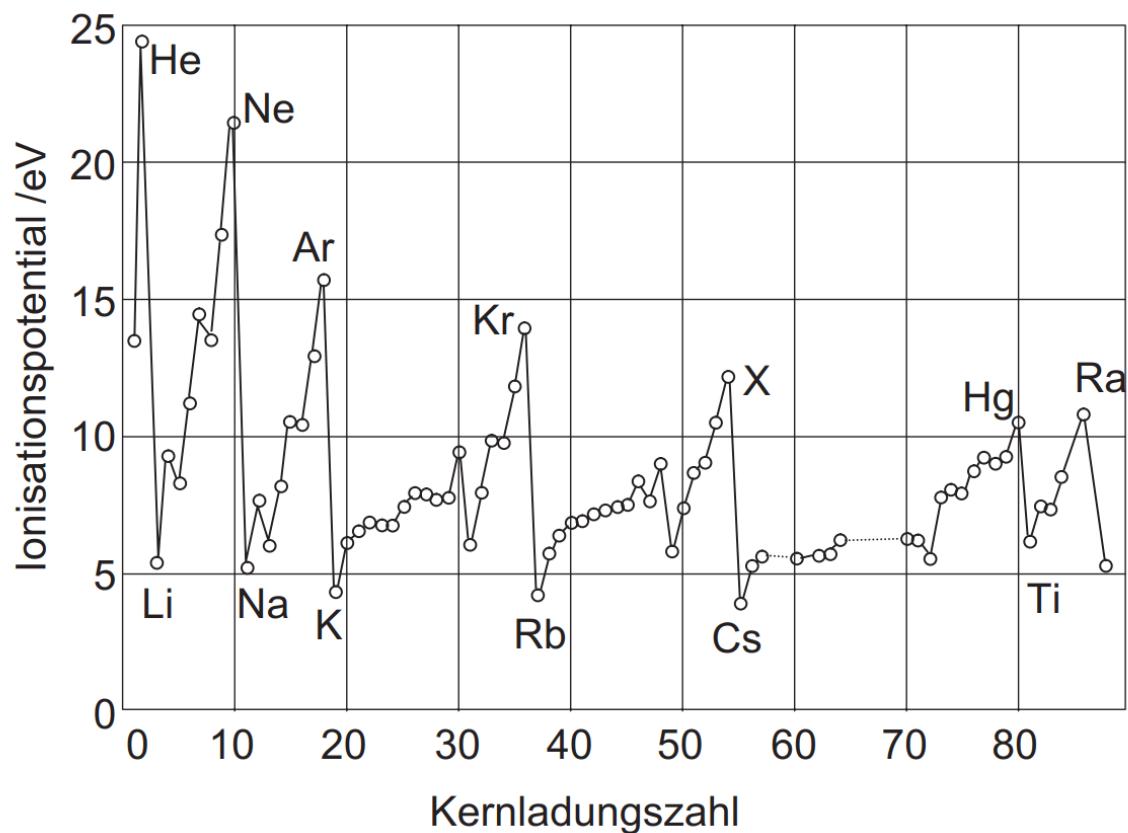


Abbildung 11.1: Ionisierungsenergien.

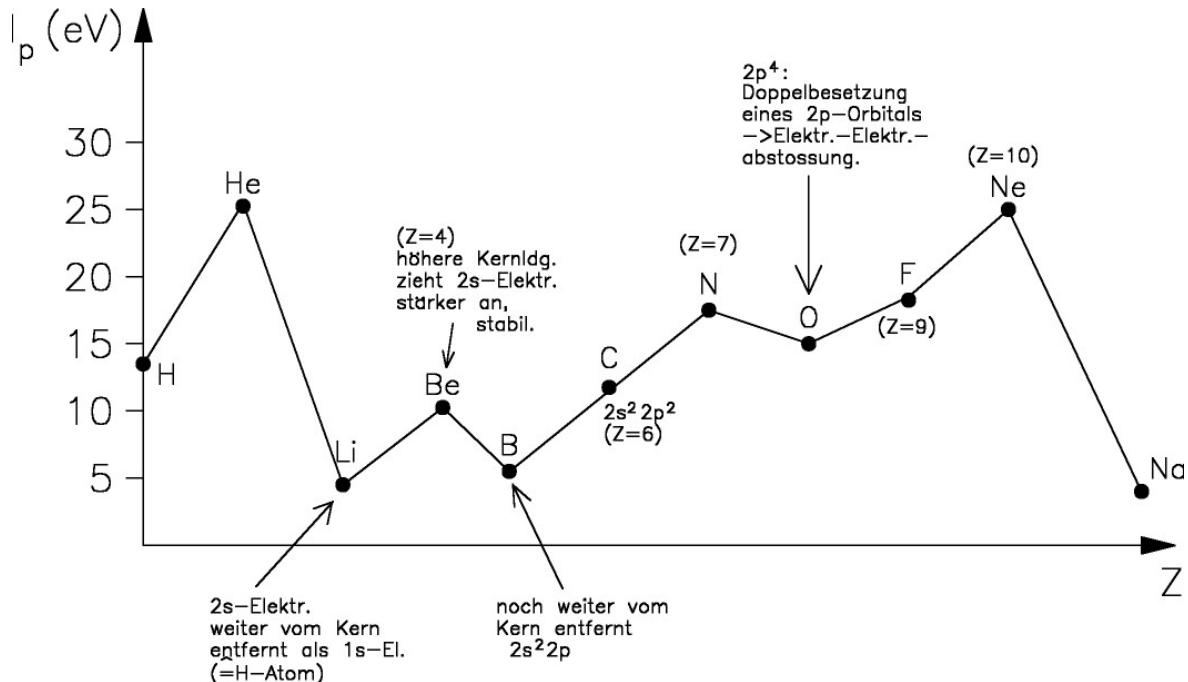


Abbildung 11.2: Die Ionisationspotentiale I_p hängen stark von der Elektronenanzahl und ihrer Konfiguration bzw. der Kernladungszahl Z (Ordnungszahl) ab.

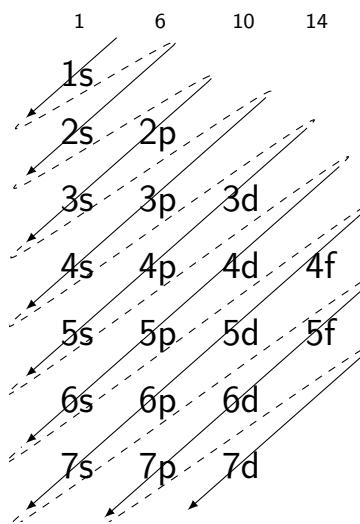


Abbildung 11.3: Schema zur Bestimmung der Elektronenkonfiguration der Elemente.

12 Elastische Streuung (Potentialstreuung) von Teilchen an Streuzentren

To Do 77 (Kapitel / Section fehlt noch.):

12.1 Die Bornsche Reihe

To Do 78 (Kapitel / Section fehlt noch.):

12.2 Entwicklung einer ebenen Welle nach Kugelwellen steigender Ordnung

To Do 79 (Kapitel / Section fehlt noch.):

12.3 Die Faxen-Holtsmark-Formel für die Streuung eines Teilchens an einem Potential endlicher Reichweite

To Do 80 (Kapitel / Section fehlt noch.):

12.4 Totaler und differentieller Wirkungsquerschnitt eines Streupotentials

To Do 81 (Kapitel / Section fehlt noch.):

12.5 Streuphasen

To Do 82 (Kapitel / Section fehlt noch.):

12.6 Streuung am Yukawa-Potential — Die Rutherford-Formel

To Do 83 (Kapitel / Section fehlt noch.):

13 Die Feinstruktur der optischen Spektren

To Do 84 (Kapitel / Section fehlt noch.):

13.1 Der Effekt der Spin-Bahnkopplung — Optische Dubletts

To Do 85 (Kapitel / Section fehlt noch.):

13.2 Der anormale Zeeman-Effekt

To Do 86 (Kapitel / Section fehlt noch.):

13.3 Der Paschen-Back-Effekt

To Do 87 (Kapitel / Section fehlt noch.):

14 Phänomeologische Physik des Vakuums

14.1 Einleitung

Die Begriffe *Nichts*, *Leere* und *Vakuum* lassen gewöhnlich an einen absolut leeren Raum denken. Es hat sich jedoch herausgestellt, dass das Vakuum ein komplexes und unerwartetes Verhalten aufweist. Es stellt als einen Zustand minimaler Energie vor, in dem es Fluktuationen des elektromagnetischen Feldes gibt.

Um den Begriff des Vakuums näher zu definieren, muss man zunächst zwischen folgenden Definitionen unterscheiden:

- *technische Vakuum*
- *klassische Vakuum*
- *physikalische Vakuum*

Technisches Vakuum Klassisches Vakuum	Physikalisches Vakuum
Alles entfernt, was machbar ist.	Alles entfernt, was physikalisch machbar ist.
Alles kann aus einem Raum entfernt werden.	Unter der modernen Auffassung ist eine Region des Vakuums jedoch alles andere als leer oder eigenschaftslos. Es hat eine komplexe Struktur, die mit keinem denkbaren Mittel beseitigt werden kann.

Es gibt hier einen subtilen Unterschied zwischen den beiden Definitionen. Im weiteren wird hier auf die physikalische Definition des Vakuum eingegangen. Das physikalische Vakuum wird durch den *Vakuumfluktuationen* beschränkt, die aus Sicht der Stochastischen Mechanik die Ursache für die Quanteneigenschaften sind.

14.2 Exkurs — Klassisches Vakuum

Aristoteles und seine Anhänger glaubten, dass keine Region des Raums völlig leer sein kann leer sein. Diese Vorstellung, dass *die Natur ein Vakuum verabscheut*, wurde in der wissenschaftlichen Revolution des 17. Jahrhunderts verworfen; ironischerweise hat die moderne Physik zu einer ähnlichen Auffassung gelangt. Heute besteht kein Zweifel daran, dass ein Region des Raums von gewöhnlicher Materie entleert werden kann, zumindest im Prinzip.¹

14.2.1 Die Entdeckung des Vakuums

Die Lehre des Aristoteles, wonach ein Vakuum physikalisch unmöglich ist, wurde im 17. Jahrhundert überwunden. Die entscheidende Entwicklung war die Erfindung des Barometers im Jahr 1644 durch Evangelista Torricelli, der Sekretär von Galilei gewesen war. Torricelli füllte Quecksilber in ein Glasrohr, das an einem Ende verschlossen war, und drehte das Rohr dann um, wobei das offene Ende in einem mit Quecksilber gefüllten Gefäß stand.

Die Flüssigkeitssäule fiel bis zu einer Höhe von etwa 30 Zoll über dem Quecksilberspiegel im Gefäß und hinterließ am oberen Ende des Rohrs einen Raum. Der Raum war eindeutig leer von sichtbarer Materie; Torricelli schlug vor, dass er auch frei von Gas war und somit eine Vakuumregion darstellte. Es entbrannte eine lebhafte Kontroverse zwischen den Anhängern der aristotelischen Auffassung und denjenigen, die glaubten, Torricelli habe tatsächlich ein Vakuum erzeugt. Einige Jahre später leitete Blaise Pascal eine Reihe von genialen Experimenten, die alle darauf abzielten, Torricellis Hypothese zu bestätigen.

In den folgenden Jahrzehnten hatten Experimente mit dem Vakuum eine große Konjunktur. Am bekanntesten ist der Versuch des Magdeburger Bürgermeisters Otto von Guericke, der aus zwei kupfernen Halbkugeln eine Weltkugel baute und den Raum darin evakuierte. Zwei Gespanne mit acht Zugpferden waren nicht in der Lage, die Halbkugeln zu trennen. Andere Experimente dieser Zeit waren weniger spektakulär, aber vielleicht aufschlussreicher. Sie führten zum Beispiel zu der Entdeckung, dass ein Vakuum zwar Licht, aber keinen Schall überträgt.

Die Magdeburger Halbkugeln

Die Magdeburger Halbkugeln, die 1654 von Otto von Guericke gebaut wurde, bewiesen die Existenz des Vakuums. Als die Halbkugeln zusammengesetzt wurden und die Luft herausgezogen wurde, konnten zwei Gespanne mit acht Zugpferden sie nicht trennen. Der Apparat befindet sich heute im Deutschen Museum in München.

¹aus: Scientific American Magazine, Aug. 1985, pp70-78 by Timothy H. Boyer

14.3 Physikalisches Vakuum

Das physikalischen Vakuum ist, zumindest auf der Ebene der Elementarteilchen, nicht leer. Selbst wenn alle Materie und Wärmestrahlung aus einer Region des Raumes entfernt wurden aus einer Region des Raums entfernt wurden, bleibt das Vakuum der klassischen Physik gefüllt mit einem ausgeprägten Muster von elektromagnetischen Feldern.

Die Quantenfluktuationen sind hierin ein Werden und Vergehen von Elementarteilchen und Energiequanten – solange Energie und Lebensdauer dieser *virtuellen Teilchen* ein bestimmtes Maß nicht überschreiten. So können sich beispielsweise Photonen oder Paare aus einem Elektron und dessen Antiteilchen, dem Positron, kurzzeitig bilden und anschließend wieder verschwinden.

Heutzutage definieren Physiker das Vakuum als das, was in einer Region des Raums übrig bleibt, wenn sie von allem befreit wurde, was mit experimentellen Mitteln entfernt werden kann. Das Vakuum ist die experimentell erreichbare Leere. Ein erster Schritt zur Schaffung eines Vakuumbereichs besteht natürlich darin, alle sichtbare Materie, wie Feststoffe und Flüssigkeiten, zu entfernen.

Auch Gase müssen entfernt werden. Wenn alle Materie entfernt wurde, ist der Raum jedoch nicht leer, sondern bleibt mit elektromagnetischer Strahlung gefüllt. Ein Teil der Strahlung ist thermisch und kann durch Abkühlung entfernt werden, aber ein anderer Teil der Strahlung hat einen subtileren Ursprung. Selbst wenn die Temperatur des Vakuums auf den absoluten Nullpunkt gesenkt werden könnte, würde ein Muster fluktuierender elektromagnetischer Wellen bestehen bleiben. Diese Reststrahlung ist ein inhärentes Merkmal des Vakuums, das kann nicht unterdrückt werden.

Zur grundlegenden Erläuterung des Vakumbegriffs in der Stochastischen Mechanik werden im folgenden das technische Vakuum und das physikalische Vakuum erläutert.

14.3.1 Vakuumfluktuationen

Das (quantenmechanische) Vakuum kann formal auch als Grundzustand des elektromagnetischen Feldes aufgefasst werden (siehe auch Abschnitt 17.1.3). In Zuständen des elektrischen Feldes mit keinem Photon (Photonenzahl $N = 0$) ist der Erwartungswert der elektrischen Feldstärke:

$$\langle E \rangle = 0$$

Allerdings sind mit diesem Mittelwert immer Schwankungen des elektrischen Feldes verbunden, so dass für den gilt:

$$\langle E^2 \rangle \neq 0$$

Experimentelle Nachweise und Vorhersagen

Vakuumfluktuationen haben eine Reihe von nachweisbaren Effekten, die auch experimentell nachgewiesen werden konnten:

Spontane Emission : Sie sind für spontane Emission von Photonen bei angeregten Zuständen von Atomen verantwortlich.

Casimir-Effekt : Dieser sorgt dafür, dass sich gegenüberstehende Metallplatten gegenseitig anziehen (CASIMIR-Effekt, [?]). Das zwischen den Metallplatten eingeschlossene Vakuum kann Energie verlieren, indem es die beiden Platten einander annähert.

Sie sind die Ursache für Van-der-Waals-Kräfte in Molekülen und zwischen Resonator- Wänden.

Lamb-Verschiebung : Es gibt bestimmte, sehr kleine Verschiebungen von Energieniveaus in Atomen gegenüber mit einem einfacheren Modell gerechneten Werten, die so genannte Lamb-Shift. Sie lässt sich qualitativ auf Vakuumfluktuationen zurückführen. Zusammen mit verwandten Erscheinungen, wie der "Vakuumpolarisation", können sie die Lamb-Shift quantitativ mit sehr hoher Präzision erklären. Ein Modell für die Vakuumpolarisation besagt, dass ein Photon kurzzeitig („virtuell“) ein Elektron-Positron-Paar erzeugen kann, das sofort wieder vernichtet wird unter Erzeugung eines Photons. Auch hier fluktuiert also das elektromagnetische Feld durch die Photonenzahl. Siehe hierzu auch Abb. 14.3.1.

Nullpunktsenergie : (Tbd)

Delbrück-Streuung : (Tbd)

Noch nicht bestätigte Effekte:

Hawking-Strahlung : Am Ereignishorizont eines schwarzen Loches entstehen durch Vakuumfluktuationen virtuelle Teilchen, die durch das starke Gravitationsfeld getrennt werden. Dadurch kommt es zur sogenannten Hawkingstrahlung, die thermischer Natur ist und zu einer langfristigen Verdampfung von schwarzen Löchern führt.

Unruh-Effekt : (Tbd)

Scharnhorst-Effekt : (tbd)

Schwinger-Effekt : (tbd)

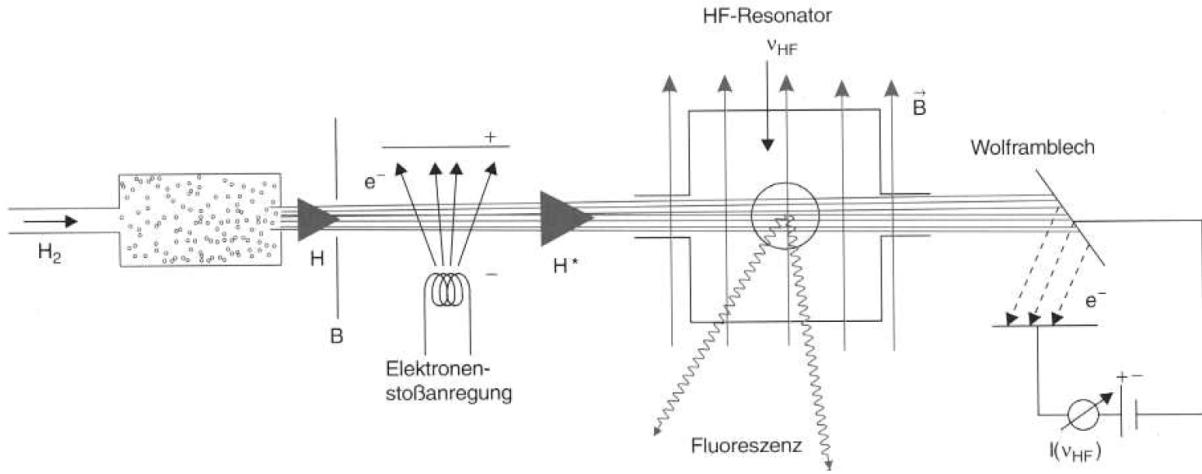


Abbildung 14.1: Experimentelle Anordnung zur Bestimmung der Lamb-Verschiebung.

Dunkle Materie und Vakuumfluktuationen

Eine Frage, die sich im Zusammenhang sofort aufdringt ist, ob die Vakuumfluktuationen und die in diesem Zusammenhang postulierten virtuellen Partikel für die sog. Dunkle Materie ursächlich sein können. Diese Idee ist zunächst sehr verlockend, führt aber bisher in eine Sackgasse.

Die Energiedichte nach der Quantenfeldtheorie berechnet sich nach:

$$\langle \mathbf{E} \rangle_{QFT} = - \int_0^{M_{pl}} \frac{1}{2} \frac{4\pi k^2}{(2\pi)^3} \sqrt{k^2 + m^2} dk \approx -1,4 \cdot 10^{128} \text{ GeV/m}^3$$

Aus kosmologischen Untersuchungen ergibt sich hingegen:

$$\langle \mathbf{E} \rangle_{COSM} \approx (-4,1 \pm 0,5) \text{ GeV/m}^3 \quad (14.1)$$

$$\langle \mathbf{E} \rangle_{QFT} = 10^{128} \cdot \langle \mathbf{E} \rangle_{COSM} \quad (14.2)$$

Diese Werte weichen derart voneinander ab, so dass die Vakuumfluktuationen als Ursache für die dunkle Materie auszuschließen sind.

Nullpunktstrahlung

Die Vakuumerzeugung vollzog sich historisch geshen in Etappen, die der historischen Entwicklung der Ideen über das Vakuum entsprechen. Im 17. Jahrhundert dachte man, man könne ein völlig leeres Raumvolumen schaffen, indem man alle Materie und insbesondere alle Gase entfernt. Im späten 19. Jahrhundert wurde deutlich, dass eine solche Region immer noch Wärmestrahlung enthält, aber es schien die Strahlung durch Abkühlung beseitigt werden könnte. Seitdem haben sowohl Theorie als auch Theorie und Experiment gezeigt, dass es im Vakuum nicht-thermische Strahlung gibt, und sie würde selbst dann bestehen bleiben, wenn die Temperatur auf den absoluten Nullpunkt gesenkt werden könnte. Sie wird als Nullpunktsstrahlung bezeichnet.

14.3.2 Klassische Theorie der Hohlkörperstrahlung

Die zur Beschreibung des thermischen Spektrums erforderliche mathematische Funktion wurde von Max Planck im Jahr 1900 vorgeschlagen. Planck betonte, dass ein Verständnis der Wärmestrahlung die Einführung einer neuen fundamentalen Konstante erfordere, die heute als Plancksche Konstante bezeichnet wird, mit einem Wert von:

$$6,26 \times 10^{-27} \text{Erg-Sekunde}$$

Im Zuge seiner Bemühungen um die Erklärung seiner Funktion für das thermische Spektrum zu erklären, begründete Planck die Quantentheorie. Der Beginn der Quantenphysik, markierte jedoch nicht das Ende der Geschichte der klassischen Physik.

Der Vorschlag von Stefan und Boltzmann, dass die Gesamtenergiedichte der Wärmestrahlung proportional zur vierten Potenz der Temperatur ist Potenz der Temperatur proportional ist, bedeutet, dass die Energiedichte bei einer Temperatur von absolutem Null fällt. Die Wärmestrahlung verschwindet einfach bei einer Temperatur von Null. Die Möglichkeit, jegliche Wärmestrahlung zu eliminieren, führte zu einer Konzeption des klassischen Vakuums, das eine Erweiterung der Auffassung des 17. Jahrhunderts war. Ein perfektes Vakuum war immer noch eine völlig leere Region des Raums, aber um diesen Zustand zu erreichen musste man nicht nur alle sichtbare Materie und alles Gas, sondern auch alle elektromagnetische Strahlung. Die letzte Anforderung konnte im Prinzip erfüllt werden, indem Abkühlung der Region auf den absoluten Nullpunkt.

Diese Konzeption des Vakuums in der klassischen Physik wurde in der fundamentalen physikalischen Theorie der damaligen Zeit, die heute als klassische Elektronentheorie. Sie betrachtet Elektronen als punktförmige Teilchen, deren einzige Eigenschaften Masse und elektrische Ladung sind. Sie können in Bewegung gesetzt werden durch elektrischen und magnetischen Feldern in Bewegung gesetzt werden, und ihre Bewegung führt wiederum zu solchen Feldern. (Ein Elektron in ständiger Schwingung strahlt z. B. elektromagnetische Wellen mit der Frequenz der

Schwingung aus.) Die Wechselwirkungen zwischen Teilchen und Feldern werden Newtons Bewegungsgesetzen und James Clerk Maxwells Gleichungen des Elektromagnetismus. Darüber hinaus müssen bestimmte Randbedingungen festgelegt werden wenn die Theorie eindeutige Vorhersagen machen soll. Die Maxwellschen Gleichungen beschreiben wie sich ein elektromagnetisches Feld von Ort zu Ort und von Augenblick zu Augenblick verändert. Moment, aber um den tatsächlichen Wert des Feldes zu berechnen, muss man die Anfangs- oder Grenzwerte des Feldes kennen, die eine Grundlage für alle nachfolgenden nachfolgenden Änderungen.

Durch die Wahl der Anfangsbedingungen wird die Natur des Vakuums in die klassische Elektronentheorie ein. Da nach der Auffassung des 19. Jahrhunderts das Vakuum leer von jeglicher Strahlung war, waren die Ausgangsbedingungen für Maxwells Gleichungen die Abwesenheit von elektrischer und magnetischer Strahlung. Grob gesagt Grob gesagt, ging die klassische Elektronentheorie des 19. dass das Universum irgendwann in der fernen Vergangenheit Materie (Elektronen) enthielt aber keine Strahlung. Alle elektromagnetische Strahlung entstand durch die Beschleunigung der elektrischen Ladungen.

15 Einführung in die Stochastik

15.1 Physikalische Messungen

Zwischen quantenmechanischen Messungen und klassischen Messungen gibt es grundsätzliche Unterschiede. Allerdings wird oft der falsche Eindruck erweckt, dass man einen Messwert z. B. in der klassischen Physik beliebig genau erhalten kann. Dies ist eine grundlegend falsche Annahme.
¹

Jeder Messwert weist eine gewisse Unsicherheit auf.

Definition einer Messung

Zunächst muss definiert werden, was unter einer physikalischen Messung zu verstehen ist. Eine gute Definition findet sich in [?]:

Eine Messung ist der Akt der experimentellen Bestimmung einer physikalischen Größe unter Verwendung spezialisierter Ausrüstung.

Diese Definition umfasst vier Merkmale:

1. Es können nur physikalische Größen (d. h. Eigenschaften physikalischer Objekte, Phänomene oder Prozesse) gemessen werden. So bleiben soziologische, ökonomische, psychologische, philologische und andere quantitative Bewertungen nicht-physikalischer Größen außerhalb der Grenzen der Metrologie.
2. Messung ist die experimentelle Schätzung von Parametern, d.h., sie beinhaltet immer ein Experiment. Somit kann die Bestimmung einer Berechnung durch Berechnung mit einer Formel und bekannten Eingangsdaten, die statistische Bewertung von Produktqualitätsindikatoren durch eine Meinungsumfrage und andere ähnliche Verfahren nicht als *Messung* bezeichnet werden.

¹Dieser Abschnitt greift Ideen zur Messunsicherheit von John Denker auf (siehe [Uncertainty as Applied to Measurements and Calculations](#)).

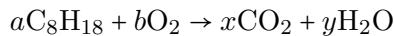
-
3. Messung wird mit speziellen technischen Geräten durchgeführt, die als Messinstrumente bezeichnet werden. Daher umfasst diese Definition keine anderen Bestimmungsmethoden, die keine technischen Geräte verwenden (insbesondere organoleptische Bestimmungen und Bestimmungen durch Expertenbewertung).

Es ist das Charakteristikum physikalischer Experimente, dass ein *hinreichend einfaches* System von seiner Umwelt so gut wie möglich isoliert und in einem wohldefinierten Zustand präpariert einer Messprozedur unterzogen wird. In der klassischen Physik geht man dabei davon aus, dass die Messprozedur die zu messenden Eigenschaften des Systems nicht beeinflusst, d. h. die Wechselwirkung des Systems mit dem Messapparat kann beliebig klein gemacht werden, wobei gleichzeitig die Messung beliebig genau erfolgen kann. Die Messung stellt also nur Fakten das System betreffend fest, die ihm bereits vor der Messung zukommen, ohne das System zu stören.

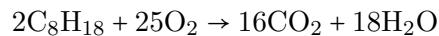
Dabei wird die Analyse der Messunsicherheit häufig vernachlässigt und häufig wird so verfahren, als ob ein Messwert beliebig genau bestimmt werden kann. Häufig wird fälschlicherweise angenommen, dass das Ziel einer Messung darin besteht, eine Unsicherheit anzugeben, welche die Differenz zwischen dem gemessenen Wert und einem *richtigen Wert* widerspiegelt. Diese naive Vorstellung falsch: Wenn man den *richtigen Wert* kennen würde, bräuchte man keine Messungen durchzuführen.

Beispiel 1: Nehmen man an, dass eine digitale Stoppuhr verwendet wird, um ein Ereignis zu messen, und das Ergebnis ist 1,234 Sekunden. Man nennt diese Zahl die angezeigte Zeit und unterscheiden sie von der tatsächlichen Zeit des Ereignisses. Im Prinzip besteht keine Chance, dass die angezeigte Zeit genau mit der wahren Zeit übereinstimmt (da die wahre Zeit eine kontinuierliche Variable ist, während die angezeigte Zeit quantisiert ist). In vielen Fällen wird man jedoch zu dem Schluss kommen, dass sie nahe genug ist.

Beispiel 2: Wie in [?] dargestellt, ist ein anschauliches Beispiel die Verbrennung von Octan (Benzin). Diese Verläuft nach folgender chemischen Gleichung ($a, b, x, y = (2, 25, 16, 18)$):



Stöchiometrisch sollte diese Reaktion nach folgendem Schema ablaufen:



Es ist aber offensichtlich, dass das Ergebnis der realen Reaktion muss mit einer gewissen Unsicherheit behaftet sein, da es im Allgemeinen einige Nicht-Idealitäten gibt, einschließlich der Anwesenheit anderer Moleküle wie *CO* oder *C₆O*, ganz zu schweigen von *NO₂* oder weiterer. Das heißt nicht, dass diese Nichtidealitäten irrelevant sind. Trotzdem kann man sehr wohl die

idealisierte Lösung für die idealisierte Gleichung finden und sich über die Nicht-Idealitäten und Unsicherheiten erst viel, viel später Gedanken machen.

Angegebener Wert versus wahre Werte

Es ist hilfreich, zwischen einem angegebenen Wert und den wahren Werten zu unterscheiden. Hierzu kann man folgende Szenarien betrachten:

Szenario A: Man schließt ein digitales Voltmeter an eine gleichmäßige Spannung an. Hier könnte man z. B. feststellen, dass das Messgerät 1,23 V anzeigt. Dies ist die angezeigte Spannung. Dies bedeuten: *Es gibt irgendeine echte Spannung am Eingang.* Den genauen Wert der Spannung wird man allerdings nie erfahren. Aufgrund der Unzulänglichkeiten des Messgerätes und weiteren Einflüsse auf die Messunsicherheit (vgl. Tabelle S. 15.1.1) wird man den genauen Wert nicht ermitteln können. Dies wird schon sofort ersichtlich, wenn man sich klarmacht, dass z. B. digitales Messgerät verwendet wurde und die erhaltenen Werte diskret sind. Die wahre Spannung ist eine kontinuierliche Variable.

Im Allgemeinen entspricht jeder angezeigte Wert einem Bereich von wahren Werten oder einer ähnlichen Verteilung über wahre Werte. Der angegebene Wert wird nie genau gleich dem wahren Wert sein. Dennoch sagt der angegebene Wert etwas über den wahren Wert aus. Er entspricht einem Bereich von wahren Werten, auch wenn er unmöglich dem wahren Wert entsprechen kann.

Weiterhin werden häufig die Begriffe *Messfehler* und *Messunsicherheit* synonym verwendet. Der Begriff *Messfehler* und auch *Fehlerfortpflanzung* suggerieren dabei fälschlicherweise, dass sie Messung falsch ist. Andere Begriffe wie Genauigkeit, Präzision, experimenteller Fehler, Ablesbarkeit, Toleranz usw. werden oft als nicht-technische Begriffe verwendet.

Ziel einer Messung ist es, den Wert einer Messgröße zu ermitteln. Aus dem bisher gesagten ist offensichtlich, keine Messung absolut genau ist. Hierfür gibt es drei grundsätzliche Gründe:

1. Unvollständige Kenntnis darüber, wie Einflussgrößen auf das Messergebnis einwirken.
2. Unzureichende Erfassung und Kontrolle der Einflussgrößen.
3. Unzulänglichkeiten der Messinstrumente (beschränkte Auflösung der Messinstrumente, fehlerhafte Kalibrierung, etc.).

Beobachtungen versus Verteilungen

Wie in ?? beschreiben, gibt es einen entscheidenden Unterschied zwischen einer *Verteilung* und einer *Beobachtung*, die aus dieser Verteilung gezogen wird.² Ein Ausdruck in der Form $12,3 \pm 0,5$ bezieht sich eindeutig auf eine Verteilung. Dem gegenüber kann man bei einem Ausdruck der Form $x = 12,3$ nicht sagen kann, ob er eine bestimmte Beobachtung oder eine ganze Verteilung über die Beobachtungen beschreiben handelt.

15.1.1 Messunsicherheiten

Messunsicherheiten lassen sich ausschließlich Hilfe von *Wahrscheinlichkeitsverteilungen* verstehen. Die Idee der Wahrscheinlichkeit ist dabei eng mit der Idee der *Zufälligkeit* verbunden. Die Zusammenhänge werden im folgendem an einer fiktiven Messung durchgespielt.

Für die weiteren Betrachtungen wird die Bestimmung der Masse eines fiktiven Probekörpers herangezogen. Aus den bisherigen Betrachtungen und der praktischen Erfahrung folgt, dass eine Wiederholte Messung in der Regel zu unterschiedlichen Zahlenwerten führen wird, da die Messungen mit einer Unsicherheit behaftet sind. Die wiederholten Messungen führen dabei zu den in Abb. ?? dargestellten Einzelwerten.

Diese können in das in Abb. ?? dargestellte Histogramm überführt werden. An dieses Histogramm kann eine Verteilungsfunktion oder Wahrscheinlichkeitsdichte angepasst werden (Abb. ??). Diese kann empirischer oder theoretischer Herkunft sein.

An dieser Stelle ist noch wichtig zu erwähnen, dass sie keinesfalls symmetrisch oder gaußförmig sein muss.³ Insbesondere vor dem Hintergrund der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten von Elektronen im elektrischen Zentralpotential hat man es mit komplexeren Wahrscheinlichkeitsdichten zu tun (vgl. Abschnitt ??).

Messunsicherheit ≠ Fehler

An dieser Stelle muss noch einmal darauf hingewiesen werden, die Unsicherheit verwendet wird, um die Breite einer Wahrscheinlichkeitsverteilung zu bezeichnen⁴. Häufig fällt in diesem Zusammenhang auch der Begriff *Fehleranalyse*. Dieser Begriff ist grundsätzlich zu vermeiden, da das Wort *Fehler* im Zusammenhang mit der Unsicherheit falsch verstanden werden kann. Wenn

²Eine *Beobachtung* entspricht einer Zahl, welche zu einer bestimmten (*Zufalls*)-Variable gesammelt wird.

³Dies wird in Abb. ?? durch die Bimodalität angedeutet.

⁴... nicht mehr und nicht weniger.

das Wort *Fehler* im Zusammenhang mit Messungen verwendet wird, darf es nicht synonym mit *falsch* zu verwendet werden.⁵

In diesem Zusammenhang bedeutet Fehler das Gleiche wie Unsicherheit. Er bezieht sich auf die Breite der Verteilung und nicht auf einen Irrtum. In der Tat verwendet man den Begriff der Unsicherheit, um Fehler zu vermeiden. Es wäre immer ein Fehler zu sagen, die Spannung sei genau gleich 1,23 V, aber man kann sicher sein, dass die Spannung im Intervall $1,23 \pm 0,05$ V liegt.

Beiträge zur Unsicherheit

Die moderne Definition des Sammelbegriff *Gesamtunsicherheit* beinhaltet die einzelnen Beträge unterschiedlicher Ursache.⁶ Zur weiteren Diskussion werden sie in drei Kategorien unterteilt:

Systemfehler bedingt durch das physikalische System:

- Thermisches Rauschen.
- Statistische Fluktuationen, z. B. Schrotrauschen, etc.

Experimentelle Fehler bedingt durch unzureichende bzw. fehlerhafte Messeinrichtungen:

- Kalibrierungsfehler.
- Ablesbarkeit.
- Rundungsfehler.
- Fehler beim Abschneiden der Serie.

Quanteneffekte die eine grundsätzliche Grenze für die Messunsicherheit darstellen:

- Quantenrauschen.

Die ersten beiden Punkte auf dieser Liste kommen bei realen Messungen häufig vor. Ihr Einfluss ist abhängig von der jeweilig durchgeführten Messung. Durch eine Veränderung bzw. eine Verbesserung des Messaufbaus kann die entsprechende Messunsicherheit verringert werden. Grundsätzlich basierend diese Beiträge zur Unsicherheit auf dem jeweiligen physikalischen System.

Diese Beiträge zur Messunsicherheit können durch eine Umgestaltung des Experiments reduziert werden.

⁵Es kann hier noch erwähnt werden, dass der Begriff *Fehlerbalken* als idiomatischer Ausdruck in den Sprachgebrauch eingegangen ist. Konsequenterweise müsste er *Unsicherheitsbalken* heißen.

⁶Es wird bewusst auf den Terminus *experimentelle Fehler* verzichtet. Dieser ist grundsätzlich durch *Quellen der Unsicherheit* zu ersetzen.

Die Beiträge vier bis sieben stehen exemplarisch für Beiträge zur Messunsicherheit, die durch einen unzureichenden Messablauf entstehen. Diese werden nicht durch das zu untersuchende physikalische System hervorgerufen und sind somit nicht weiter Bestandteil der weiteren Be- trachtungen.⁷

Diese Beiträge zur Messunsicherheit können durch eine Umgestaltung der Organisa-
tion des Experiments reduziert werden.

Der letzte Beitrag zum Konzept der stochastischen Mechanik. Wie die ersten Punkte hat auch dieser Beitrag fundamentale physikalische Ursachen. Grundsätzlich kann gesagt werden, dass Quantenfluktuationen bzw. quantenmechanische Unschärfereaktionen eine Grenze für die Mess- genauigkeit darstellen. Diese Grenzen können, im Gegensatz zu den ersten Punkten der Liste, nicht durch einen veränderten oder verbesserten Messaufbau verschoben werden. Die Begrün- dung für diese Unsicherheiten hängt von der Interpretation der Quantenmechanik ab. So zeigt die Quantentheorie im Gegensatz zur klassischen Mechanik, dass es prinzipiell unmöglich ist, den Einfluss der Messapparatur auf das System beliebig klein zu machen, so dass dem System gleichzeitig alle möglichen, durch Observablen zuordenbaren Eigenschaften zukommen können, weil eben die Messung einer Observablen das System so beeinflusst, dass es genau die Eigenschaf- ten dieser gemessenen Observablen besitzt, nicht aber die Eigenschaften, die zu einer anderen, mit dieser nicht kompatiblen Observablen gehören (vgl. {WLQuantenmechanische Messung}). Die Messung der letztgenannten Eigenschaften ist damit aber nicht festgelegt, da das System aufgrund der vorhergehenden Messung die durch sie beschriebenen Eigenschaften gar nicht be- sitzt. Die Bestimmung von Eigenschaften durch die Messung von Observablen bezeichnen wir als Präparation des Systems. Die Observablen, die durch diese Präparation bestimmt werden, d.h. die aufgrund der Präparation des Systems definierte Werte besitzen, nennen wir objektive Ob- servablen. Die obigen Ausführungen lassen sich also dahingehend zusammenfassen, dass nur die Messung einer objektiven Observablen durch die Präparation determiniert ist. Über die Messung nicht-objektiver Observablen liegen aufgrund der Präparation nicht die vollständigen Informatio- nen vor, die für eine determinierte Bestimmung des Wertes dieser Observablen erforderlich wären, und die Quantentheorie liefert daher nur Wahrscheinlichkeitsaussagen über das Auftreten eines bestimmten Messwertes. Es ist von grundlegender erkenntnistheoretischer Bedeutung, dass diese Unvollständigkeit prinzipieller Natur ist, d. h. nicht durch eine genauere Messung von Systemeigenschaften beseitigt werden kann. Während bei vielen Interpretationen der Quantenmechanik die Ursachen für diese Grenzen häufig ohne weitere Erklärungen angenommen werden, bietet die Stochastische Mechanik über den phänomenologischen Ansatz der Vakuumfluktuationen hier einen eleganten Erklärungsansatz (vgl. Abschnitte ?? und ??).

In jedem Fall ist es *nicht* empfehlenswert, die Messunsicherheit in Form von *Zufallszahlen* oder *ungewissen Größen* zu beschreiben. Diese Begriffe müssen als idiomatische Ausdrücke und falsche

⁷Vielfach werden diese Beiträge zur Messunsicherheit auch als *Messfehler* klassifiziert. Der Begriff ist, wie schon gesagt zu vermeiden, ist aber an dieser Stelle insofern hervorzuheben, da es sich um (vermeidbare) Ursachen handelt oder zumindest um Ursachen, die beim Experimentator liegen und ihre Ursprünge nicht in der hinter dem Experiment liegenden Physik haben.

Bezeichnungen betrachtet werden. Wie John von Neumann und andere hervorgehoben haben, gibt es so etwas nicht:

There is no such thing as a random number.

If it's a number, it's not random.

If it's random, it's not a number.

Anmerkung 28:

Die Unsicherheit liegt in der Verteilung, nicht in einem bestimmten Punkt, der aus der Verteilung gezogen wird. Dieser subtile Unterschied zwischen einer Zahl und einer Verteilung verstehen, muss verstanden werden, bevor mit Unsicherheit argumentiert wird.

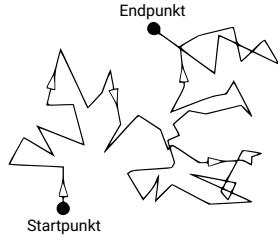


Abbildung 15.1: Schematische Darstellung der Brownschen Molekularbewegung.

15.2 Brownsche Molekularbewegung

Teilchensysteme in der statistischen Mechanik

Es zeigt sich erwartungsgemäß, daß bei Abwesenheit äußerer Kräfte jede der drei Geschwindigkeitskomponenten v_ν , ($\nu = 1, 2, 3$). eines Teilchens nach einer **Gauß-Funktion** verteilt ist:

$$\omega_{(\nu)} \propto e^{-\frac{m_0 v_\nu^2}{2k_B T}} \quad (15.1)$$

Dieselbe Verteilung ergäbe sich für ein herausgegriffenes Teilchen, wenn es als einzelner Massenpunkt in dem vorgegebenen Volumen Kräften unterwerfen wäre, die Zufallsgesetzen unterliegen und die für $\frac{m_0}{2} \bar{v}_\nu^2$ den Gleichverteilungswert liefern:

$$\frac{m_0}{2} \bar{v}_\nu^2 = \frac{k_B T}{2} \quad (15.2)$$

In diesem Sinne kann also ein System von wechselwirkenden identischen Massenpunkten in der klassischen Mechanik durch ein herausgegriffenes Teilchen, das Zufallskräften unterworfen ist, beschrieben werden. Bei Anwesenheit äußerer Kräfte ist zu fordern, daß sich diese den Zufallskräften ungestört überlagern. Wir werden in allen folgenden Abschnitten diese äquivalente Beschreibung benutzen. Wo immer Zeitmittelwerte über Größen des Teilchens zu bilden wären, die seine Bewegung kennzeichnen, werden wir das einfacher handzuhabende Scharmittel benutzen, das bereits in Abschnitt 17.1.3 diskutiert wird.

15.2.1 Beschreibung der Diffusion nach Einstein

Stochastische- oder Zufallsprozesse wurden erstmals im Jahre 1905 durch EINSTEIN durch seine Arbeiten zur BROWNSchen Molekularbewegung auf eine solide theoretische Grundlage gestellt. Die BROWNSche-Molekularbewegung ist die unregelmäßige Bewegung von kleinen Teilchen (wie z.B. Blütenpollen oder ähnlichem) in einer Flüssigkeit. Diese physikalische Beschreibung geht auf Arbeiten von ROBERT BROWN im Jahre 1827 zurück. EINSTEINS Erklärung war, daß die Pollen sich bewegen, weil sie permanent von den sie umgebenden Wassermolekülen gestoßen werden. EINSTEIN realisierte, daß eine deterministische Beschreibung dieser Bewegung nicht möglich ist, weil man die thermische Bewegung der vielen Wassermoleküle nicht beobachtet bzw. beschreiben kann. Deshalb entwickelte er eine statische Beschreibung. Die quantitative Größe, die er bestimmen wollte war die Varianz in der Partikelposition, die linear mit der Zeit anwächst. Es ist ganz hilfreich sich die Originalarbeit anzusehen, da viele der verwendeten mathematischen und physikalischen Konzepte fundamental für die Theorie der stochastischen Prozesse sind. Ein wichtiger Punkt in EINSTEINS Arbeit war das Konzept der grobkörnigen Zeitdiskretisierung.

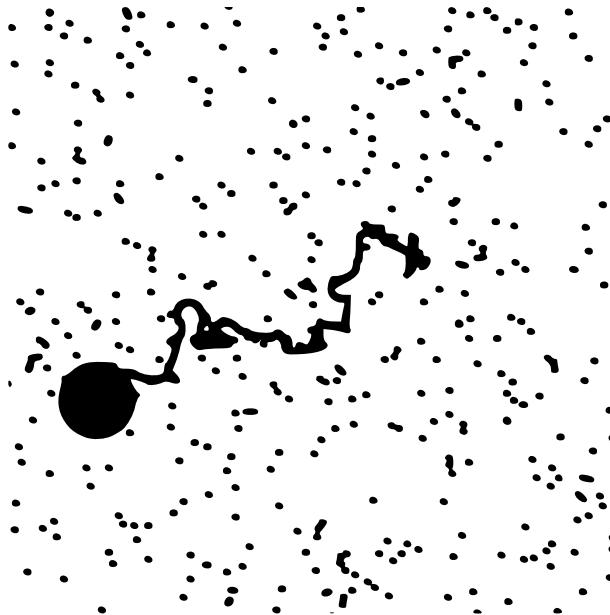


Abbildung 15.2: Beispiel einer Brownschen Bewegung: Gasmolekül.

Dies bedeutet, daß der Zustand eines Systems durch diskrete Zeiten t beschrieben werden kann, die ein Vielfaches einer Zeiteinheit τ sind. Diese Zeiteinheit τ soll klein sein im Vergleich mit der Zeitskala der Beobachtung/Messung, aber lang im Vergleich zur Zeitdauer eines molekularen Stoßprozesse.

Die zweite Annahme rechtfertigt die Beschreibung durch MARKOV-Prozesse. In diesem Zusam-

menhang ist dann die Bewegung eines Partikels innerhalb eines Zeitintervalls unabhängig von der Bewegung in den vorherigen Zeitintervallen. Mathematisch kann ein solcher MARKOV-Prozeß wie folgt beschrieben werden:

In einem Zeitintervall $[t, t + \tau)$ ändert sich die Position des Teilchen um den Betrag⁸ Δ mit einer Wahrscheinlichkeitfunktion $\phi_{(\Delta)}$. Diese ist derart normiert, daß gilt:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{(\Delta)} d\Delta = 1 \quad (15.3)$$

Weil τ eine mikroskopische Größe ist, wird $\phi_{(\Delta)}$ nur für mikroskopische Intervalle nahe 0 von Null verschieden sein. Weiterhin gilt die Symmetrievereinigung:

$$\phi_{(\Delta)} = \phi_{(-\Delta)} \quad (15.4)$$

Wenn man die Wahrscheinlichkeit, mit der man ein Teilchen an der Position x zur Zeit t antreffen kann, mit $p_{(x,t)}$ bezeichnet, so ergibt sich nach Einsteins Hypothese für die Änderung:

$$p_{(x,t+\tau)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{(\Delta)} p_{(x-\Delta,t)} d\Delta \quad (15.5)$$

Weil τ klein ist, kann in einer TAYLOR-Reihe $p_{(x,t+\tau)}$ in τ bzw $p_{(x-\Delta,t)}$ in Δ entwickelt werden. Als Resultat ergibt sich dann:

$$p + \tau \frac{\partial p}{\partial t} = p \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{(\Delta)} d\Delta - \frac{\partial p}{\partial x} \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta \phi_{(\Delta)} d\Delta + \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta^2}{2} \phi_{(\Delta)} d\Delta \quad (15.6)$$

Mittels 15.3 und 15.4 erhält man:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \quad (15.7)$$

wobei die Konstante D geschrieben werden kann als:

$$D = \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta^2}{2} \phi_{(\Delta)} d\Delta \quad (15.8)$$

Durch einfaches Einsetzen kann man sich davon überzeugen, daß die folgende Gleichung eine Lösung der Differentialgleichung (für ein Teilchen, daß bei $x = 0$ und $t = 0$ startet) darstellt:

⁸Die Beschreibung wird zur Vereinfachung nur eindimensional durchgeführt.

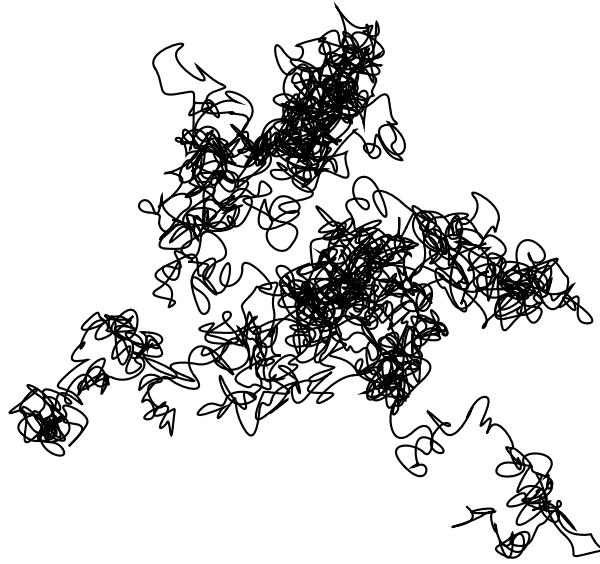


Abbildung 15.3: Simulation einer Brownschen Bewegung in zwei Dimensionen.

$$p_{(x,t+\tau)} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \quad (15.9)$$

Hieraus kann man leicht ableiten:

$$\langle x^2 \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} p_{(x,t+\tau)} x^2 dt = 2Dt \quad (15.10)$$

15.2.2 Beschreibung der Diffusion nach Langevin

Die dynamische Diffusionsgleichung 15.7, die EINSTEIN benutzte ist eins der ersten Beispiele für die Anwendung der FOKKER-PLANCK-Gleichung in der Physik. Diese wird in einem späteren Kapitel hergeleitet (siehe Abschnitte ?? und 5.1.3). Es sei hier nur angemerkt, daß diese Gleichung die Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion für die Systemparameter (in diesem Fall für die Partikelposition x) beschreibt. Ein alternativer Weg zur Behandlung von stochastischen Prozessen ist die Beschreibung über die Differentialgleichung der Systemparameter selber. Dies kann jedoch keine der gewöhnlichen Differentialgleichungen sein, weil sie nicht zu einer Verbreiterung der Wahrscheinlichkeitverteilungsfunktionen führen. Deshalb werden hier *stochastische Differentialgleichungen* verwendet (engl. *stochastic differential equations*, SDE).

Erstmalig wurden stochastische Differentialgleichungen in der Physik von LANGEVIN eingesetzt, der eine alternative (und in gewisser Weise elegantere) Herleitung der Ergebnisse EINSTEINS erzielte.

Als Ausgangspunkt kann die Differentialgleichung, die die Geschwindigkeit v eines Teilchens beschreibt, benutzt werden:

$$\dot{v} = -\gamma v + \frac{1}{m_0} F_{(t)} \quad (15.11)$$

In dieser Gleichung ist γ eine Konstante die den Widerstand durch das viskose Medium beschreibt. Es gilt:

$$\gamma = \frac{6\pi\eta a}{m_0}$$

η ist die Viskosität des Mediums, a der Durchmesser des Teilchens und m_0 seine Masse. Die Kraft $F_{(t)}$ ist eine stochastisch fluktuierende Kraft, die auf Stoßen auf molekularer Ebene beruht. Die einzigen Annahmen, die noch zu dieser Kraft gemacht werden müssen sind:

1. Der Mittelwert ist Null.
2. Die Kraft ist nicht in Richtung bzw. Stärke von einem Zeitintervall zu mächen vorhersehbar.
3. Im stationären Zustand soll gelten:

$$\langle v^2 \rangle = \frac{k_b T}{m_0} \quad (15.12)$$

Die letzte Annahme wird notwendig durch den Gleichverteilungssatz der Thermodynamik welches besagt, daß $\langle \frac{1}{2}mv^2 \rangle = \frac{1}{2}k_b T$ ist.

In Termen von x kann die Gleichung 15.11 umgeschrieben werden in:

$$\ddot{x} = -\gamma \dot{x} + \frac{1}{m_0} F_{(t)} \quad (15.13)$$

Multipliziert man beide Seiten mit $2x$ so erhält man:

$$\frac{\partial^2 x^2}{\partial t^2} - 2\dot{x}^2 = -\gamma \frac{\partial x^2}{\partial t} - \frac{2x}{m_0} F_{(t)} \quad (15.14)$$

Werden nun die Mittelwerte beider Seiten gebildet, so erhält man unter Verwendung von 15.12:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle x^2 \rangle + \gamma \frac{\partial}{\partial t} \langle x^2 \rangle = \frac{2k_b T}{m_0} + \frac{2}{m_0} \langle F_{(t)} \rangle \quad (15.15)$$

Mit den geforderten Eigenschaften (1) und (2) der Kraft $F_{(t)}$ wird somit $\langle F_{(t)} \rangle = 0$. Dieses Argument wird später noch ausführlicher behandelt. Schließlich gelangt man zu:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle x^2 \rangle + \gamma \frac{\partial}{\partial t} \langle x^2 \rangle = \frac{2k_b T}{m_0} \quad (15.16)$$

Durch Einsetzen kann einfach gezeigt werden, daß die folgende Gleichung eine Lösung dieser Differentialgleichung darstellt.

$$\langle x^2 \rangle_t = \langle x^2 \rangle_0 = \frac{2k_b T}{m_0 \gamma} t + c (1 - e^{-\gamma t}) \quad (15.17)$$

Für große Zeiten geht diese Gleichung in die Gleichung 15.10 von EINSTEIN über.

$$D = \frac{k_b T}{\gamma} = \frac{k_b T}{6\pi\eta a}$$

Diese Gleichung hat viele Anwendungen in der Physik und Chemie erfahren.

15.3 Einige Begriffe und Definitionen aus der Wahrscheinlichkeitsrechnung

Stochastische Teilchensysteme, Zufallsgesetze, Markoffsche Kette

To Do 88 (In separates Kapitel im Anhang schieben.):

Der im Zusammenhang mit dem Scharmittel benutzte Begriff *statistisch unabhängig* enthält einen wichtigen Grundgedanken der Wahrscheinlichkeitsrechnung, auf den sich alle Überlegungen der folgenden Abschnitte direkt oder indirekt stützen. Er soll deshalb hier genauer erläutert werden.

Sei a eine physikalische Größe, die nur diskrete Werte annehmen kann. Wird in einer Reihe von N Versuchen der Wert a_ν insgesamt n_ν -mal gefunden, so heißt der Ausdruck

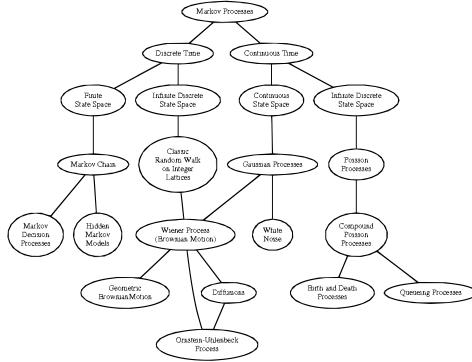


Abbildung 15.4: Aufbau der Stochastik.

$$r_N = \frac{n_\nu}{N} = \frac{n_{(a_\nu)}}{N} \quad (15.18)$$

die *relative Häufigkeit* für den Wert a_ν der Größe a . Man schreibt statt r_n auch ausführlicher $r_{N_{(a_\nu)}}$.

Man beachte:

$$0 \leq r_{N_{(a_\nu)}} \leq 1 \quad (15.19)$$

und wegen $\sum_\nu n_\nu = 1$:

$$\sum_\nu r_{N_{(a_\nu)}} = 1 \quad (15.20)$$

To Do 89 (Formel falsch): In der Anmerkung: Fehlendes Symbol V- N nachtragen

Anmerkung 29 (Anmerkung):

Gilt:

$$r_{N(a_\nu)} = \delta_{a_\nu, a_{\nu 0}}$$

wo $\delta_{a_\nu, a_{\nu 0}}$ das Kronecker-Symbol ist, so haben offenbar alle Versuche denselben Wert $a_{\nu 0}$ geliefert. Hat $r_{N(a_{\nu 0})}$ dagegen nicht die obige Form, so folgt daraus, dass die Bedingungen bei den N Versuchen nicht identisch gewesen sein können.

Sei $r_{(a_{\nu}0)} = \{r_{N(a_{\nu}0)}\}$ die Menge der $r_{N(a_{\nu}0)}$, die man (für festes a_{ν}) erhält, wenn N die Folge der natürlichen Zahlen durchläuft, und $r'_{(a_{\nu}0)}$ eine durch *blinde Auswahl* von Elementen gebildete unendliche Untermenge von $r_{(a_{\nu}0)}$. Haben die Mengen r und r' genau einen Häufungspunkt und ist dieser beiden Mengen gemeinsam, so sagt man, die Abweichungen der Versuchsbedingungen untereinander seien *Zufallsgesetzen* unterworfen oder die Ursachen für die Abweichungen der Versuchsbedingungen seien *statistisch unabhängig*. Dieser Sachverhalt wird oft in der Kurzform ausgesprochen,

die Versuche seien voneinander statistisch unabhängig.

Das obige Kriterium für *zufällig* oder *statistisch unabhängig* kann in praxi natürlich nur in extrapolatorischer Form bei einer hinreichend großen Anzahl von Versuchen benutzt werden.

Die Erfahrungen sind jedenfalls konsistent mit der Annahme, dass für jedes a_{ν} ein solcher Häufungspunkt der Menge $\{r_{N(a_{\nu})}\}$ existiert. Dieser Häufungspunkt, den man mit $W_{(a_{\nu})}$ bezeichnet, heißt *Wahrscheinlichkeit für den Wert a_{ν} der Größe a* .

Aus ?? folgt:

$$\sum_{\nu} W_{(a_{\nu})} = 1 \quad (15.21)$$

Ist $r_{N(a_{\nu})} = \delta_{a_{\nu}, a_{\nu}0}$, so haben alle N -Versuch den Wert a_{ν} geliefert. Ist aber $r_N \neq \delta_{a_{\nu}, a_{\nu}0}$ für alle N , dann können die Versuchsbedingungen bei den N -Versuchenn nicht identisch gewesen sein.

Sei $R_{0(a_{\nu})} = \{r_{N(a_{\nu})}\}$ die Menge derjenigen $r_{N(a_{\nu})}$, die man für ein festes a_{ν} erhält, wenn N die Folge der natürlichen Zahlen durchläuft ($N = 1, 2, 3 \dots$). $R_{0(a_{\nu})}$ ist eine unendliche Mengen, die aber wegen 15.19 beschränkt ist.

Nach dem Satz von *Bolzano-Weierstraß* muß dann $R_{0(a_{\nu})}$ mindestens einen *Häufungspunkt* haben.

Sei $R_{\alpha(a_{\nu})}$ mit $\alpha : \text{natürliche Zahl}$, irgendeine unendliche Untermenge von $R_{0(a_{\nu})}$. Hat $R_{0(a_{\nu})}$ genau einen Häufungspunkt, dann haben auch alle $R_{\alpha(a_{\nu})}$ nur einen Häufungspunkt und zwar denselben wie $R_{0(a_{\nu})}$.

Liegt dieser Fall vor, so sagt man:

- die Abweichungen der Versuchbedingungen untereinander sind Zufallsgesetzen unterworfen.

Oder auch:

- diese Abweichungen sind voneinander statistisch unabhängig.

Der Häufungspunkt $R_{0(a_{\nu})}$ heißt in diesem Fall:

- Wahrscheinlichkeit für den Wert a_ν der Größe a

Man bezeichnet diese mit $\mathcal{W}_{(a_\nu)}$. In Analogie zu 15.20 gilt:

$$\sum_\nu \mathcal{W}_{(a_\nu)} = 1 \quad (15.22)$$

Sei b eine zu a analoge Größe, für die in N Versuchen der Wert b_μ n_μ -mal gefunden wurde. Für die relative Häufigkeit, daß in N Versuchen für b der Wert b_μ und gleichzeitig für a der Wert a_μ gefunden wird, gilt:

$$r_{N_{(a_\nu, b_\mu)}}^p = r_{N(a_\nu)} \cdot r_{N(b_\mu)} \quad (15.23)$$

Für die relative Häufigkeit, daß in N -Versuchen für a entweder der Wert a_ν oder der Wert a_μ gefunden wird, gilt:

$$r_{N_{(a_\nu, b_\mu)}}^s = r_{N(a_\nu)} + r_{N(b_\mu)} \quad (a_\nu \neq a_\mu) \quad (15.24)$$

und daher ist:

$$\mathcal{W}_{p(a_\nu, b_\mu)} = \mathcal{W}_{(a_\nu)} \cdot \mathcal{W}_{(b_\mu)} \quad (15.25)$$

$$\mathcal{W}_{s(a_\nu, b_\mu)} = \mathcal{W}_{(a_\nu)} + \mathcal{W}_{(b_\mu)} \quad (15.26)$$

Der **Mittelwert** von a (oder **Erwartungswert**) ist definiert durch:

$$\langle a \rangle = \text{Häufungspunkt von } \left\{ \sum_\nu r_{n(a_\nu)} \cdot a_\nu \right\} \quad (15.27)$$

also:

$$\langle a \rangle = \sum_\nu \mathcal{W}_{(a_\nu)} \cdot a_\nu \quad (15.28)$$

Dabei ist \mathcal{W} die **Wahrscheinlichkeit** oder das *statistische Gewicht*. Der **Erwartungswert** einer Größe f , die als Funktion von a gegeben ist $f(a)$ wird analog definiert:

$$\langle f \rangle = \sum_{\nu} \mathcal{W}_{(a_{\nu})} \cdot f(a_{\nu}) \quad (15.29)$$

Wenn die Größe a kontinuierlich Werte annehmen kann, so lassen sich alle vorhergehenden Begriffsbildungen übertragen, indem man jeden Wert a_{ν} ein *Toleranzintervall* Δa_{ν} zuordnet, derart, daß sich alle diese Intervalle lückenlos zum Definitionsintervall von a zusammenfügen. Der Ausdruck:

$$r_N(a_{\nu}) = \frac{n_{\nu}}{N} \quad (15.30)$$

bedeutet dann die relative Häufigkeit dafür, die Größe a mit einem Wert zwischen a_{ν} und $a_{\nu} + \Delta a_{\nu}$ anzutreffen. Man führt nun die *Wahrscheinlichkeitsdichte* $\mathfrak{w}_{(a_{\nu})}$ ein, indem man setzt:

$$\mathcal{W}_{(a_{\nu})} = \mathfrak{w}_{(a_{\nu})} \Delta a_{\nu} \quad (15.31)$$

Für genügend kleine Δa_{ν} (exakt $\lim_{a_{\nu} \rightarrow 0}$) lauten die Formeln 15.22, 15.28 und 15.29:

$$\int \mathfrak{w}_{(a)} da = 1 \quad (15.32)$$

$$\langle a \rangle = \int \mathfrak{w}_{(a)} a da \quad (15.33)$$

$$\langle f \rangle = \int \mathfrak{w}_{(a)} f(a) da \quad (15.34)$$

Sei speziell

$$f_{(a)} = (a - \langle a \rangle)^2 \quad (15.35)$$

ein Maß für die Abweichung vom *Mittelwert*. Dann heißt der Ausdruck:

$$\langle f_{(a)} \rangle = \langle (a - \langle a \rangle)^2 \rangle \quad (15.36)$$

$$= \int \mathfrak{w}_{(a)} (a - \langle a \rangle)^2 da \quad (15.37)$$

mittlere quadratische Abweichung oder *mittlere quadratische Schwankung*.

Wegen

$$(a - \langle a \rangle)^2 = a^2 + \langle a \rangle^2 - 2\langle a \rangle a \quad (15.38)$$

gilt:

$$\langle (a - \langle a \rangle)^2 \rangle = \langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2 \quad (15.39)$$

Das stochastische System

Man kann nach diesen Vorbemerkungen nun auf den Begriff des **stochastischen Systems** eingehen:

Ein physikalisches System heißt stochastisch, wenn seine Zustandsänderungen von Zufallsgesetzen beeinflusst werden derart, dass sein Zustand zu irgendeiner Zeit t nicht eindeutig aus dem Zustand zum benachbarten früheren Zeitpunkt berechnet werden kann, sondern nur Wahrscheinlichkeitsaussagen für die auftretenden Änderungen möglich sind.

In praxi ist häufig in guter Näherung eine spezielle Klasse von stochastischen Systemen realisiert:

Wenn die Wahrscheinlichkeit für die Zustandsänderung des betrachteten Systems im Zeitintervall $(t+|\Delta t|, t)$ für $\Delta t \rightarrow 0$ nur vom Zustand des Systems zur Zeit t und dem Zeitintervall Δt abhängt, dagegen nicht vom Systemzustand vor diesem Zeitpunkt, dann nennt man ein solches System eine **Markowsche Kette**.

Die im Rahmen der vorliegenden Arbeit untersuchten stochastischen Systeme werden als **Markoffsche Ketten** angenommen. Diese Annahme lässt sich nur indirekt damit rechtfertigen, dass die resultierenden Theorien der Brownschen Molekularbewegung bzw. der quantenmechanischen Teilchenbewegung in Übereinstimmung mit der Erfahrung sind.

15.4 Grundlagen der Wahrscheinlichkeitsrechnung

Bevor ein tiefereres und allgemeineres Verständnis für die Ergebnisse von EINSTEIN und LANGEVIN erlangt werden können, ist es notwendig sich mit den Grundlagen der Wahrscheinlichkeitsrechnung auseinanderzusetzen.

15.4.1 Axiome der wahrscheinlichkeitsrechnung

Auf einer sehr formalen Basis liefert die Wahrscheinlichkeitsrechnung eine Funktion p die sog. Wahrscheinlichkeit für eine Menge Ω von ω Ereignissen. Diese funktion genügt für alle $A \subseteq \Omega$ folgenden Bedingungen

1. $P(A) \geq 0$
2. $P(\Omega) = 1$
3. $P(\cup_i A_i) = \sum_i P(i)$ wenn $A_i \cap A_j = \emptyset \forall i \neq j$

Ein wichtiges Konzept ist die Unterscheidung zwischen Bestimmtheit/sicherheit und der Wahrscheinlichkeit = 1. Es kann eine Untermenge von Ω z.B. Ω' bestehen für die gilt $P(\Omega') = 1$. Dies heißt jedoch nicht, daß Ereignisse, die nicht in Ω' erhalten sind nicht auftreten können. Lediglich die Wahrscheinlichkeit ihrers Auftretens ist Null.

Beispiel :

Zum Beispiel ist die Wahrscheinlichkeit, daß ein bestimmter Körper eine Masse besitzt, die eine ganzzahliges Vielfaches in Kg ist Null. Dennoch ist dieser Wert nicht weniger wahrscheinlich als alle anderen Zahlenwerte. Trotzdem wäre es sicherlich falsch zu sagen, daß die Masse keine ganzzahligen Wert hat, weil das implizieren würde, daß es unmöglich wäre, daß die Masse überhaupt einen Zahlenwert besitzt.

15.4.2 Zufallsvariablen

Wenn ein stochastischer Prozeß in einem physikalischen System beschrieben wird, sind die zugrundeliegenden Prozesse verborgen. Zum Beispiel in der Beschreibung der BROWNSchen Bewegung nach LANGEVIN würde das zugrundeliegende Ereignis ω eine komplette Beschreibung der Kraft $F_{(t)}$ zu jedem Zeitpunkt $t > 0$ liefern. Nun ist die position X des Teilchens zu einer bestimmten Zeit t_1 offensichtlich eine Funktion seiner Anfangsbedingungen, Geschwindigkeit und Kraft $F_{(t)}$ bis zu Zeit t_1 . Dies ist dann die Funktion $X_{(\omega)}$ zum Ereignis ω . Es ist anzumerken, daß verschiedene Ereignisse ω zur gleichen Position X führen können.

Im weiteren wird oft die ω -Abhängigkeit von $X_{(\omega)}$ durch die Schreibweise X weggelassen. Dann heißt X *Zufallsvariable*. Es ist eine reine Konvention $\langle f_{(x)} \rangle$ anstelle von $\sum_{\omega \in \Omega} f_{(\omega)} P_{(\omega)}$ zu schreiben.

Manchmal wird auch die Notation $E[f_{(x)}]$ benutzt, wobei E für „expectation value“ steht.

Ein besonderer Mittelwert gilt für die δ -Funktion

$$f_{(x)} = \delta_{(x-X)}$$

Dieser wird verwendet zu Definition von $p_{(x)}$, der Wahrscheinlichkeitsdichte (für eine kontinuierliche Variable X) für eine Zufallsvariable $X_{(\omega)}$, die den Wert x annehmen?? soll:

$$p_{(x)} = \langle \delta_{(x-X)} \rangle = \sum_{\omega \in \Omega} \delta_{(x-X_{(\omega)})} P_{(\omega)}$$

Um zu veranschaulichen, daß es sich hier um eine Wahrscheinlichkeitsdichte (nicht um eine Wahrscheinlichkeit) handelt, wird mit $p_{(x)} dx$ die Wahrscheinlichkeit bezeichnet mit der X im Intervall $(x, x + dx)$ liegt.

An einigen Stellen wo keine Verwechslungsgefahr besteht, wird die Zufallsvariable x als Abkürzung von $X_{(\omega)}$ verwendet (vgl. ??)

15.4.3 Multivariate und bedingte Wahrscheinlichkeiten

Die multivariate Wahrscheinlichkeit von zwei Ereignissen A und B wird geschrieben als $P(A \cap B)$. Dabei können die Ereignisse A und B zu verschiedenen Variablen gehören. Zum Beispiel könnte A zu dem Ereignis gehören, daß $x > 0$ ist, und B zu dem für $v > 0$. Trotzdem können für stochastische Prozesse die gleichen Variablen für unterschiedliche Zeiten angenommen werden. Z.B. könnte A das Ereignis $x > 0$ zur Zeit 0 und B $x > 0$ für die Zeit t sein.

Die bedingte Wahrscheinlichkeit von A aus B ist definiert durch:

$$P_{(A|B)} = \frac{P_{(A \cap B)}}{P_{(B)}}$$

Wenn $\Omega = \cup_i B_i$ und $B_i \cap B_j = \emptyset \forall i \neq j$ folgt:

$$P_{(A)} = \sum_i P_{(A|B)} P_{(B)}$$

Die beiden Ereignisse A und B sind unabhängig wenn

$$P_{(A \cap B)} = P_{(A)} P_{(B)}$$

oder anders geschrieben

$$P_{(A|B)} = P_{(A)} \text{ und } P_{(B|A)} = P_{(B)}$$

Dies bedeutet, daß man über die Kenntnis von B nichts über A erfahren kann bzw. umgekehrt.

15.4.4 Momente und momente-erzeugende Funktionen

Die Momente einer Zufallsvariablen X sind die Mittelwerte in der Form $\langle X^n \rangle$ mit n einer natürlichen Zahl. Die wichtigsten Momente sind das erste, das auch *Median* (Mittelwert) genannt wird

$$E[X] = \langle X \rangle \quad (15.40)$$

und das zweite Moment, das mit der Varianz verknüpft ist

$$V[x] = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 \quad (15.41)$$

Für viele Variablen wird die *Covarianz-Matrix* definiert als:

$$V_{ij} = \langle X_i X_j \rangle - \langle X_i \rangle \langle X_j \rangle = \langle X_i, X_j \rangle$$

oder in Vektorschreibweise:

$$\mathbf{V} = \langle \vec{X} \vec{X}^T \rangle - \langle \vec{X} \rangle \langle \vec{X}^T \rangle$$

mit $\vec{X}^T = (X_1, X_2, \dots, X_n)$.

Die Momente können über eine *momente-erzeugende Funktion* oder eine *charakteristische Funktion* gebildet werden:

$$\phi_{(\vec{s})} = \left\langle e^{i\vec{s}\vec{X}} \right\rangle = \int p_{(\vec{x})} e^{-i\vec{x}^T \vec{s}} d^n \vec{x} \quad (15.42)$$

Diese Gleichung genügt folgenden Bedingungen:

$$\phi_{(\vec{0})}=1$$

und

$$\phi_{(\vec{s})} \leq 1$$

Mit der Gleichung können nun die Momente (sofern sie existieren) nach folgender Formel generiert werden:

$$\left\langle \prod_j X_j^{m_j} \right\rangle = \left[\prod_j \left(-i \frac{\partial}{\partial s_j} \right)^{m_j} \phi_{(\vec{s})} \right]_{\vec{s}=\vec{0}}$$

Die charakteristische Funktion hat einige weiter nützliche Eigenschaften.:

1. Sie erzeugt $p_{(\vec{x})}$ mit der Wahrscheinlichkeit eins über

$$p_{(\vec{x})} = \frac{1}{(2\pi)^n} \int \vec{s} \cdot \phi_{(\vec{x})} \cdot e^{-i\vec{x}^T \vec{s}} d^n \vec{x}$$

2. Wenn es sich bei den X_j um unabhängige Variablen der Art

$$p_{(x_1, x_2, \dots, x_n)} = p_{(x_1)} p_{(x_2)} \dots p_{(x_n)}$$

handelt, dann gilt

$$\phi_{(s_1, s_2, \dots, s_n)} = \phi_{(s_1)} \phi_{(s_2)} \dots \phi_{(s_n)}$$

3. Wenn

$$Y = \sum_{j=1}^n X_n$$

und

$$\phi_{j(s)} = \langle e^{isX_j} \rangle$$

ist, so ergibt sich für die Variable Y :

$$\phi_{(s)} = \langle e^{isY} \rangle = \prod_{j=1}^n \phi_{j(s)}$$

15.5 Einige wichtige Verteilungsfunktionen

15.5.1 Die Gaußsche Verteilung

Die am meisten benutzte Verteilungsfunktion ist die **Gaußsche-Verteilungsfunktion**. Für mehrere Variablen kann sie geschrieben werden als:

$$p(\vec{x}) = \sqrt{\frac{1}{\det(2\pi\mathbf{V})}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\vec{x} - \vec{\mu})^T \mathbf{V}^{-1} (\vec{x} - \vec{\mu})\right] \quad (15.43)$$

Aus dieser Gleichung ergeben sich somit:

$$\langle \vec{x} \rangle = \int \vec{x} p(\vec{x}) d^n \vec{x} = \vec{\mu}$$

$$\langle \vec{x} \vec{x}^T \rangle = \int \vec{x} \vec{x}^T p(\vec{x}) d^n \vec{x} = \vec{\mu} \vec{\mu}^T + \mathbf{V}$$

Dabei ist \mathbf{V} die Covarianz-Matrix. Weiterhin gilt:

$$\phi(\vec{s}) = \exp\left[i \vec{s}^T \vec{\mu} - \frac{1}{2} \vec{s}^T \mathbf{V} \vec{s}\right]$$

Wenn $\vec{\mu} = \vec{0}$ ist, verschwinden alle ungeraden Momente. Die geraden Momenten können dann nach folgender Formel entwickelt werden:

$$\langle X_i, X_j, X_k, X_l, \dots \rangle = \frac{(2N)!}{N! 2^N} (V_{ij} V_{kl} \dots)_{sym}$$

Von den Termen $\langle X_i, X_j, X_k, X_l, \dots \rangle$ gibt es insgesamt $2N$ -Stück. Der Index $_{sym}$ soll andeuten, daß es sich um die symmetrische Form des Produktes handelt. Zum Beispiel:

$$\langle X_1, X_2, X_3, X_4 \rangle = \frac{4!}{2! \cdot 4} \left(\frac{V_{12}V_{34} + V_{13}V_{24} + V_{14}V_{23}}{3} \right)$$

und

$$\langle X_1^4 \rangle = \frac{4!}{2! \cdot 4} (V_{11}^2) = 3V_{11}^2$$

Zentraler Grenzwertsatz, Cauchy Verteilung

Aufgrund des zentralen Grenzwertsatzes hat die **Gauß-Verteilung** eine besondere Stellung in der Statistik.

Betrachtet man eine Menge unabhängiger Zufallsvariablen $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ die alle die gleiche Verteilung $p_{(x)}$ haben, so ergibt sich:

$$\langle x_j \rangle = \mu \quad (15.44)$$

$$V[x_j] = \sigma^2 \quad (15.45)$$

Wenn man von allen diese Zufallsvariablen bzw. den zugehörigen Messwerten den Mittelwert bestimmt, so ist dieser ebenfalls eine Zufallsvariable:

$$Y_n = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^n x_j \quad (15.46)$$

Offensichtlich ist $\langle Y \rangle = \mu$. Definiert man die normierte Unsicherheit⁹ Y durch

$$D_n = \frac{Y_n - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}} \quad (15.47)$$

Wenn dann die Lindeberg-Bedingung (siehe ??) erfüllt ist, was normalerweise der Fall ist, dann kann gezeigt werden, dass D_n eine Verteilung hat, die durch folgende Gleichung beschrieben werden kann:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} p_{(d_n)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} d_n^2\right) \quad (15.48)$$

Das heißt, der Durchschnitt Y_n ist Gauß-Verteilt¹⁰, mit einer Varianz, die mit n^{-1} abnimmt, wenn n groß wird. Wie bereits erwähnt, ist die Lindeberg-Bedingung in der Regel erfüllt. Es ist auch nicht unbedingt erforderlich, dass die Variablen x_j unabhängig sind. Sie könnten zum Beispiel eine Stichprobe derselben Zufallsvariablen zu verschiedenen Zeitpunkten $t = j\tau$ darstellen. Für nahe Zeitpunkte (nahe Werte von j) müssen die verschiedenen Werte durchaus nicht unabhängig sein. Aber in der Regel werden die Werte für ausreichend lange Zeiträume unabhängig. Für große $n \rightarrow \infty$ gilt dann der zentrale Grenzwertsatz.

⁹Der Begriff *Fehler* ist, wie schon gesagt zu vermeiden
¹⁰unabhängig von $p_{(x)}$

Es gibt einige bemerkenswerte Ausnahmen vom zentralen Grenzwertsatz. Auch ohne die Lindenberg-Bedingung zu untersuchen, ist es offensichtlich, dass für $p_{(x)}$ die folgende Beziehung endlich sein muss:

$$\sigma^2 = \int (x - \mu)^2 p_{(x)} dx \quad (15.49)$$

Dies ist für die **Cauchy-Verteilung** (oder die Lorentz-Verteilung genannt) nicht gegeben:

$$p_{(x)} = \frac{\frac{a}{\pi}}{x^2 + a^2} \quad (15.50)$$

Hier ist die Verteilung von Y_n eine weitere **Cauchy-Verteilung**, die mit Gl. ?? identisch ist.

Poisson-Verteilung

Während die Gauß-Verteilung die wichtigste Verteilung für reellwertige Variablen ist, wird sie bei natürliche-zahlwertigen Variablen durch die einparametrische **Poisson-Verteilung**¹¹ ersetzt, die wie folgt definiert ist:

$$p_{(x)} = \frac{1}{n!} e^{-\mu} \mu^n \quad (15.51)$$

Ihre Momente lassen sich am einfachsten aus der folgenden Beziehung bestimmen:

$$\langle n(n-1)\cdots(n-r+1) \rangle = \mu^r \quad (15.52)$$

Dies lässt sich leicht anhand der für natürliche Zahlen gültigen Erzeugungsfunktion zeigen:

$$G_{(s)} = \sum_{n=0}^{\infty} P_{(n)} s^n \quad (15.53)$$

Hieraus folgt dann

$$\langle n(n-1)\cdots(n-r+1) \rangle = \left[\left(\frac{\partial G_{(s)}}{\partial s} \right)^r \right]_{s=1} \quad (15.54)$$

¹¹Die Poisson-Verteilung wird hier nur wegen der Vollständigkeit aufgenommen. Für die Betrachtungen und Herleitungen zur Stochastischen Mechanik ist sie nicht relevant.

To Do 90 (Hier fehlt noch etwas):

Definiert man eine die gemeinsame Verteilung:

$$p_{(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots)} \quad (15.55)$$

und die bedingte Verteilung:

$$p_{(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots \| \mu_1, \tau_1; \mu_2, \tau_2; \dots)} = \frac{p_{(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; \mu_1, \tau_1; \mu_2, \tau_2; \dots)}}{p_{(\mu_1, \tau_1; \mu_2, \tau_2; \dots)}} \quad (15.56)$$

Hierbei wird üblicherweise $t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq \tau_1 \geq \tau_2 \geq \dots$ angenommen.

Die einfachste Klasse stochastischer Prozesse ist somit durch folgende Formel gegeben:

$$p_{(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n)} = \prod_i p_{(x_i, t_i)} \quad (15.57)$$

Wenn $p_{(x_i, t_i)}$ ist unabhängig von t_i , dann handelt es sich um einen Bernoulli-Prozess. Versuche. In den meisten Fällen, die hier von Relevanz sind, gilt diese Faktorisierung nicht.

Stationarität

$x(t)$ ist stationär, wenn $x(t)$ und $x(t+\tau)$ für jedes ϵ die gleiche Statistik aufweisen. Analog hierzu dazu erfüllen alle multivariate Wahrscheinlichkeiten

$$p_{(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n)} = p_{(x_1, t_1 + \epsilon; x_2, t_2 + \epsilon; \dots; x_n, t_n + \epsilon)} \quad (15.58)$$

daher sind solche Wahrscheinlichkeiten nur Funktionen der Zeitdifferenz $t_i - t_j$. Die Wahrscheinlichkeiten sind somit zeitunabhängig:

$$p_{(x, t)} = p_{s(x)} \quad (15.59)$$

Korrelationsfunktionen

Bei stochastischen Prozessen ist es sinnvoll, nicht nur Momente zu einem bestimmten Zeitpunkt, sondern Momente zu verschiedenen Zeitpunkten zu betrachten.

Ein Beispiel hierzu ist z. B. die Autokorrelationsfunktion:

$$G_{(t,\tau)} = \langle x_{(t)} x_{(t+\tau)} \rangle \quad (15.60)$$

$$= \iint p_{(x_1,t;x_2,t+\tau)} x_1 x_2 dx_1 dx_2 \quad (15.61)$$

Bei stationären Systemen hängt die Funktion nur von τ ab und wird als daher mit $G(\tau)$ bezeichnet.

Die reduzierte Autokorrelationsfunktion ist definiert als:

$$R_{(t,\tau)} = \langle x_{(t)} x_{(t+\tau)} \rangle \quad (15.62)$$

$$= G_{(t,\tau)} - \langle x_{(t)} \rangle \langle x_{(t+\tau)} \rangle \quad (15.63)$$

Für stationäre Systeme kann ein entsprechendes Spektrum definiert werden ¹²:

$$S_{(\omega)} = \int G_{(\tau)} e^{-i\omega\tau} dt \quad (15.64)$$

$$= 2 \int_0^\infty G_{(\tau)} \cos(\omega\tau) dt \quad (15.65)$$

Entsprechend kann man für die Fourier-transformierte Variable schreiben:

$$\tilde{x}_{(\omega)} = \int x_{(t)} e^{-i\omega t} dt \quad (15.66)$$

Dies steht im Zusammenhang mit dem Spektrum durch

$$\begin{aligned} \langle \tilde{x}_{(\omega)} [\tilde{x}_{(\omega)}]^* \rangle &= \iint e^{-i\omega t + i\omega' t'} \langle x_{(t)} x_{(t')} \rangle dt dt' \\ &= \int e^{i\omega'\tau} G_{(\tau)} d\tau \cdot \int e^{-i(\omega-\omega')t} dt \\ &= 2\pi\delta(\omega - \omega') S_{(\omega)} \end{aligned}$$

Dies ist eine Form des **Wiener-Chintschin-Theorems**.

¹²Hier wird, wie üblich, ein Integral ohne Grenzen als über den gesamten Bereich $(-\infty \dots \infty)$ angenommen.

15.6 Ergodische Prozesse

Für einen stationären stochastischen Prozess ist es oft der Fall, dass die Ensemble-Mittelwerte, die hier mit $\langle \dots \rangle$ bezeichnet wurden, durch Zeitmittelwerte für hinreichend große T ersetzt werden können:

$$\frac{1}{T} \int_0^T \dots dt \quad (15.67)$$

To Do 91 (Formel überprüfen):

Ergodizität : Für ergodische Systeme gilt somit

$$Scharmittel = Zeitmittel$$

$$\begin{aligned}\langle G \rangle &= \int \mu_{(x)} G_{(x)} dx \\ &= \int G_{(x)} dt \\ &= \sum G_{(x(i))} dt\end{aligned}$$

Als einfaches Beispiel betrachtet man

$$\bar{x}(T) = \frac{1}{2T} \int_{-T}^T x(t) dt \quad (15.68)$$

eine Folge von Zufallsvariablen, die von T abhängen, und betrachtet den Grenzwert, für $T \rightarrow \infty$.

Es stellt sich nun die Frage, wie sich dieser Prozess einem Durchschnitt annähert:

Für einen stationären Prozess ist es offensichtlich, dass folgender Zusammenhang gilt:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \langle \bar{x}(T) \rangle = \langle x \rangle_s \quad (15.69)$$

Die Varianz kann dabei wie folgt berechnet werden:

$$\langle \bar{x}(T) \rangle^2 = \frac{1}{4T^2} \iint_{-T}^T \langle x_{(t_1)} x_{(t_2)} \rangle dt_1 dt_2 \quad (15.70)$$

Wenn dieser Prozess stationär ist, kann man schreiben

$$\langle x_{(t_1)} x_{(t_2)} \rangle = R_{(t_1 - t_2)} + \langle x \rangle^2 \quad (15.71)$$

wobei R die reduzierte Zwei-Zeiten-Korrelationsfunktion ist. Daher wird

$$\langle \bar{x}_{(\tau)}^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{1}{4T^2} \iint_{-2T}^{2T} R_{(\tau)} (2T - |\tau|) d\tau \quad (15.72)$$

hier wurde $\tau = t_1 - t_2$ und $t = t_2$ gesetzt und über t integriert.

Eine hinreichende Bedingung dafür, dass die rechte Seite bei $T \rightarrow \infty$ verschwindet, ist:

$$\int_0^\infty \|R_{(\tau)}\| dt \leq \infty \quad (15.73)$$

d.h. die Funktion $\langle x_{(t_1)} x_{(t_2)} \rangle = R_{(t_1 - t_2)}$ wird schnell gegen Null konvergieren, wenn $|t_1 - t_2| \rightarrow \infty$ ist.

In vielen Fällen kann man feststellen, dass folgendes gilt:

$$R_{(t_{\text{au}})} = A \cdot e^{-\tau/\tau_c} \quad (15.74)$$

wobei τ_c die Korrelationszeit ist. In diesem Fall kann man schreiben

$$m.s. - \lim_{T \rightarrow \infty} \bar{x}_{(\tau)} = \langle x \rangle_s \quad (15.75)$$

To Do 92 (Formel überprüfen): ms übersetzen

so dass das Mittelwertbildung gültig ist. Hier ist das m.s.-Limit definiert als eine Folge von Zufallsvariablen Y_n :

To Do 93 (Formel überprüfen): ms übersetzen

$$m.s. - \lim_{n \rightarrow \infty} Y_n = Y \quad (15.76)$$

Dies bedeutet, dass

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle (Y_n - Y)^2 \rangle = 0 \quad (15.77)$$

Weitere Funktionen können analog definiert werden, zum Beispiel die Autokorrelationsfunktion:

$$G_{\tau} = \frac{1}{T} \int_0^T x_{(t)} x_{(t+\tau)} dt \quad (15.78)$$

Man kann wie oben zeigen, dass

$$m.s. - \lim_{T \rightarrow \infty} G_{\tau} = \langle x_{(t)} x_{(t+\tau)} \rangle_s dt \quad (15.79)$$

Hier wird vorausgesetzt, dass der Durchschnitt

$$\langle x_{(t+\lambda+\tau)} x_{(t+\lambda)} x_{(t+\tau)} x_{(t)} \rangle_s \quad (15.80)$$

hinreichend schnell gegen Null für große λ konvergiert. Ein exponentielles Zeitgesetz (z. B. ein exponentieller Zerfall) ist hier ausreichend.

Ebenso kann auch das Spektrum definiert werden

$$S_{(\omega)} = \int e^{-i\omega\tau} G_{\tau} d\tau \quad (15.81)$$

Völlig analog den obigen Erläuterungen folgt dann:

$$S_{(\omega)} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} |e^{-i\omega t} x(t)|^2 dt \quad (15.82)$$

15.7 Markow-Prozesse

Markow-Eigenschaften

Die Behandlung vieler stochastischer Prozesse wird stark vereinfacht, wenn man Markov-Eigenschaften zugrunde legen kann.

Man definierte zunächst die Zeitreihe $t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq \tau_1 \geq \tau_2 \geq \dots$, wobei die bedingte Wahrscheinlichkeit nur durch das jüngste Ereignis bestimmt wird.

Unter dieser Annahme kann gezeigt werden, dass folgender Ausdruck gilt:

$$p_{(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n)} p_{(x_1, t_1|x_2, t_2)} p_{(x_2, t_2|x_3, t_3)} \dots p_{(x_n, t_n|x_{n-1}, t_{n-1})} \quad (15.83)$$

mit

$$t_1 \geq t_2 \geq t_3 \dots \geq t_n \geq t_n \quad (15.84)$$

Die Chapman-Kolmogorow-Gleichung

Für die nächsten Überlegungen wird über alle sich gegenseitig ausschließenden Ereignisse einer Art summiert, um eine Variable zu entfernen.

$$\begin{aligned} p(x_1, t_1 | x_3, t_3) &= \int p(x_1, t_1; x_2, t_2 | x_3, t_3) dx_2 \\ &= \int p(x_1, t_1 | x_2, t_2; x_3, t_3) \cdot p(x_2, t_2 | x_3, t_3) dx_2 \end{aligned}$$

Wenn $t_1 \geq t_2 \geq t_3$ gilt, kann weißt der Prozess Markov-Eigenschaften auf.

Gl. 15.85 wird als Chapman-Kolmogorow-Gleichung bezeichnet.

Im Fall, dass $\vec{n} = (N_1, N_2, \dots)$ aus einem Vektor aus diskreten Zufallsvariablen besteht, die nur ganzzahlige Werte annehmen, nimmt die Chapman-Kolmogorov-Gleichung die folgende Form an

$$p(x_1, t_1 | x_3, t_3) = \sum p(n_1, t_1 | n_2, t_2; n_3, t_3) \cdot p(n_2, t_2 | n_3, t_3) \quad (15.85)$$

To Do 94 (Abbildung fehlt): Abbildung 2.1 aus Wigner fehlt //Continuous and discontinuous sample paths.

Stetigkeit stochastischer Prozesse

An dieser Stelle muss man zwischen dem kontinuierlichen Bereich einer stochastischen Variablen $x_{(t)}$ und einem kontinuierlichen Stichprobenpfad unterscheiden.

Zum Beispiel: In einem Gas werden die stochastisch schwankenden Positionen der Gasteilchen Werte aus einem kontinuierlichen Bereich annehmen. Gleichermaßen gilt auch für die Teilchengeschwindigkeiten.

Der Unterschied zwischen Änderungen der Ortspositionen und den Geschwindigkeiten besteht aber darin, dass sich die Geschwindigkeit ändert sich bei jeder Kollision diskontinuierlich ändert

¹³. Daher ist die Geschwindigkeit ein stochastischer Prozess mit diskontinuierlichen Stichprobenpfaden, aber die Position kann ein stochastischer Prozess mit kontinuierlichen Stichprobenpfaden sein. Auf sehr kurzen Zeitskalen wird die hier gemachte erste Näherung zusammenbrechen und die Geschwindigkeiten ändern sich kontinuierlich. Aber auf dieser gleichen Zeitskala kann ihr Verhalten dann auch nicht mehr als Markov-Prozess beschrieben. Damit die Markov-Annahme funktioniert, müssen wir Zeiten größer als eine minimale Zeit betrachten. Dennoch gibt es Markov-Prozesse mit kontinuierlichen Stichprobenpfaden und sie sind sehr nützlich. Die Kontinuität der Stichprobenpfade für einen Markov-Prozess wird definiert durch die Anforderung, dass für jedes positive ϵ gilt:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|x| \geq \epsilon} p_{(x, t + \Delta t | z, t)} dx = 0 \quad (15.86)$$

Das heißt, dass die Wahrscheinlichkeit, dass sich die Endposition von der Anfangsposition unterscheidet schneller schneller gegen Null konvergiert als Δt .

Differentielle Chapman-Kolmogorow-Gleichung

Unter geeigneten Bedingungen kann die Chapman-Kolmogorow-Gleichung durch eine Differenzialform ¹⁴ ersetzt werden. Die Anforderungen sind $\forall \epsilon > 0$:

- Die Gleichung

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{p_{(\vec{x}, t + \Delta t | \vec{z}, t)}}{\Delta t} = W_{(vecz | \vec{z}, t)} \quad (15.87)$$

konvergiert gleichmäßig in x, z und t für alle $|\vec{x} - \vec{z}| \geq \epsilon$

- Es gilt

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\vec{x} - \vec{z}| < \epsilon} (x_i - z_i) p_{(\vec{x}, t + \Delta t | \vec{z}, t)} d\vec{x} = A_{i(\vec{z}, t)} + O_{(\epsilon)} \quad (15.88)$$

- und weiterhin

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\vec{x} - \vec{z}| < \epsilon} (x_i - z_i) \cdot (x_j - z_j) \cdot p_{(\vec{x}, t + \Delta t | \vec{z}, t)} d\vec{x} = B_{ij(\vec{z}, t)} + O_{(\epsilon)} \quad (15.89)$$

Die letzten beiden Definitionen setzen dabei eine gleichmäßige Konvergenz für x, z und t voraus.

Wenn A_i und B_{ik} existieren, dann verschwinden alle höheren Terme wie

¹³Zumindest in erster Näherung, da natürlich $dv/dt \neq \infty$ gelten muss.

¹⁴In der Zeit.

$$C_{ijk} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\vec{x} - \vec{z}| < \epsilon} (x_i - z_i) \cdot (x_j - z_j) \cdot (x_k - z_k) \cdot p_{(\vec{x}, t + \Delta t | \vec{z}, t)} d\vec{x} \quad (15.90)$$

Nach der Definition 15.86 hat der Prozess kontinuierliche Pfade, wenn und nur wenn $W_{(\vec{x} | \vec{z}, t)} = 0$ für $\vec{x} \neq \vec{z}$. Betrachtet man die zeitliche Entwicklung des Durchschnitts der Funktion $f_{(\vec{x})}$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f_{(\vec{x})} p_{(\vec{x}, t | \vec{y}, t')} d\vec{x} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left(\int f_{(\vec{x})} (p_{(\vec{x}, t + \Delta t | \vec{y}, t')} p_{(\vec{x}, t | \vec{y}, t')}) d\vec{x} \right) \quad (15.91)$$

$$= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left(\iint f_{(\vec{x})} p_{(\vec{x}, t + \Delta t | \vec{z}, t)} p_{(\vec{z}, t | \vec{y}, t')} d\vec{x} d\vec{z} - \int f_{(\vec{x})} p_{(\vec{x}, t + \Delta t | \vec{y}, t')} d\vec{z} \right) \quad (15.92)$$

Teilt man das Integral über \vec{x} über die beiden Bereiche $|\vec{x} - \vec{z}| \geq \epsilon$ und $|\vec{x} - \vec{z}| < \epsilon$ auf und erweitert $f_{(\vec{x})}$ um \vec{z} nach:

$$f_{(\vec{x})} = f_{(\vec{z})} + \sum_i (x_i - z_i) \frac{\partial f}{\partial z_i} + \sum_{ij} \frac{1}{2} (x_i - z_i) (x_j - z_j) \frac{\partial^2 f}{\partial z_i \partial z_j} \quad (15.93)$$

Setzt man dies in das Integral ein und lässt den Grenzübergang $\epsilon \rightarrow 0$ zu, da das Integral unabhängig von ϵ sein muss, dann unter Verwendung der Annahmen 15.7:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int f_{(\vec{x})} p_{(\vec{x}, t | \vec{y}, t)} d\vec{z} &= \int \left(p_{(\vec{x}, t | \vec{x}, t)} \left(\sum_i A_{i(\vec{x}, t)} \frac{\partial f_{(\vec{x})}}{\partial z_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij(\vec{x})} \frac{\partial^2 f_{(\vec{x})}}{\partial z_i \partial z_j} \right) \right. \\ &\quad \left. + \int_{\vec{z}}' f_{(\vec{x})} [W_{(\vec{x} | \vec{z}, t)} p_{(\vec{x}, t | \vec{y}, t')} - W_{(\vec{x} | \vec{z}, t)} p_{(\vec{z}, t | \vec{y}, t')}] d\vec{x} \right) d\vec{z} \end{aligned}$$

To Do 95 (Formel überprüfen):

In der Gleichung wurde dabei folgende Abkürzung verwendet:

$$\int_{\vec{x}}' \cdots d\vec{x} = \lim_{\text{epsilon} \rightarrow 0} \int_{|\vec{x} - \vec{z}| > \epsilon} \cdots d\vec{x} \quad (15.94)$$

Nun integrieren kann man über die einzelnen Terme integrierten. Angenommen, dass $f_{(\vec{x})}$ verschwindet, bevor man die Grenzen des Bereichs von \vec{z} erreichtwerden, dann verschwinden die Oberflächenterme und man erhält:

$$\int f_{(\vec{x})} \frac{\partial}{\partial t} p_{(\vec{z}, t | \vec{y}, t)} d\vec{z} = \int f_{(\vec{x})} \left(\left[- \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} A_{i(\vec{x}, t)} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} B_{ij(\vec{x}, t)} + \int_{\vec{z}}' [W_{(\vec{x} | \vec{z}, t)} p_{(\vec{x}, t | \vec{y}, t')} - W_{(\vec{x} | \vec{z}, t)} p_{(\vec{z}, t | \vec{y}, t')}] d\vec{x} \right] d\vec{z} \right) \quad (15.95)$$

To Do 96 (Formel überprüfen): Formel e-w-2-16

Da $f_{(z)}$ sonst willkürlich wird, kann man folgern, dass

$$\frac{\partial p_{(z,t|\vec{z},t')}}{\partial t} = \left[-\sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} A_{i(z,t)} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} B_{ij(z)} \right] p_{(z,t|\vec{z},t')} + \int [W_{(\vec{z},t)} p_{(\vec{z},t|\vec{z},t')}] d\vec{x} \quad (15.96)$$

In der Gleichung 15.96 wurde $\int' \dots$ durch $\int \dots$ ersetzt. Diese Gleichung wird als differentielle Chapman-Kolmogorov-Gleichung bezeichnet. Die drei Terme in dieser Gleichung können wie folgt interpretiert werden:

- Der erste Term in der differentiellen Chapman-Kolmogorov-Gleichung stammt aus der Annahme ???. Dieser Term wird auch als Driftterm bezeichnet und \vec{A} ist der zugehörige Driftvektor.
- Der zweite Term stammt aus Annahme ?? und wird als Diffusionsterm bezeichnet, wobei B die Diffusionsmatrix ist.
- Der letzte Term stammt aus Annahme ?? und wird als Sprungterm bezeichnet.

15.8 Homogenität und Stationarität

Ein stochastischer Prozess ist homogen, wenn der Driftvektor, die Diffusionsmatrix und die Übergangswahrscheinlichkeiten der differentiellen Chapman-Kolmogorov-Gleichung 15.96 zeitunabhängig sind. Die stationäre Verteilungsfunktion wird dann als die stationäre Lösung von Gleichung 15.96 definiert, folgender Beziehung erfüllt ist:

$$\frac{dp_s}{dt} = 0 \quad (15.97)$$

Gilt weiterhin

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} p_{(x,\tau|x,0)} = p_{s(x)} \quad (15.98)$$

dann wird der Prozess als ergodisch bezeichnet. Dies ist oft¹⁵ erfüllt. Außerdem bedeutet dies, dass der Prozess $X(t)$ mit der Zeit stationär wird, wenn $t \rightarrow \infty$. Die Implikationen hierfür, Ensemblemittelwerte aus Zeitreihen zu berechnen, wurden in Abschnitt ?? diskutiert. In der Praxis

¹⁵Aber nicht immer.

ist natürlich der Grenzwert $t \rightarrow \infty$ nicht erforderlich. Eine stochastische Variable, die so definiert ist, dass sie zum Zeitpunkt $t = 0$ einen Wert x besitzt, wird dann auf einer charakteristischen Zeitskala, die als Relaxationszeit bekannt ist, zu einem stationären Zustand zurückkehren.

15.9 Autokorrelationsfunktionen

Man definiere zunächst

$$\langle \vec{X}_{(t)} | [\vec{x}_0, t_0] \rangle = \int p_{(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0)} \vec{x} d\vec{x} \quad (15.99)$$

und die Autokorrelationsmatrix

$$\langle \vec{X}_{(t)} \vec{X}_{(t_0)}^T \rangle = \int \vec{x} \vec{x}_0^T p_{(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0)} d\vec{x} d\vec{x}_0 \quad (15.100)$$

$$= \int \langle \vec{X}_{(t)} | [\vec{x}_0, t_0] \rangle \vec{x}_0^T p_{(vvecx_0, t_0)} \vec{x}_0 \quad (15.101)$$

Die Definition 15.99 ist der sog. *bedingter Durchschnitt*, das das Mittel von $\vec{X}_{(t)}$, den \vec{X} mit dem \vec{x}_0 zur Zeit t_0 hatte. Diese Ergebnisse gelten für jeden Markov-Prozess. In einem Markov-Prozess bestimmt jedoch eine eindeutige bedingte Wahrscheinlichkeit den gesamten Prozess. Somit ist $\langle \vec{X}_{(t)} | [\vec{x}_0, t_0] \rangle$ eindeutig definiert.

Insbesondere gilt: Das stationäre bedingte Mittel der obigen Korrelationsfunktion ist für einen Markov-Prozess gegeben als:

$$\langle \vec{X}_{(t)} | [\vec{x}_0, t_0] \rangle_s = \langle \vec{X}_{(t)} | [\vec{x}_0, t_0] \rangle \quad (15.102)$$

Daher ergibt Gleichung 15.100 die *stationäre Autokorrelationsfunktion*.

15.9.1 Lineares Regressionstheorem

Nimmt man an, dass

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{X}_{(t)} | [\vec{x}_0, t_0] \rangle = -\mathbf{A} \langle \vec{X}_{(t)} | [\vec{x}_0, t_0] \rangle \quad (15.103)$$

mit der Anfangsbedingung

$$\langle X_{(t_0) | [\vec{x}_0, t_0]} \rangle = \vec{x}_0 \quad (15.104)$$

gilt, dann ergibt sich

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{X}_{(t)} \vec{X}_{(t_0)}^T \rangle = -\mathbf{A} \langle \vec{X}_{(t)} \vec{X}_{(t_0)}^T \rangle \quad (15.105)$$

mit der Anfangsbedingung $\langle \vec{X}_{(t_0)} \vec{X}_{(t_0)}^T \rangle$

Wenn man nun die reduzierte Zwei-Zeit-Korrelationsfunktion definiert:

$$\mathbf{R}_{(\tau)} = \langle \vec{X}_{(t)} \vec{X}_{(t_0)}^T \rangle - \langle \vec{X}_{(t)} \rangle \langle \vec{X}_{(t_0)} \rangle^T \quad (15.106)$$

dann hat diese die folgende Lösung:

$$\mathbf{R}_{(\tau)} = e^{-\mathbf{A}t} \mathbf{V} \quad (15.107)$$

$\mathbf{V} = \langle \vec{X}_{(t)} \vec{X}_{(t_0)}^T \rangle$ ist hier die stationäre Kovarianzmatrix. ¹⁶

Die Bedeutung dieses Ergebnisses liegt darin, dass es üblich ist, dass Markov-Prozesse üblicherweise eine Korrelationsfunktion haben, die einer linearen¹⁷ Bewegungsgleichung wie in Gleichung 15.103 folgt.

15.10 Beispiele für differenzielle Chapman-Kolmogorow-Gleichungen

15.10.1 Sprungprozesse

Man betrachte zunächst den Fall $A_i = 0$, $B_{ij} = 0$. Hierzu kann man die sogenannte Master-Gleichung aufstellen:

¹⁶Hier ist zu beachten, dass es sich um eine Matrixgleichung handelt, was durch die fettgesetzten Symbole angedeutet ist.

¹⁷oder zumindest annähernd linearen

$$\frac{\partial}{\partial t} p_{(z,t|y,t)} = \int [W_{(z|x,t)} p_{(x,t|y,t)} W_{(x|z,t)} p_{(z,t|y,t)}] d\vec{x} \quad (15.108)$$

Diese Gleichung wird in erster Ordnung in Δt für die Anfangsbedingung

$$p_{(\vec{z},t|\vec{y},t)} = \delta(\vec{y} - \vec{z}) \quad (15.109)$$

gelöst. Dies ergibt dann:

$$p_{(\vec{z},t+\Delta t|\vec{y},t)} = \text{delta}_{(\vec{y}-\vec{z})} \left[1 - \Delta t \int W_{(\vec{x}|\vec{z},x,t)} d\vec{x} \right] + \delta t w_{(\vec{z},t|\vec{y},t)} \quad (15.110)$$

Der erste Term gibt das unveränderte Teilchen an seiner ursprünglichen Position. Die Verteilung der Teilchen, die nicht bei \vec{y} bleiben, ist $W_{(\vec{z}|\vec{y},t)}$. Daher sind Stichprobenpfade gerade Linien, die mit diskontinuierlichen Sprüngen mit der Verteilung $W_{(\vec{z},t|\vec{y},t)}$ durchsetzt sind. Für ganzzahlige stochastische Variablen gilt:

$$\frac{\partial}{\partial t} P_{(\vec{n},t|\vec{n}',t')} = \sum_{\vec{m}} W_{(\vec{n}|\vec{m},t)} P_{(\vec{m},t|\vec{n}',t')} W_{(\vec{m}|\vec{n},t)} P_{(\vec{n},t|\vec{n}',t')} \quad (15.111)$$

Auf diese Sprungprozesse wird detaillierter in Kap. ?? eingegangen.

15.10.2 Die Fokker-Planck-Gleichung

Falls die Übergangswahrscheinlichkeiten $W(z|x,t)$ Null sind, erhält man die Fokker-Planck-Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} p_{(z,t|y,t)} = - \sum_j \frac{\partial}{\partial z_j} [A_j(z,t) p_{(z,t|y,t)}] + \frac{1}{2} \sum_{j,k} \frac{\partial^2}{\partial z_j \partial z_k} [B_{jk}(z,t) p_{(z,t|y,t)}] \quad (15.112)$$

Einstins Gleichung (1.5) ist ein bereits bekanntes Beispiel. In der Fokker-Planck-Gleichung wird der Vektor $A(z,t)$ Driftvektor und $B_{ij}(z,t)$ Diffusionsmatrix genannt. Um diese Begriffe zu verstehen, betrachten wir:

$$\frac{d}{dt} \langle z_i \rangle = \int dz z_i \frac{\partial}{\partial t} p_{(z,t|y,t)} = \int z_i \left[- \sum_j \frac{\partial}{\partial z_j} [A_j(z,t) p(z,t|y,t)] dz + \frac{1}{2} \sum_{j,k} \frac{\partial^2}{\partial z_j \partial z_k} [B_{jk}(z,t) p(z,t|y,t)] \right] \quad (15.113)$$

Durch partielle Integration erhält man:

$$\frac{d}{dt} \langle z_i z_j \rangle = \langle z_i A_j \rangle + \langle z_j A_i \rangle + \frac{1}{2} (B_{ij} + B_{ji}) \quad (15.114)$$

Daher bestimmt A die Bewegung der Mittelwerte, während B nur die Bewegung der höheren Momente von z , wie Varianzen, bestimmt. Weitere Einblicke erhalten man durch die Lösung für kleines Δt :

$$p_{(z,t+\Delta t|y,t)} \approx \delta_{(y)} + \Delta t \left(\sum_i A_i \frac{\partial}{\partial z_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} \right) \delta(y) \quad (15.115)$$

Die Lösung ist eine Gauß-Verteilung mit Kovarianzmatrix $B(y,t)$ und Mittelwert $y + A(y,t)\Delta t$. Das System driftet also mit $A(y,t)\Delta t$ und verbreitert sich. Ein Beispieldpfad ist gegeben durch:

$$y(t + \Delta t) = y(t) + A(y,t)\Delta t + \sqrt{B(y,t)}\eta(t)\sqrt{\Delta t} \quad (15.116)$$

wobei $\eta(t)$ ein weißes Rauschen mit Mittelwert null und Korrelationen $\langle \eta(t)\eta^T(t') \rangle = B(y,t)\delta(t-t')$ beschreibt. Man beachte, dass die Stichprobenpfade kontinuierlich, aber nirgends differenzierbar sind.

15.11 Wiener-Prozess

Ein spezielles Beispiel der Fokker-Planck-Gleichung ist, wenn der Driftterm verschwindet und der Diffusionsterm konstant ist, wie in Gleichung (1.5). Das kanonische Beispiel ist der Wiener-Prozess W , der durch eine Differentialgleichung für die bedingte Wahrscheinlichkeit definiert werden kann:

$$\frac{\partial}{\partial t} p_{(w,t|w_0,t_0)} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial w^2} p_{(w,t|w_0,t_0)} \quad (15.117)$$

mit der Anfangsbedingung $p_{(w,t_0|w_0,t_0)} = \delta_{(w-w_0)}$. Dies wird durch eine Differentialgleichung für die charakteristische Funktion gelöst:

$$\phi_{(s,t)} = \langle e^{isw} \rangle = \int p_{(w,t|w_0,t_0)} e^{isw} dw \quad (15.118)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi_{(s,t)} = -\frac{s^2}{2} \phi \quad (15.119)$$

was zu folgenden Ausdruck führt:

$$\phi_{(s,t)} = e^{-\frac{s^2}{2}(t-t_0)} \pi_{(s,w)} \quad (15.120)$$

$$= e^{-\frac{s^2}{2}(t-t_0) + i s w_0} \quad (15.121)$$

$$(15.122)$$

Durch inverse Fourier-Transformation erhalten man:

$$p_{(w,t|w_0,t_0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t-t_0)}} e^{-\frac{(w-w_0)^2}{2(t-t_0)}} \quad (15.123)$$

Dies ist eine Gauß-Verteilung mit

Dies kann für einen multivariaten Wiener-Prozess $\vec{W}_{(t)} = (W_1(t), W_2(t), \dots, W_n(t))$ verallgemeinert werden:

$$\frac{\partial}{\partial t} p_{(\vec{w},t|\vec{w}_0,t_0)} = \frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial w_i^2} p_{(\vec{w},t|\vec{w}_0,t_0)} \quad (15.124)$$

Die Lösung ist dann:

$$p_{(\vec{w},t|\vec{w}_0,t_0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi_{(t-t_0)}}} e^{-\frac{(w-w_0)^2}{2(t-t_0)}} \quad (15.125)$$

was eine Gauß-Verteilung mit Mittelwert $\langle \vec{W}_{(t)} \rangle = \vec{w}_0$ und Varianz $\langle (\mathbf{W}(t) - \mathbf{w}_0)(\mathbf{W}(t) - \mathbf{w}_0)^T \rangle = (t-t_0)\mathbf{I}$ ist. Man beachte, dass die Varianzen mit der Zeit divergieren. Dies deutet darauf hin, dass Stichprobenpfade, die vom gleichen Punkt ausgehen, schnell divergieren. Obwohl die Stichprobenpfade kontinuierlich sind, sind sie nirgends differenzierbar. Wenn $W(t)$ die Position eines Brown'schen Teilchens darstellen soll (wie in Einsteins Behandlung), kann dies nur eine Näherung sein, da die Geschwindigkeit des Teilchens immer definiert sein sollte (wie in der Langevin-Behandlung).

15.11.1 Autokorrelationsfunktion

Die Autokorrelationsfunktion des Wiener-Prozesses wird wie folgt gefunden:

$$\langle W(t)W(s) | w_0, t_0 \rangle = \int dw_1 \int dw_2 w_1 w_2 p_{(w_1, t; w_2, s | w_0, t_0)} \quad (15.126)$$

Angenommen, $t > s$, dann ergibt sich:

$$\langle W(t)W(s) | w_0, t_0 \rangle = \langle W(s)^2 \rangle = s \quad (15.127)$$

Im Allgemeinen gilt:

$$\langle W(t)W(s) | w_0, t_0 \rangle = \min(t, s) \quad (15.128)$$

15.12 Ornstein-Uhlenbeck-Prozess

Ein weiterer Spezialfall der Fokker-Planck-Gleichung ist, wenn der Diffusionsterm konstant ist, der Driffterm jedoch linear in den Variablen ist. Dies ist als Ornstein-Uhlenbeck-Gleichung bekannt:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(kxp) + \frac{1}{2}D\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \quad (15.129)$$

wobei $p \equiv p_{(x,t|x_0,0)}$. Definiert man eine charakteristische Funktion

$$\phi_{(s)} = \langle e^{isx} \rangle \quad (15.130)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{isx} p_{x,t|x_0,0} dx \quad (15.131)$$

Dann ergibt sich die Gleichung

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + ks \frac{\partial \phi}{\partial s} = -\frac{1}{2}Ds^2 \phi \quad (15.132)$$

Durch die Substitution von $s = e^{kt}\xi'$ durch $\phi_{(s,t)} = \phi_{(e^{-kt}\xi,t)}$ ergibt sich die folgende Gleichung:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_{\xi} = -\frac{1}{2} D s^2 e^{-2kt} \phi \quad (15.133)$$

Die Lösung hierfür ist dann

$$\phi = \phi_0 \exp \left(-\frac{1}{2} D \xi^2 \int_0^t e^{-2k\tau} d\tau \right) \quad (15.134)$$

Dies ist

$$\phi = \exp \left(ix_0 s - \frac{Ds^2}{4k} (1 - e^{-2kt}) \right) \quad (15.135)$$

wobei vorausgesetzt, dass die anfängliche Verteilung eine δ -Funktion bei $x = x_0$ ist.

Daher ist $p_{(x,t|x_0,0)}$ eine Gauß-Verteilung mit

$$\langle X_{(t)} \rangle = x_0 e^{-kt} \quad (15.136)$$

und

$$\text{Var}[X_{(t)}] = \frac{D}{2k} (1 - e^{-2kt}) \quad (15.137)$$

Für den Übergang $t \rightarrow \infty$ folgt somit:

$$\begin{array}{rcl} \text{Var} & \rightarrow & 0 \\ \text{Varianz} & \rightarrow & \frac{D}{2k} \end{array}$$

Dies bedeutet, dass die Gleichung eine stationäre Lösung besitzt.

Aus dem linearen Regressionstheorem (vgl. Abschnitt ??) ergibt sich als stationäre Autokorrelationsfunktion des Ornstein-Uhlenbeck-Prozesses folgende Gleichung:

$$\langle X_{(t)} X_{(s)} \rangle = \frac{D}{2k} e^{-k|t-s|} \quad (15.138)$$

Man beachte, dass hier nur die Zeitdifferenz eingeht. Dies ist eine generelle Eigenschaft von stationären Systemen.

15.13 Stochastische Differentialgleichungen

Der erste Abschnitt Abschnitt ?? stellte zwei grundlegende Methoden zur Behandlung stochastischer Prozesse vor:

- entweder die Verwendung einer deterministischen Gleichung für die Wahrscheinlichkeitsverteilung (Einstiens Ansatz)
- oder einer stochastischen Gleichung für die Zufallsvariablen selbst (Langevins Ansatz).

Abschnitt ?? folgte Einsteins Ansatz. In diesem Kapitel wird zu Langevins Ansatz zurückgekehrt. Die Idee einer stochastischen Differentialgleichung auf eine solide Grundlage zu stellen, wird gezeigt, um einen stochastischen Prozess nach Fokker und Planck zu beschreiben.

15.13.1 Gaussian Weißes Rauschen

Obwohl die Beschreibung *stochastische Differentialgleichungen*¹⁸ ziemlich allgemein klingt, wird oft angenommen, dass sie sich nur auf Differentialgleichungen mit einem gaußschen weißen Rauschterm beziehen. In diesem Kapitel werden allgemeinere Arten von stochastischen Gleichungen betrachtet. Es ist jedoch nützlich, zunächst gaußsche stochastische Differentialgleichungen zu überprüfen. Diese Überprüfung ist nicht dazu gedacht, mathematisch solide zu sein, sondern vielmehr die physikalischen Annahmen hinter der Formalismus zu betonen. Insbesondere wird das Konzept der stochastischen Integration zunächst nicht eingeführt.

Man betrachte zur Vereinfachung den eindimensionalen Fall. Die stochastische Differentialgleichung hat dann die Form

$$\dot{x} = \alpha(x) + \beta(x)\xi(t) \quad (15.139)$$

Hier wurde das Zeitargument von x weggelassen, α und β sind beliebige Funktionen, und $\xi(t)$ ist eine schnell variierende stochastische, kontinuierliche Funktion der Zeit. Der Rauschterm $\xi(t)$ hat einen Mittelwert von null und ist so normiert, dass gilt:

$$\int \langle \xi(t)\xi(t+\tau) \rangle = 1 \quad (15.140)$$

¹⁸en: SDE, stochastic differential equations

Man beachte, dass dies impliziert, dass $[\alpha] = [x]T^{-1}$ und $[\beta] = [x]1/\sqrt{T}$, wobei hier $[y]$ die Dimension von y bezeichnet.

Wie bei der Behandlung durch Langevin angenommen gilt, dass $\xi_{(t)}$ zu jedem Zeitpunkt unkorreliert mit der Systemvariablen, hier $x(t)$, ist. Da $x(t)$ von $\xi_{(t')}$ für $t' < t$ abhängt, erfordert diese Annahme, dass $\xi_{(t)}$ unabhängig von $\xi_{(t')}$ für $t' < t$ ist. Das heißt, die Korrelationszeit des Rauschens muss null sein. Die Skalierung in Gleichung 15.140 stellt sicher, dass dieser Grenzfall erreicht werden kann, ohne die Stärke des Rauschens zu verringern. In diesem Grenzfall wird $\xi_{(t)}$ als gaußsches weißes Rauschen bezeichnet, das durch

$$E[\xi_{(t)}\xi_{(t')}] = \delta(t - t') \quad (15.141)$$

$$E[\eta(t)] = 0 \quad (15.142)$$

charakterisiert wird, wobei E den Ensemble-Mittelwert oder **Erwartungswert** bezeichnet.

Die Korrelationsfunktion enthält eine Singularität bei $t = t'$ aufgrund der Bedingung der Gleichung 15.140. Aufgrund dieser Singularität muss man sehr vorsichtig bei der Lösung der Gleichung 15.139 sein. Das Rauschen $\eta(t)$ wird als weiß bezeichnet, weil das Spektrum (die Fourier-Transformation der Korrelationsfunktion) in diesem Grenzfall flach ist, ähnlich wie das Spektrum von weißem Licht (zumindest im sichtbaren Frequenzbereich). Physikalisch könnte eine Gleichung wie 15.139 durch Ableitung für eine physikalische (nicht-weiße) Rauschquelle $\eta(t)$ und anschließende Idealisierung erhalten werden. In diesem Fall ist die Gleichung 15.139 als *stochastische Differentialgleichung nach Stratonovich* bekannt. Die stochastische Differentialgleichung nach Stratonovich für eine Funktion f von x wird unter Verwendung der Standardregeln der Differentialrechnung gefunden.

Die Funktion $f(x)$ ist definiert als

$$\dot{f}_{(x)} = f'_{(x)} [\alpha_{(x)} + \beta_{(x)}\xi_{(t)}] \quad (15.143)$$

wobei der Strich die Ableitung nach x bezeichnet.

Wie bereits erwähnt, treten die Unterschiede zur Standardanalysis beim tatsächlichen Lösen von Gleichung 15.139 auf. Sei $x_{(t)}$ bekannt. Wenn man annimmt, dass die infinitesimale Entwicklung der Variablen x durch

$$x_{(t+dt)} = x_{(t)} + [\alpha_{(x)} + \beta_{(x)}\xi_{(t)}] dt \quad (15.144)$$

gegeben ist und ferner, dass der stochastische Term $\xi_{(t)}$ unabhängig vom Zustand des Systems zum gleichen Zeitpunkt ist, dann ergibt sich der erwartete Anstieg von x zu

$$E[\mathrm{d}x_{(t)}] = \alpha[x_{(t)}] \mathrm{d}t \quad (15.145)$$

Die zweite Annahme erscheint hier vollkommen vernünftig, da das Rauschen nicht mit dem Rauschen korreliert ist, das in der Vergangenheit mit dem System interagiert hat, und daher unkorreliert mit dem System sein sollte. Wendet man die gleichen Argumente auf $f(x)$ an, erhält man

$$E[\mathrm{d}f_{(t)}] = f'_{(x(t))} \alpha_{(x(t))} \mathrm{d}t \quad (15.146)$$

Betrachten wir nun $f(x) = x^2$. Der erwartete Anstieg in der Varianz von x ist

$$\begin{aligned} E[x_{(t+dt)}^2] - E[x_{(t+dt)}]^2 &= E[\mathrm{d}f_{(t)}] \\ &= E[\mathrm{d}f_{(t)}] - 2x_{(t)} E[\mathrm{d}x_{(t)}] \\ &= 0 \end{aligned}$$

Dies bedeutet, dass der stochastische Term kein Rauschen in der Variablen x hervorruft.

Die Schlussfolgerung hieraus ist, dass es ungültig ist, gleichzeitig die drei Annahmen zu treffen, so dass

1. die Kettenregel der Standardanalysis gilt [Gleichung 15.144],
2. der infinitesimale Anstieg einer Größe gleich ihrer Änderungsrate multipliziert mit dt ist (siehe Gleichung 15.145),
3. das Rauschen und das System zum gleichen Zeitpunkt unabhängig sind.

Bei einer Stratonovich-Stochastischen-Differentialgleichung (SDE) ist die erste Annahme erfüllt. Hier ist die übliche Erklärung, dass die zweite ebenfalls erfüllt ist, aber die dritte Annahme nicht erfüllt ist. Aus Gründen, die in Abschnitt ?? deutlich werden, bevorzuge ich es, eine Stratonovich-SDE so zu charakterisieren, dass die zweite Annahme falsch ist (oder nur implizit wahr) und die dritte weiterhin wahr ist.

Eine alternative Wahl, welche Postulate zu lockern sind, ist die der Itô-Stochastik. Bei einer Itô-SDE ist die erste Annahme falsch, die zweite explizit wahr und die dritte ebenfalls wahr. Die Itô-Form hat den Vorteil, dass sie es einfacher ermöglicht, den Anstieg einer Größe zu berechnen, und auch Ensemble-Mittelwerte leicht zu bilden. Sie hat den Nachteil, dass man nicht die übliche Kettenregel verwenden kann.

15.13.2 Itô-Stochastische Differentialrechnung

Da für die Itô- und Stratonovich-Formen einer stochastischen Differentialgleichung (SDG) unterschiedliche Rechenregeln gelten, erscheint die Gleichung im Allgemeinen unterschiedlich. Die Itô-Form der Stratonovich-Gleichung 15.139 ist

$$dx = \left(\alpha_{(x)} + \frac{1}{2} \beta_{(x)} \beta'_{(x)} \right) dt + \beta_{(x)} dW_{(t)} \quad (15.147)$$

Hier wurde das infinitesimale Wiener-Inkrement eingeführt, definiert durch

$$dW_{(t)} = \xi_{(t)} dt \quad (15.148)$$

Dies wird aus folgendem Grund als Wiener-Inkrement bezeichnet. Wenn man definiert

$$dW_{(t)} = w_{(0)} + \int_0^t \xi_{(t')} dt' \quad (15.149)$$

dann ist es einfach zu zeigen, dass

$$\langle W_{(t)} W_{(s)} \rangle = \min(t, s) \quad (15.150)$$

was die Autokorrelationsfunktion des Wiener-Prozesses ist, wie in Abschnitt ?? hergeleitet. Mit etwas mehr Aufwand ist es möglich, alle Eigenschaften des Wiener-Prozesses abzuleiten. Dies ist auch der Grund, warum $\xi(t)$ als gaußsches weißes Rauschen bezeichnet wurde, aufgrund der gaußschen Wahrscheinlichkeitsverteilung des Wiener-Prozesses. Wie in Abschnitt ?? erwähnt, ist der Wiener-Prozess (als Beispiel eines Fokker-Planck-Prozesses) nicht differenzierbar, sodass $\xi(t)$ streng genommen nicht existiert. Dies ist ein weiterer Hinweis darauf, warum die stochastische Analysis eine heikle Angelegenheit ist und warum man den Unterschied zwischen der Itô- und der Stratonovich-Definitionen beachten muss.

In Gleichung ?? wurde eine Konvention eingeführt, die Itô-Gleichungen durch eine explizite Darstellung eines infinitesimalen Inkrementen anzeigt¹⁹, während Stratonovich-Gleichungen durch eine implizite Gleichung mit einer Fluxion auf der linken Seite angezeigt werden²⁰.

Wenn eine Itô-Gleichung gegeben ist durch

$$dx = a_{(x)} dt + b_{(x)} dW_{(t)} \quad (15.151)$$

¹⁹Wie auf der linken Seite der Gleichung ??

²⁰Wie in Gleichung 15.139

dann lautet die entsprechende Stratonovich-Gleichung

$$\dot{x}a_{(x)} - \frac{1}{2}b_{(x)}b'_{(x)} + b_{(x)}\xi_{(t)} \quad (15.152)$$

Diese Gleichung wird im weiteren Kontext in Abschnitt ?? hergeleitet. In der Itô-Form ist das Rauschen unabhängig vom Systemzustand, sodass der erwartete Anstieg von x aus Gleichung 15.151 einfach

$$E[dx] = a_{(x)} dt \quad (15.153)$$

ist. Allerdings wird das unsinnige Ergebnis ?? vermieden, da die Kettenregel nicht zur Berechnung von $df_{(x)}$ angewendet werden kann. Der tatsächliche Anstieg von $f_{(x)}$ lässt sich einfach durch eine Taylor-Entwicklung für $f_{(x+dx)}$ berechnen. Der Unterschied zur üblichen Kettenregel besteht darin, dass infinitesimale Terme zweiter Ordnung nicht notwendigerweise ignoriert werden können. Dies liegt daran, dass das Rauschen so singulär ist, dass infinitesimale Rauschterme zweiter Ordnung genauso groß sind wie deterministische infinitesimale Terme erster Ordnung. Speziell kann der infinitesimale Wiener-Prozess $dW_{(t)}$ durch die folgenden Itô-Regeln definiert werden:

$$E[dW_{(t)}^2] = dt \quad (15.154)$$

$$E[dW_{(t)}] = 0 \quad (15.155)$$

Diese sind eine Konsequenz der Gleichungen ?? und ??. Die zweite Gleichung ist offensichtlich. Die erste ergibt sich aus der Betrachtung von

$$\Delta W_{(t)} = \int_t^{t+\Delta t} \xi_{(t)} dt$$

die

$$E[\Delta W_{(t)}^2] = \Delta t \quad (15.156)$$

gehorcht, bei dem Grenzübergang $\Delta t \rightarrow dt$.

Bei der Verwendung von Gleichung 15.154 ist es möglich, den Erwartungswert wegzulassen, da in jeder endlichen Zeit ein Zeitmittelwert einen Ensemblemittelwert eines primär deterministischen statt stochastischen Wertes bewirkt. Dies kann stringenter im Sinne eines mittleren quadratischen

Grenzwerts formuliert werden, der in Abschnitt ?? eingeführt wurde. Die Taylor-Reihe bis zur zweiten Ordnung ergibt die modifizierte Kettenregel:

$$df_{(x)} = f'_{(x)} dx + \frac{1}{2} f''_{(x)} (dx)^2 \quad (15.157)$$

Speziell mit dx gegeben durch Gleichung 15.151 und unter Verwendung der Regel $dW_{(t)}^2 = dt$, ergibt sich:

$$df_{(x)} = \left[f'_{(x)} a_{(x)} + \frac{1}{2} f''_{(x)} b_{(x)}^2 \right] dt + f'_{(x)} b_{(x)} dW_{(t)} \quad (15.158)$$

Mit dieser Definition und $f(x) = x^2$ findet man, dass die erwartete Varianz von x zu einem infinitesimalen Zeitpunkt nach der bekannten Anfangsbedingung $x(t)$ ist:

$$E[x_{(t+dt)}^2] - E[x_{(t+dt)}]^2 = b_{(x(t))}^2 dt \quad (15.159)$$

Das heißt, die Wirkung des Rauschens besteht darin, die Varianz von x zu erhöhen. Somit vermeidet die korrekte Anwendung der stochastischen Analysis das absurde Ergebnis der Gleichung ??.

15.14 Implizite und explizite stochastische Gleichungen

15.14.1 Nicht-Gaussches nicht-weißes Rauschen

Die vorhergehende Theorie stochastischer Differentialgleichungen kann verallgemeinert werden, indem nicht-Gaussches, nicht-weißes Rauschen betrachtet wird. Dies ist notwendig, um den Sprungprozess in der DCKE zu beschreiben. Obwohl solche Formen von Rauschen nicht-weiß sein können (d. h. kein flaches Rauschspektrum haben), müssen sie dennoch eine unendliche Bandbreite besitzen. Wäre die Korrelationsfunktion des Rauschens eine glatte Funktion der Zeit, wäre es nicht notwendig, eine Art stochastischer Analysis zu verwenden; die üblichen Regeln der Analysis würden gelten. Die Art der allgemeinen Gleichung, die betrachtet werden muss, hat die Form (vorerst nur eindimensional):

$$dx = k_{(x)} dM_{(t)} \quad (15.160)$$

Hier wird die deterministische Entwicklung ignoriert, sodass $dM_{(t)}$ ein stochastischer Zuwachs ist. Wenn $dM_{(t)} = dW_{(t)}$, dann ist Gleichung 15.160 eine stochastische Differentialgleichung nach

Itô. Allgemeiner hat $dM_{(t)}$ wohldefinierte Momente, die vom Zustand des Systems x abhängen können. Eine stochastische Analysis ist notwendig, wenn Momente zweiter oder höherer Ordnung von $dM_{(t)}$ nicht von zweiter oder höherer Ordnung in dt sind. Für gaussisches weißes Rauschen trifft dies nur auf die Momente zweiter Ordnung zu, mit $dW_{(t)}^2 = dt$. Ein Beispiel, bei dem alle Momente berücksichtigt werden müssen, ist ein Punktprozess-Zuwachs $dM_{(t)} = dN_{(t)}$. Dieser kann definiert werden durch:

$$E[dN_{(t)}] = \lambda_{(x)} dt \quad (15.161)$$

und

$$dN_{(t)}^2 = dN_{(t)} \quad (15.162)$$

Gleichung 15.161 zeigt, dass der Mittelwert von $dN_{(t)}$ von der Größenordnung dt ist und vom Zustand des Systems x abhängen kann. Gleichung 15.162 besagt einfach, dass $dN_{(t)}$ entweder null oder eins ist, weshalb man hier von einem Punktprozess spricht. Offensichtlich sind alle Momente von $dN_{(t)}$ von derselben Größenordnung wie dt , sodass die Kettenregel für $f_{(x)}$ vollständig versagt. Im Fall eines Punktprozesses kann man die Berechnung explizit mit den beiden möglichen Werten von $dN_{(t)}$ durchführen und die beiden Ergebnisse mit den Wahrscheinlichkeiten $\lambda_{(x)} dt$ für $dN_{(t)} = 1$ und $1 - \lambda_{(x)} dt$ für $dN_{(t)} = 0$ gewichten. Generell zeigt der Punktprozess kein weißes Rauschen, da die Korrelationsfunktion keine δ -Funktion ist.

Im mehrdimensionalen Fall ist die Korrelationsfunktion ist gegeben durch:

$$G_{ij(t,t')} = E\left[\frac{dN_{i(t)}}{dt} \frac{dN_{j(t')}}{dt'}\right] \quad (15.163)$$

Hierzu gibt es keinen weiteren vereinfachten Ausdruck, im Gegensatz zu:

$$E\left[\frac{dW_{i(t)}}{dt} \frac{dW_{j(t')}}{dt'}\right] = \delta_{ij} \delta_{(t-t')} \quad (15.164)$$

Die Regel 15.162 bedeutet jedoch, dass für $t = t'$ und $i = j$ die rechte Seite von Gleichung 15.163 zu $E[dN_{i(t)}]/dt$ divergiert. Für $t \neq t'$ gibt es keine solche Singularität. Da man die Zeit effektiv in Intervalle der Dauer dt diskretisieren kann. Dies bedeutet, dass der Ausdruck 15.163 einer Dirac-Delta-Funktion bei $t = t'$ entspricht. Explizit kann man schreiben:

$$G_{ij(t,t')} = \tilde{G}_{ij(t,t')} + \delta_{ij} \delta_{(t-t')} E[\lambda_{i(x)}] \quad (15.165)$$

wobei \tilde{G}_{ij} eine nicht-singuläre Funktion ist. Gleichung 15.160 gibt explizit den Zuwachs der Größe x an. Aus diesem Grund kann man eine Gleichung dieser Form als *explizite stochastische Differentialgleichung* bezeichnen. Wie bereits erwähnt, gilt hier die übliche Kettenregel für $f_{(x)}$ nicht. Andererseits könnte man sich eine stochastische Differentialgleichung vorstellen, die, ähnlich der Stratonovich-Gleichung für gaussisches weißes Rauschen, aus einem physikalischen Prozess entsteht, bei dem die Singularität des Rauschens eine Idealisierung ist. Eine solche Gleichung würde nach ?? geschrieben werden als:

$$\dot{x} = \chi_{(x)} \mu(t) \quad (15.166)$$

wobei $\mu(t)$ eine verrauschte Funktion der Zeit ist, die idealisiert wird durch:

$$\mu(t) = \frac{dM(t)}{dt} \quad (15.167)$$

Gleichung ist eine *implizite Gleichung*, da sie den Zuwachs in χ nur implizit angibt. Sie hat den Vorteil, dass $f_{(x)}$ einer impliziten Gleichung gemäß der üblichen Kettenregel gehorchen würde:

$$\dot{f}_{(x)} = f'_{(x)} \chi_{(x)} \mu(t) \quad (15.168)$$

Man beachte, dass der dritte Unterschied zwischen Itô- und Stratonovich-Kalkül, basierend auf der Unabhängigkeit des Rauschterms und des Systems zur gleichen Zeit, in dieser Diskussion nicht berücksichtigt wurde. Das liegt daran, dass selbst in der expliziten Gleichung 15.160 das Rauschen vom Systemzustand abhängen kann. Die Unabhängigkeitsbedingung ist einfach eine Besonderheit des gaussischen weißen Rauschens. Der implizite-explizite Unterschied ist allgemeiner als der Stratonovich-Itô-Unterschied. Wie ich unten zeigen werde, kann die Beziehung zwischen den Stratonovich- und Itô-SDEs leicht²¹ innerhalb dieses allgemeineren Rahmens abgeleitet werden, ohne das Konzept der stochastischen Integration zu verwenden. Bisher wurde nicht spezifiziert, welche Eigenschaften für einen gültigen stochastischen Zuwachs notwendig sind.

Angenommen, der stochastische Zuwachs wird durch die folgende Wahrscheinlichkeitsverteilung angegeben:

$$\Pr[dM(t) = dM] = Y_{M(dM, x(t), dt)} \quad (15.169)$$

Diese Gleichung enthält die Markovsche Annahme, dass $dM(t)$ nur durch den Effekt auf x von vorherigen Inkrementen abhängt. Die expliziten Regeln für dW 15.154, 15.155 und dN 15.161,

²¹Wenn auch heuristisch.

15.162 sind einfache Methoden, die jeweiligen Verteilungen auszudrücken. Eine offensichtliche Konsistenzbedingung ist, dass die Verteilung korrekt mit dt skaliert, was bedeutet, dass der folgender Zusammenhang gilt:

$$\Pr[dM_{(t)} + dM_{(t+dt)} = dM] = Y_{M(dM,x(t),2dt)} \quad (15.170)$$

Es lässt sich leicht zu überprüfen, dass dW und dN auf diese Weise skalieren. Wenn dieses Gesetz eingehalten wird und $E[dM_{(t)}] \leq O(dt)$, dann wird die Wahrscheinlichkeitsverteilung für x die Anforderungen an eine differentielle Chapman-Kolmogorov-Gleichung erfüllen. Die Tatsache, dass diese Gleichung aus drei Termen besteht,

- Drift,
- Diffusion
- und Sprünge,

impliziert, dass es möglich ist, alle stochastischen Inkremente entweder

- als Diffusion unter Verwendung von dW
- oder als Sprünge unter Verwendung von dN

zu behandeln.²²

Umwandlung der impliziten in die explizite Form der stochastischen Differentialgleichung mit beliebigem Rauschen

In diesem Abschnitt wird die Umwandlung der impliziten in die explizite Form bei Vorhandensein eines beliebigem Rauschen erläutert.

Die implizite Form, die als Grenzwert einer Gleichung mit einer physikalischen Rauschquelle entsteht, ist gegeben durch

$$\dot{x}_{(t)} = \xi_{(x)} \mu_{(t)} \quad (15.171)$$

wobei die Symbole wie oben definiert sind. Für implizite Gleichungen gilt die übliche Kettenregel ?? und kann umgeschrieben werden als

²²Tatsächlich können, wie später erläutert wird, diffusive Rauschkomponenten aus Sprungrauschen abgeleitet werden, aber nicht umgekehrt, sodass streng genommen nur das Inkrement dN erforderlich ist.

$$\dot{f} = f'_{(x)} \xi_{(x)} \mu_{(t)} = \phi_{(f(x))} \mu_{(t)} \quad (15.172)$$

wobei $\phi_{(f)}$ hier implizit definiert ist. Um die Gleichung 15.171 zu lösen, ist es notwendig, einen expliziten Ausdruck für das Inkrement in x zu finden. Der Ansatz, den hier gewählt wird, besteht darin, die Gleichung 15.171 nach den Regeln der regulären Analysis zu lösen und die Taylorreihe bis zu allen Ordnungen in dM zu erweitern. Dies kann formal geschrieben werden als

$$x_{(t+dt)} = \exp(\mathrm{d}t \partial_s) x_{(s)}|_{s=t} \quad (15.173)$$

$$= \exp[\xi_{(x)} \mathrm{d}M_{(t)} \partial_x] x|_{x=x(t)} \quad (15.174)$$

Hier wurde die folgende Beziehung verwendet

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} x_{(s)} \right]_{s=t} = \left[\xi_{(x(s))} \frac{\mathrm{d}M_{(t)}}{\mathrm{d}t} \right]_{s=t} \quad (15.175)$$

was die explizite Bedeutung der impliziten Gleichung 15.171 ist. Dass $\mu_{(t)}$ als konstant angenommen wird, während $x_{(s)}$ entwickelt wird, ist eine Ausdrucksweise dafür, dass das Rauschen $\mu_{(t)}$ in Wirklichkeit nicht delta-korreliert sein kann. Wenn das Rauschen $\mu_{(t)}$ der Grenzwert eines physikalischen Prozesses ist, für den die Gleichung 15.171 bestimmt ist, dann muss es eine endliche Korrelationszeit haben, über die es relativ konstant bleibt. Das Rauschen kann als delta-korreliert betrachtet werden, wenn diese Zeit im Vergleich zur charakteristischen Entwicklungszeit des Systems x als infinitesimal betrachtet werden kann.

Die explizite stochastische Differentialgleichung (SDE) ist somit definiert als

$$\mathrm{d}x_{(t)} = (\exp[\xi_{(x)} \mathrm{d}M_{(t)} \partial_x] - 1) x_{(t)} \quad (15.176)$$

bzw.

$$\mathrm{d}x_{(t)} = (\exp[\xi_{(x)} \mathrm{d}M_{(t)} \partial_x] - 1) x|_{x=x(t)} \quad (15.177)$$

Dieser Ausdruck konvergiert für alle $\xi_{(x)}$ für $\mathrm{d}M = \mathrm{d}N$ oder $\mathrm{d}M = \mathrm{d}W$. Gleichung 15.177 ist mit der Anforderung an die implizite Form [Gleichung 15.171] vereinbar, unabhängig von der Art der Stochastizität. Dies kann durch Berechnung des Inkrements in $f(x)$ unter Verwendung der expliziten Form gezeigt werden:

$$\begin{aligned}
 df(t) &= f_{(x(t)+dx(t))} - f_{(x(t))} \\
 &= f_{(\exp[\xi(x) dM(t) \partial_x] x \Big|_{x=x(t)})} - f_{(x(t))} \\
 &= \exp[\xi(x) dM(t) \partial_x] f_{(x)} \Big|_{x=x(t)} - f_{(x(t))} \\
 &= (\exp[\phi_f dM(t) \partial_f] - 1) f \Big|_{f=f(x(t))}
 \end{aligned}$$

Der finale Ausdruck ?? hier ist genau das, was erhalten worden wäre, wenn man die implizite Gleichung 15.171 in eine explizite Gleichung umgewandelt hätte. Dies vervollständigt den Beweis, dass Gleichung 15.176 die korrekte explizite Form der impliziten Gleichung 15.171 ist. Für deterministische Prozesse gibt es keinen Unterschied zwischen den expliziten und impliziten Formen, da nur die erste Ordnung der Exponentialentwicklung mit infinitesimalem dt verbleibt. Es gibt auch keinen Unterschied, wenn $\xi(x)$ eine Konstante ist. Für gaußsches, weißes Rauschen ist die Formel 15.176 die in Abschnitt ?? angegebene Regel für die Umwandlung von Stratonovich zu Itô relevant. Das heißt, wenn die Stratonovich-SDE Gleichung 15.171 mit $dM(t) = dW(t)$ ist, dann ist die Itô-SDE

$$dx(t) = \xi_{(x)} dW(t) + \frac{1}{2} \xi_{(x)} \xi'_{x(t)} dt \quad (15.178)$$

Hier wurde die Itô-Regel $dW_{(t)}^2 = dt$ verwendet. Diese Regel impliziert, dass es nur notwendig ist, die Exponentialentwicklung bis zur zweiten Ordnung zu erweitern. Diese Tatsache erleichtert die inverse Transformation (Itô zu Stratonovich). Für den Sprungprozess bedeutet die Regel $dN_{(t)}^2 = dN_{(t)}$, dass die Exponentialentwicklung in alle Ordnungen erweitert werden muss. Dies ergibt

$$dx(t) = dN_{(t)} (\exp[\xi_{(x)} \partial_x] - 1) x_{(t)} \quad (15.179)$$

Wenn die implizite Gleichung

$$\dot{x}_{i(t)} = \xi_{ij}(\bar{x}(t)) \mu_{j(t)} \quad (15.180)$$

ist, dann ist die explizite Form

$$dx_{i(t)} = (\exp[\xi_{kj(x)} dM_{j(t)} \partial_k] - 1) x_{i(t)} \quad (15.181)$$

15.15 Stochastische Differentialgleichungen

15.15.1 Die Verbindung zur Fokker-Planck-Gleichung

Wir werden nun zeigen, dass es eine einfache Verbindung zwischen einer gaußschen weißen Rausch-SDE und einer zugehörigen Fokker-Planck-Gleichung gibt. Aus Gleichung 15.158 ist leicht zu erkennen, dass für eine beliebige Funktion f :

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t} f_{(x(t),t)} \right\rangle = \left\langle \frac{d}{dt} f_{(x(t),t)} \right\rangle \quad (15.182)$$

$$= \langle a_{(x(t),t)} \rangle \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{1}{2} b_{(x(t),t)}^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (15.183)$$

Zusätzlich gilt:

$$\frac{d}{dt} \langle f_{(x(t))} \rangle = \int f_{(x(t))} \frac{\partial}{\partial t} p_{(x,t|x_0,t_0)} dx \quad (15.184)$$

Nun substituieren und integrieren wir partiell, wobei wir die Tatsache nutzen, dass $f_{(x)}$ beliebig ist:

$$\frac{\partial}{\partial t} p_{(x,t|x_0,t_0)} = -\frac{\partial}{\partial x} [a_{(x(t),t)} p_{(x,t|x_0,t_0)}] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [b_{(x(t),t)}^2 p_{(x,t|x_0,t_0)}] \quad (15.185)$$

Eine multivariate Itô-SDE kann in Vektornotation geschrieben werden als:

$$d\vec{x} = \vec{A}_{(\vec{x},t)} dt + \mathbf{B}_{(\vec{x},t)} d\vec{W}_{(t)} \quad (15.186)$$

wobei \mathbf{B} eine Matrix ist, die das multivariate Wiener-Inkrement $d\vec{W}_{(t)}$ multipliziert. Durch Anwendung des obigen Verfahrens erhält man die entsprechende Fokker-Planck-Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} p_{(\vec{x})} = \sum_i A_{i(\vec{x},t)} \frac{\partial}{\partial x_i} p_{(\vec{x})} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} [\mathbf{b}_{(\vec{x},t)} \mathbf{b}_{(\vec{x},t)}^T]_{ij} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} p_{(\vec{x})} \quad (15.187)$$

Man beachte, dass diese stochastischen Differentialgleichungen nicht eindeutig sind, da es mehr als eine Fokker-Planck-Gleichung für alle Matrizen \mathbf{B} gibt, die dasselbe $\mathbf{B}\mathbf{B}^T$ ergeben.

15.16 Ausgewählte Beispiele

15.16.1 Lineares, weißes Rauschen

$$\begin{aligned} dx &= a_{(t)} dt + b_{(t)} dW_{(t)} \\ x_{(t)} &= x_0 + \int_{t_0}^t a_{(t')} dt' + \int_{t_0}^t b_{(t')} dW_{(t')} \\ \langle x_{(t)} \rangle &= \langle x_0 \rangle + \int_{t_0}^t a_{(t')} dt' \end{aligned}$$

x_0 kann ein *zufälliger* Anfangswert für $t = 0$ sein. Nun gilt:

$$\langle x_{(t)}, x_{(s)} \rangle = \langle (x_{(t)} - \langle x_{(t)} \rangle) (x_{(s)} - \langle x_{(s)} \rangle) \rangle \quad (15.188)$$

$$= \left\langle \int_0^t b_{(t')} dW_{(t')} \int_0^s b_{(s')} dW_{(s')} \right\rangle \quad (15.189)$$

$$= \int_0^t \int_0^s \langle \xi_{(t')} \xi_{(s')} \rangle b_{(t')} b_{(s')} ds' dt' \quad (15.190)$$

$$= \int_0^t \int_0^s \delta'_{(t'-s')} b_{(t')} b_{(s')} ds' dt' \quad (15.191)$$

Fall 1: $s < t$, also für alle s' gibt es ein entsprechendes t' :

$$\begin{aligned} \langle x_{(t)}, x_{(s)} \rangle &= \int_0^s \int_0^s \delta'_{(t'-s')} b_{(s')} b'_{(t')} dt' ds' \\ &\quad + \int_0^s \int_s^t \delta'_{(t'-s')} b_{(s')} b_{(t')} dt' ds' \\ &= \int_0^s b_{(s')} b_{(t')} ds' + 0 \end{aligned}$$

Fall 2: $t < s$:

$$\langle x_{(t)}, x_{(s)} \rangle = \int_{t_0}^t b_{(t')}^2 dt' \quad (15.192)$$

Daher:

$$\langle x_{(t)}, x_{(s)} \rangle = \int_{t_0}^{\min(t,s)} b_{(t')}^2 dt' \quad (15.193)$$

15.16.2 Multiplikatives lineares weißes Rauschen

Die stochastische Differentialgleichung

$$dx = cx dW_{(t)} \quad (15.194)$$

ist linear in x , aber multiplikativ, da dW mit x multipliziert wird. Diese Gleichung kann durch eine Variablentransformation gelöst werden und ist ein gutes Beispiel für die Anwendung der Itô-Kettenregel aus Gleichung 15.157. Wir setzen

$$y = \log x \quad (15.195)$$

und erhalten dann

$$dy = c dW_{(t)} - \frac{1}{2}c^2 dt \quad (15.196)$$

Diese Gleichung kann direkt gelöst werden zu

$$y_{(t)} = y_{(0)} + cW_{(0)} - \frac{1}{2}c^2 t \quad (15.197)$$

wobei $y_{(t)}$ eine normalverteilte Zufallsvariable mit dem Mittelwert $-\frac{1}{2}c^2 t$ und der Varianz $c^2 t$ ist. Nun gilt für eine normalverteilte Zufallsvariable z , dass

$$\langle \exp(z) \rangle = \exp\left(\langle z \rangle + \frac{1}{2}V[z]\right) \quad (15.198)$$

sodass

$$\langle x_{(t)} \rangle = \langle x_{(0)} \rangle \exp\left(-\frac{1}{2}c^2 t + \frac{1}{2}c^2 t\right) = \langle x_{(0)} \rangle \quad (15.199)$$

was auch direkt aus Gleichung 15.194 folgt, da $\mathbb{E}[dx] = 0$ gilt.

Die Autokorrelationsfunktion lässt sich ebenfalls leicht aus Gleichung 15.198 ableiten:

$$\mathbb{E}[x(t)x(s)] = \mathbb{E}[x(0)^2] \exp\left(cW(t) + cW(s) - \frac{1}{2}c^2(t+s)\right) \quad (15.200)$$

Dies kann weiter vereinfacht werden zu

$$\mathbb{E}[x(t)x(s)] = \mathbb{E}[x(0)^2] \exp\left(\frac{1}{2}c^2[t + s + 2\min(t, s)]\right) \exp[c^2 \min(t, s)] \quad (15.201)$$

Beachten Sie, dass die Stratonovich-Gleichung

$$x = cx \eta(t) \quad (15.202)$$

sehr unterschiedliche Ergebnisse liefert. In diesem Fall ist $y = c\eta(t)$, sodass

$$y = y_0 + cW(t) \quad (15.203)$$

und somit

$$\mathbb{E}[x(t)] = \mathbb{E}[x(0)] \exp[cW(t)] = \mathbb{E}[x(0)] \exp\left(\frac{1}{2}c^2t\right) \quad (15.204)$$

was exponentiell mit der Zeit wächst. Dies unterstreicht die Bedeutung der Unterscheidung zwischen einer Itô- und einer Stratonovich-Gleichung.

15.17 Der Ornstein-Uhlenbeck-Prozess

Aus Abschnitt ?? ergibt sich die Itô-SDE für diesen Prozess:

$$dx = -kx dt + \sqrt{D} dW_{(t)} \quad (15.205)$$

Falls $x(0)$ deterministisch oder eine normalverteilte Zufallsvariable ist, dann ist $x(t)$ ebenfalls eine normalverteilte Zufallsvariable mit den Momenten

$$\mathbb{E}[x(t)] = \mathbb{E}[x(0)] e^{-kt} \quad (15.206)$$

und der Varianz

$$\text{Var}[x(t)] = \frac{D}{2k} \quad (15.207)$$

Mithilfe der Itô-Kettenregel erhält man:

$$d(x^2) = 2kx^2 dt + 2\sigma x dW(t) + \sigma^2 dt \quad (15.208)$$

sodass gilt:

$$d\mathbb{E}[x^2] = -2k\mathbb{E}[x^2]dt + \sigma^2 dt \quad (15.209)$$

Daraus folgt für $t \rightarrow \infty$:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{E}[x^2] = \frac{D}{2k} \quad (15.210)$$

Die Autokorrelationsfunktion ergibt sich aus:

$$\mathbb{E}[x(t)x(s)] = \mathbb{E}[x(0)^2]e^{-k|t-s|} \quad (15.211)$$

woraus ersichtlich ist, dass der Prozess stationär ist.

15.17.1 Multivariater Ornstein-Uhlenbeck-Prozess

Die multivariate Form dieses Prozesses lautet:

$$d\vec{x}(t) = -\mathbf{k}\vec{x} dt + \mathbf{d} d\vec{W}(t) \quad (15.212)$$

wobei \mathbf{k} und \mathbf{d} konstante Matrizen sind. Die Lösung ist gegeben durch:

$$\mathbf{x}(t) = e^{At} \mathbf{x}(0) + \int_0^t e^{A(t-s)} B d\mathbf{W}(s) \quad (15.213)$$

Der Erwartungswert und die Korrelationsfunktion sind:

$$\mathbb{E}[\mathbf{x}(t)] = e^{At} \mathbb{E}[\mathbf{x}(0)] \quad (15.214)$$

und

$$\mathbb{E}[\mathbf{x}(t)\mathbf{x}^T(s)] = e^{A(t-s)}\Sigma \quad (15.215)$$

wobei Σ die stationäre Kovarianzmatrix ist, die aus der Gleichung

$$A\Sigma + \Sigma A^T + BB^T = 0 \quad (15.216)$$

folgt.

Das Spektrum im stationären Zustand ist gegeben durch:

$$S(\omega) = \frac{1}{2\pi} (A + i\omega I)^{-1} BB^T (A^T - i\omega I)^{-1} \quad (15.217)$$

16 Sprungprozesse

In diesem Abschnitt wird zu den Sprungprozessen in ihrem natürlichssten Kontext zurückgekehrt, nämlich für diskrete Variablen.

16.1 Zufallsbewegung in einer Dimension

Eine Person bewegt sich entlang einer Linie und macht zufällig Schritte nach links oder rechts, jeweils der Länge l , mit gleicher Wahrscheinlichkeit. Die Position der Person kann nur ein ganzzahliges Vielfaches der Schrittweite nl sein, wobei n eine ganze Zahl ist. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, nach einer bestimmten Zeit den Punkt nl zu erreichen? Wir nehmen an, dass die Wartezeit vor jedem Schritt fest ist und einem festen Zeitintervall τ entspricht. Die Zeit wird daher in diskreten Einheiten $N\tau$ gemessen. Dann erfolgen die Sprünge nach links oder rechts mit gleicher Wahrscheinlichkeit:

$$P_{(n,(N+1)\tau) | n', N'\tau} = \frac{1}{2} [P_{(n+1, N\tau | n', N'\tau)} + P_{(n-1, N\tau | n', N'\tau)}] \quad (16.1)$$

Um dieses Modell zu lösen, definiert man zunächst die charakteristische Funktion

$$G_{(s,t)} = e^{ins} \langle \rangle \quad (16.2)$$

$$= \sum_n P_{(n,t | n', t')} e^{ins} \quad (16.3)$$

Angenommen, dass anfänglich $G(s, 0) = 1$ gilt (d.h. $n' = 0$ bei $t' = 0$), dann lautet die Lösung:

$$G_{(s,N\tau)} = \left(\frac{e^{is} + e^{-is}}{2} \right)^N \quad (16.4)$$

Um die Wahrscheinlichkeitsverteilung zu erhalten, expandieren wir die charakteristische Funktion in Potenzen von e^{is} . Dies ergibt:

$$P_{(n, N\tau | 0, 0)} = \frac{1}{2^N} \frac{N!}{(\frac{N+n}{2})! (\frac{N-n}{2})!} \quad (16.5)$$

16.1.1 Kontinuierlicher Raum- und Zeitgrenzwert

Die zurückgelegte Distanz ist gegeben durch $x = nl$. Die dafür benötigte Zeit ist $t = N\tau$. Wir interessieren uns für die Grenzwerte $l \rightarrow 0$ und $\tau \rightarrow 0$ bei endlichem x und t . Die charakteristische Funktion für die x -Verteilung ist:

$$\phi_{(s,t)} = \langle e^{isx} \rangle \quad (16.6)$$

$$= G_{(ls,t)} \quad (16.7)$$

$$= \left[1 + \frac{1}{2} (e^{ils} + e^{-ils} - 2) \right]^{t/\tau} \quad (16.8)$$

Für kleine s ergibt sich dann der Grenzwert:

$$\lim_{\tau,l \rightarrow 0} \phi_{(s,t)} \rightarrow \exp(-Ds^2\tau) \quad (16.9)$$

mit

$$D = \lim_{l \rightarrow 0, \tau \rightarrow 0} \left(\frac{l^2}{2\tau} \right) \quad (16.10)$$

Daraus folgt die Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$p_{(x,t|0,0)} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \quad (16.11)$$

was genau der Verteilung eines Wiener-Prozesses entspricht. Somit kann der Wiener-Prozess als Grenzwert einer Zufallsbewegung aufgefasst werden, in dem die Diskretisierung von Zeit und Raum vernachlässigbar wird.

16.2 Poisson-Prozess

Die Poisson-Verteilung wurde in Abschnitt ?? eingeführt. Sie ergibt sich auf natürliche Weise aus einer Master-Gleichung für eine ganzzahlige Variable n , die mit einer Rate d wächst. Dies könnte beispielsweise die Ankunft von Elektronen an einer Anode oder die Geburt von Babys modellieren. In der Notation von Abschnitt ?? gilt:

$$W_{(m|n,t)} = d\delta_{(n+1,t|n,t)} \quad (16.12)$$

Die Master-Gleichung lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} P_{(n,t|n',t')} = d [P_{(n-1,t,n',t')} - P_{(n,t|n',t')}] \quad (16.13)$$

Diese lässt sich über die charakteristische Funktion lösen, die die Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} G_{(s,t)} = d [e^{is} - 1] G_{(s,t)} \quad (16.14)$$

erfüllt, mit der Anfangsbedingung $n_0 = 0$ bei $t_0 = 0$. Die Inversion liefert schließlich die Poisson-Verteilung:

$$P_{(n,t|0,0)} = \frac{(dt)^n}{n!} e^{-dt} \quad (16.15)$$

welche eine Poisson-Verteilung mit Mittelwert dt beschreibt.

16.3 Geburt-Tod-Mastergleichungen

Die obige Mastergleichung (16.13) ist ein Beispiel für einen Geburt-Tod-Prozess, bei dem es nur Geburten gibt. Die allgemeinere Form lautet:

$$W_{(x,x',t)} = w^{(+)}(x')\delta_{x,x'+1} + w^{(-)}(x')\delta_{x',x} \quad (16.16)$$

Dann lautet die Mastergleichung:

Um die stationäre Lösung zu erhalten, kann man schreiben:

$$J_{(x)} = w_{(x)}^{(-)} p_{s(x)} - w_{(x-1)}^{(+)} p_{s(x)} \quad (16.17)$$

Die Bedingung für eine stationäre Lösung lautet dann:

$$J_{(x+1)} - J_x = 0 \quad \forall x \quad (16.18)$$

Da $w^{(-)} = 0$ ergibt sich

$$p_{(x,t|x',t')} = 0, \quad \text{fr } x < 0 \quad \text{oder } x' < 0 \quad (16.19)$$

Durch Variablenwechsel von x zu z in der Gleichung und Aufsummierung von $z = 0$ bis $z = x - 1$ erhält man:

$$0 = \sum_{z=0}^{x-1} (J_{(z+1)} - j_{(z)}) \quad (16.20)$$

$$= J_{(x)} - J_{(0)} \quad (16.21)$$

da $J_{(0)} = 0$ ergibt sich somit $J_{(x)} = 0 \quad \forall x$.

Die stationäre Lösung ist somit gegeben durch:

$$\begin{aligned} p_{s(x)} &= \frac{w_{(x-)}^{(+)}}{w_{(x)}^{(-)}} p_{(x-1)} \\ &= p_{s(0)} \prod_{z=1}^x \frac{w_{(z-1)}^{(+)}}{w_{(z)}^{(-)}} \end{aligned}$$

16.4 Näherungsmethoden für große Systeme

Im Folgenden wird ein allgemeiner Formalismus zur Beschreibung von Systemen mit einer großen Anzahl von Individuen betrachten, die bestimmten Gruppen angehören, die zufällig, aber auf genau festgelegter Weise interagieren. Dieser Formalismus eignet sich für die Beschreibung z. B. von chemischen Reaktionen, miteinander interagierender biologischer Systeme. Insbesondere werden Näherungsmethode beschrieben, die besonders gut zur Beschreibung großer Systeme (Grenzbereich großer Zahlen) geeignet sind.

16.4.1 Mastergleichung für viele Spezies

$$\sum_{a=1}^n N_a X_a \xrightarrow{k} \sum_{a=1}^n M_a X_a \quad (16.22)$$

Hier ist N_a die Anzahl der Moleküle der Spezies X_a , die in der Reaktion involviert sind, welche M_a derselben Spezies produziert. k ist eine Konstante. Durch Einführung der Vektornotation:

$$\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (16.23)$$

$$\vec{N} = (N_1, N_2, \dots, N_n) \quad (16.24)$$

$$\vec{M} = (M_1, M_2, \dots, M_n) \quad (16.25)$$

$$\vec{r} = \vec{M} - \vec{N} \quad (16.26)$$

hat die Reaktion die Wirkung, den Populationsvektor von \vec{x} zu $\vec{x} + \vec{r}$ zu verändern. Die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit dafür ist:

$$w_{(\vec{x})} = W_{(\vec{x} + \vec{r} | \vec{x})} = k \prod_{a=1}^n \frac{x_a!}{(x_a - N_a)! N_a!} \quad (16.27)$$

Dies ist einfach k -mal die Anzahl der Möglichkeiten wie N -Moleküle aus der Gesamtanzahl \vec{x} gewählt werden können.

In den meisten interessanten Systemen gibt es mehr als eine mögliche Reaktion. Angenommen, es gibt s mögliche Reaktionen, indiziert durch A . Dann definiert man:

$$w_A(\vec{x}) = W_{(\vec{x} + \vec{r}_A | \vec{x})} = k_A \prod_{a=1}^n \frac{x_a!}{(x_a - N_a^A)! N_a^A!} \quad (16.28)$$

Die Mastergleichung lautet dann:

$$\frac{\partial P_{(\vec{x},t)}}{\partial t} = \sum_{A=1}^s \left[w_A(\vec{x} - \vec{r}_A) P_{(\vec{x} - \vec{r}_A, t)} - w_A^A P_{(\vec{x}, t)} \right]. \quad (16.29)$$

Diese Gleichung wird als *chemische Mastergleichung* bezeichnet.

16.4.2 Fokker-Planck-Näherung

Im Folgenden werden einige Näherungen basierend auf der Annahme eines hinreichend großen Systems gemacht. Speziell wird angenommen, dass $M_a^A, N_a^A \ll x_a$ für alle A und a . Dann kann man schreiben:

$$w_A(\mathbf{x}) = k_A \prod_{a=1}^n \frac{x_a^{N_a^A}}{N_A^A!} \quad (16.30)$$

Außerdem kann man mit $\nabla_a = \frac{\partial}{\partial x_a}$ schreiben:

$$w_{(\vec{x}+\vec{r}^A)} P_{(\vec{x}+\vec{r}^A,t)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\vec{r}^A \cdot \vec{\nabla})^n}{n!} [w_{(\vec{x})}^A P_{(\vec{x},t)}] \quad (16.31)$$

bei $n = 2$ abbrechen, vorausgesetzt die Verteilung $P_{(\mathbf{x})}$ ist hinreichend glatt; im Wesentlichen muss man annehmen, dass die Diskretion der Variablen \vec{x} keine Rolle spielt. Dies kann durch die Bedingung formalisiert werden, dass die Eigenwerte der Kovarianzmatrix viel größer als eins sind. Unter dieser Annahme kann man die Mastergleichung ?? in die Fokker-Planck-Gleichung umwandeln:

$$\frac{\partial P_{(\vec{x},t)}}{\partial t} = \sum_a \nabla_a [A_{a(\vec{x})} P_{(\vec{x},t)}] + \frac{1}{2} \sum_{a,b} \nabla_a \nabla_b B_{ab(\vec{x})} P_{(\vec{x},t)} \quad (16.32)$$

- mit Driftvektor

$$A_{a(\vec{x})} = \sum_A r_a^A w_{A(\vec{x})} \quad (16.33)$$

- und der Diffusionsmatrix

$$B_{ab(\vec{x})} = \sum_A r_a^A r_b^A w_{A(\vec{x})} \quad (16.34)$$

16.4.3 Ornstein-Uhlenbeck-Näherung

Man erinnere sich daran, dass die folgende Beziehung gilt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{x} \rangle = \langle \vec{A}_{(\vec{x})} \rangle \quad (16.35)$$

Wenn die Schwankungen klein sind, dann kann man $\langle \vec{A}_{(\vec{x})} \rangle$ durch $\vec{A}_{(<\vec{x}>)}$ approximieren. In diesem Fall wird die stationäre Lösung (falls vorhanden) durch die mittleren Populationen \vec{x}^s definiert, welche folgende Gleichung erfüllen:

$$\vec{A}_{(\vec{x}^s)} = \vec{0} \quad (16.36)$$

Falls man jetzt nur an der Dynamik des Systems in der Nähe des stationären Zustands interessiert ist, ist es manchmal zulässig, eine weitere Näherung vorzunehmen, indem man die Fokker-Planck-Gleichung linearisiert. Dies bedeutet, dass man $\vec{A}_{(\vec{x})}$ um \vec{x}^s in erster Ordnung entwickeln als

$$\vec{A}_{(\vec{x})} = -\mathbf{K} \cdot (\vec{x} - \vec{x}^s) \quad (16.37)$$

wobei \mathbf{K} eine konstante Matrix ist mit

$$K_{ab} = -\nabla_b A_{b(vecx^s)} \quad (16.38)$$

Die Diffusionsmatrix muss nicht erweitert werden, solange sie im stationären Zustand nicht verschwindet. Kann nun folgende Gleichung schreiben:

$$\mathbf{D} = \mathbf{B}_{(\vec{x}^s)} \quad (16.39)$$

Das Ergebnis ist die Ornstein-Uhlenbeck-Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} P_{(\vec{x},t)} = \sum_{a,b} \left[K_{ab} \nabla_a \left[(x_b - x_b^s) P_{(x,t)} \right] + \frac{1}{2} D_{ab} \nabla_a \nabla_b P_{(x,t)} \right] \quad (16.40)$$

Diese finale Form hat den Vorteil, dass eine analytische Lösung für alle Momente (einschließlich der Zwei-Zeit-Korrelationen) bekannt ist. Insbesondere kann die Kovarianzmatrix bestimmt werden. Damit kann die Konsistenz der Annahme überprüft werden, dass die Schwankungen klein sind, indem kontrolliert wird, ob

$$\langle (x_a - x_a^s)^2 \rangle \ll (x_a^s)^2 \quad (16.41)$$

16.4.4 Ein Beispiel

Betrachten wir ein Beispiel mit zwei möglichen Reaktionen:



Wir können dies zu einem eindimensionalen Problem machen, indem wir die Populationsbedingungen $a = \text{konstant}$ setzen. Dies wäre beispielsweise sinnvoll, wenn X ein Molekül in Lösung ist, A ein Molekül eines Feststoffs und B sowie C unlösliche Gasmoleküle sind. Dann erhalten wir eine chemische Mastergleichung für die natürliche Zahl x mit

$$r_1 = 1, \quad r_2 = -2 \quad (16.44)$$

$$w_1(x) = k_1 ax \quad (16.45)$$

$$w_2(x) = k_2 \frac{x(x-1)}{2} \quad (16.46)$$

Die Driftrate und die Diffusionsmatrix sind gegeben durch:

$$A(x) = -x + 2k_1 a \quad (16.47)$$

$$B(x) = x + 4x^2 \quad (16.48)$$

Unter der Annahme kleiner Schwankungen ist der stationäre Zustand:

$$x_s = \frac{k_1 a}{k_2} \quad (16.49)$$

Linearisiert um diesen Wert ergibt sich:

$$K_s = -k_2 \quad (16.50)$$

$$D = x_s + 4x_s^2 = 3 \frac{k_1^2 a^2}{k_2} \quad (16.51)$$

Daraus lassen sich alle statistischen Eigenschaften ableiten. Insbesondere ist die Varianz gegeben durch

$$V_s[x] = \frac{D}{2K} = \frac{3k_1^2 a^2}{4k_2} \quad (16.52)$$

Zur Konsistenzprüfung müssen wir sicherstellen, dass diese sowohl viel größer als Eins als auch viel kleiner als x_s^2 ist. Das heißt:

$$1 \ll \frac{k_1^2 a^2}{k_2} \ll \frac{k_1^2 a^2}{k_2^2} \quad (16.53)$$

sodass beide Bedingungen erfüllt sind, sofern $k_1 a$ ausreichend groß ist.

17 Antworten zu ausgewählten Themen

Zur Frage der Existenz verborgener Variablen in der Quantenmechanik

Eine Grundannahme der stochastischen Mechanik bzw. aus der entsprechenden Herleitung der Schrödinger-Gleichung bestand in der Annahme, dass für ein Teilchen auch in der Quantenmechanik eine Bahn existiert. Im Gegensatz zur klassischen Mechanik ist die unregelmäßig, da sie durch eine stochastische Komponente aufweist (Zitterbewegung)[184]. Zur Darstellung einer Schar solcher Bahnen, aus der man durch die Mittelung das Zeitverhalten der Geschwindigkeitsfelder $v_{(r,t)}$ und $u_{(r,t)}$ erhält, sind also wesentlich mehr freie Parameter notwendig als zum Schluss in Form unabhängiger Scharmittelwerte zur eindeutigen Kennzeichnung des Teilchenzustandes übrigbleiben. Die *überzähligen Koordinaten* oder zusätzliche Freiheitsgrade, die hier zunächst auftreten werden als **verborgene Variablen** bezeichnet.

Von Neumann beweist in seinem Buch [217], dass es solche *verborgenen Variablen* in der Quantenmechanik nicht geben kann. Die hier in Abschnitt ?? gemachte Herleitung der Schrödinger-Gleichung scheint dem zu widersprechen. Allerdings existiert dieser Widerspruch nicht, da sich von Neumann bei seinem Beweis explizit auf die Annahme gestützt, dass zwischen den Observablen des Systems und dem entsprechenden hermiteschen Operatoren eine bijektive Zuordnung besteht. Solange nur Observablen in Betracht gezogen werden, die sich auf systemeigene Kenngrößen des Systems beziehen, ist dieser Beweis uneingeschränkt gültig. Ein wesentliches Merkmal hier in Abschnitte ?? gemachten Herleitung besteht aber gerade darin, statistische Kräfte zuzulassen, die systemextern sind. Koordinaten, die als Folge solcher Größen zusätzlich auftreten, stehen daher nicht in Widerspruch zu von Neumanns Schlussfolgerungen. Auf diesen Zusammenhang wurde immer wieder hingewiesen [?][184]. Eine fundierte Zusammenfassung dieses Zusammenhangs findet sich in [?].

Ein Widerspruch zum **GHZ-Experiment** ist nicht gegeben, da dies explizit *lokale* versteckte Variablen ausschließt, während die hier in der stochastischen Mechanik postulierten verborgenden Variablen *nicht-lokal* Natur sind.

17.0.1 Determinismus und Indeterminismus

Eine Grundlegende Frage, die im Rahmen der stochastischen Mechanik bzw. generell in der Quantenmechanik gestellt wird, ist, ob es einen **objektiven Zufall** gibt.

Mit dem Aufstieg der Naturwissenschaften in der frühen Neuzeit entstand die Ansicht, dass alle grundsätzlich Naturvorgänge berechenbar sind, sofern man alle Parameter kennt. Dies wird als **Determinismus** bezeichnet.¹

Wenn ein Ereignis ohne erkennbaren Grund auftritt, bezeichnen wir es als zufällig. Zum Beispiel besitzen in einem idealen Gas die Atome zu einem bestimmten Zeitpunkt unterschiedliche Energien und Geschwindigkeiten. Wenn man die Temperatur kennen, kennen man auch den Mittelwert der kinetischen Energie und der Geschwindigkeit. Das ideale Gas folgt Gesetzen, aber man kennt die kinetische Energie eines einzelnen Gasmoleküls nicht, es sei denn, sie wird explizit gemessen. Angesichts der vielen Atome im Gas ist es theoretisch möglich, ihre Energien zu bestimmen, praktisch jedoch nicht umsetzbar. Ohne Messung können wir die kinetische Energie aller Moleküle im Gas und eines bestimmten Moleküls nie genau kennen. Erhält man durch eine Messung die kinetische Energie eines bestimmten Moleküls, handelt es sich um *subjektiven Zufall* aufgrund der Unkenntnis über die Dynamik aller Moleküle im Gas. Theoretisch könnte die Dynamik aller Gasmoleküle berechnet werden, was aber einer schieren Anzahl Molekülen in einer Größenordnung von 10^{23} Einzelteilchen de facto sinnlos ist.

Grundlegende Annahme der stochastischen Mechanik ist, dass die Vorgänge auf mikroskopischer Ebene durch die Wechselwirkung mit virtuellen Teilchen bestimmt werden. Da das Verhalten dieser virtuellen Teilchen (zumindest derzeit) nur durch stochastische Modelle beschrieben werden kann, macht es durchaus Sinn hier in der mikroskopischen Ebene einem *echten Zufall* zu postulieren. Allerdings ist es, wie schon in ?? dargelegt, auch möglich, dass das stochastische Modell lediglich – beim Würfeln, oder in der Thermodynamik – auf unserer Unkenntnis der genauen Rahmenbedingungen basiert.

Im Gegensatz zu ?? kann man die Meinung vertreten, dass für die Grundlegenden Aussagen der stochastischen Mechanik hier kein Unterschied zwischen einem objektiven Zufall und einem deterministischen Zufall existiert. Die grundlegende mathematische Beschreibung wäre in beiden Fällen gleich.

17.1 Verschränkung

Die sogenannte **Verschränkung** quantenmechanischer Zustände (engl. *entanglement*) und ihre Konsequenzen haben in der Literatur zur Quantenmechanik eine zentrale Rolle. Sie werden dort als Grundlage der Quantenteleportation, bei Quantencomputern sowie in der Übertragung verschlüsselter Informationen angesehen.

Doch zunächst muss man sich der Frage stellen, welche Rolle die Verschränkung in den verschiedenen Interpretationen der Quantenmechanik spielt.

¹Die Frage, ob der Determinismus oder der Indeterminismus die Physik, insbesondere die Quantenmechanik beherrscht, mündet häufig in philosophischen Diskussionen zum **freier Wille**, die aber nicht Bestandteil dieses Kompendiums sind.

Ein verschränkter Zustand beschreibt ein System aus mehreren Teilchen, bei dem die Zustände der einzelnen Teilchen nicht mehr unabhängig voneinander betrachtet werden können, sondern nur noch im Gesamtkontext. Die Eigenschaften der Teilchen sind dabei miteinander verknüpft – unabhängig von ihrer räumlichen Entfernung. Dieses Phänomen, das sich durch sogenannte Nicht-Lokalität auszeichnet, ist ein zentraler Aspekt der orthodoxen Quantenmechanik.²

Ein häufiges Missverständnis besteht darin, anzunehmen, dass bei einem Zweiteilchensystem die Messung einer Eigenschaft eines Teilchens die Eigenschaft des anderen Teilchens unmittelbar *festlegt*. Teilweise wird sogar behauptet, dass eine Zustandsänderung eines Teilchens den Zustand des anderen augenblicklich beeinflusst. Diese sogenannte instantane (oder *spukhafte*) Fernwirkung wurde 1935 von Einstein, Podolski und Rosen diskutiert. Sie argumentierten, dass die Quantenmechanik unvollständig sei und unbekannte Variablen existieren müssten, um das Verhalten der Teilchen zu erklären.³

Mittlerweile gibt es zahlreiche experimentelle Untersuchungen, die entweder die Fernwirkung belegen oder die Schlussfolgerungen aus der EPR-Arbeit widerlegen sollen. In Gedankenexperimenten wird häufig der Elektronenspin verwendet, um die Fernwechselwirkung zu untersuchen. Wie jedoch in Abschnitt 7 gezeigt, ist der Spin freier Elektronen nach der Stochastischen Mechanik keine inherante Eigenschaft, sondern ein Resultat der Vakuumfluktuationen und daher für entsprechende Experimente ungeeignet.

Daher greifen Experimente meist auf Photonen zurück und messen deren Polarisation. Allerdings werden Photonen als masselose Teilchen nicht direkt durch die Standard-Quantenmechanik beschrieben. Auch bei der Interpretation der Ergebnisse wird oft großzügig vorgegangen.

Ein Beispiel ist das Standardexperiment zur Verschränkung von Alain Aspect.⁴ Dabei werden verschränkte Photonen durch Anregung eines Calcium-Atoms erzeugt. Calcium ist hierfür geeignet, da es zwei Außenelektronen besitzt, die nach Anregung in einem Kaskadenübergang zwei Photonen emittieren. Häufig wird dabei angenommen, dass die Photonen sich genau entgegengesetzt ausbreiten und denselben Abstand zum Atom haben. Aus der Quantentheorie folgt jedoch nur, dass die Energiedichte des Strahlungsfelds angibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit sich die Photonen an einem bestimmten Ort aufhalten. Die Vorstellung einer strikt entgegengesetzten Ausbreitung ist also nicht zwingend korrekt.

Darüber hinaus kann das Calcium-Atom bei der Emission die Impulsdifferenz der Photonen aufnehmen, sodass der Impulserhaltungssatz hier keine Einschränkung darstellt. Diese Aspekte bleiben in Experimenten oft unberücksichtigt, da gewöhnlich nur diametral auseinanderbewegte Photonen untersucht werden. Dadurch bleiben Phänomene, wie Korrelationen von Photonen, die sich nicht in entgegengesetzten Richtungen bewegen, außen vor.

²Nicht-Lokalität bedeutet vereinfacht, dass die Eigenschaften eines Teilchens nicht nur von seiner unmittelbaren Umgebung, sondern auch von entfernten Teilchen beeinflusst werden.

³Siehe hierzu die Arbeit von Einstein, Podolski und Rosen, auch bekannt als EPR-Paradoxon.

⁴Siehe dazu Alain Aspects Arbeiten zur Erzeugung von verschränkten Photonen.

Abschließend sei angemerkt, dass die Stochastische Mechanik durchaus eine Vermittlung von Fernwirkungen über das Medium virtueller Teilchen zulässt, auch wenn diese nicht instantan erfolgt. Wie in Abschnitt ?? beschrieben, widerspricht dies nicht den Bellschen Ungleichungen, die lediglich das Vorhandensein lokaler versteckter Parameter ausschließen. Virtuelle Teilchen stellen keine lokalen versteckten Parameter dar und können, ähnlich wie im Doppelspaltexperiment, Informationen über die Umgebung übertragen.

Ein Grenzfall für Verschränkung

In diesem Abschnitt betrachten wir ein Wasserstoff-Molekül (H_2) unter der Annahme, dass die beiden Kerne immer weiter auseinandergezogen werden, bis sie schließlich makroskopisch voneinander getrennt sind.⁵

Die zwei Elektronen des H_2 -Moleküls sind im gebundenen Zustand nicht unterscheidbar. Sie werden daher durch eine symmetrische Wellenfunktion beschrieben, die sich beim Vertauschen der Elektronen – bis auf das Vorzeichen – nicht ändert. Diese Symmetrie führt dazu, dass die Elektronen miteinander verknüpft bzw. *verschränkt* sind. Im Grundzustand des H_2 -Moleküls kann sich somit jedes Elektron in der Nähe beider Kerne aufhalten.⁶

Abbildung 17.1: Absorption (1) und Emission (2) von Strahlung beim Wasserstoff-Molekül, wobei die H-Atome immer weiter auseinandergezogen werden.

Mit zunehmender Trennung der Kerne ergeben sich jedoch Probleme. Die Symmetrie der Wellenfunktion bleibt bestehen, selbst wenn die Atome makroskopisch getrennt sind. Wird eines der Atome beispielsweise durch einen Laserpuls angeregt und strahlt anschließend Licht ab (siehe Abbildung 17.1), tragen beide Atome zum Strahlungsprozess bei. Für ein gebundenes Molekül ist dies verständlich, doch bei makroskopischer Trennung müsste theoretisch jedes Elektron weiterhin in beiden Atomen mit gleicher Wahrscheinlichkeit vorhanden sein. Daraus würde folgen, dass gleich viele Photonen aus dem angeregten und dem nicht-angeregten Atom emittiert werden.

Experimentell gibt es jedoch keinen Hinweis darauf, dass ein solches Verhalten auftritt. Daher lässt sich feststellen, dass das Konzept der Verschränkung bei makroskopisch getrennten Atomen nicht mehr gilt.

Auflösung des Problems: Um das Problem zu verstehen, betrachte man das Auseinanderziehen des H_2 -Moleküls genauer. Aufgrund der Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen und der

⁵Das in diesem Abschnitt beschriebene Phänomen wird in der Quantenchemie auch als (Spin-)„Symmetriedilemma“ bei der Dissoziation von H_2 bezeichnet.

⁶Im Grundzustand besitzen die beiden Elektronen entgegengesetzten Spin, sodass der Gesamtspin null beträgt. Dieser Zustand wird auch als Singulett-Zustand bezeichnet.

hohen Ionisationsenergie versammeln sich die Elektronen nicht beide um einen Kern, sondern jeweils einzeln um einen der Kerne. Mit wachsendem Abstand der Kerne verlängert sich die *Tunnelzeit* der Elektronen, also die Zeit, die ein Elektron benötigt, um von einem Kern zum anderen zu gelangen. Bei makroskopischer Trennung wird die Tunnelzeit schließlich deutlich größer als die Zeitspanne, die für die Lichtanregung (von der Absorption bis zur Emission) benötigt wird.

Während der Lichtanregung entsprechen die Wahrscheinlichkeitsdichten daher getrennten, neutralen Atomen. Die Elektronen sind in diesem Zeitraum nicht mehr verschränkt und nur das angeregte Atom emittiert Licht. Dieses Verhalten ist konsistent mit dem Konzept von Elektronen als Teilchen und der *Ortsverschmierung* als Wahrscheinlichkeitsverteilung. Es ist offensichtlich, dass eine gemeinsame Wahrscheinlichkeitsverteilung über beide Atomkerne in diesem Fall nicht mehr sinnvoll ist. Die Atome sind als getrennt zu betrachten, und es ergeben sich unterschiedliche Rechenvorschriften je nach Rahmenbedingungen.

Vergleich mit dem Standard-Zugang: Im Standardansatz, bei dem Elektronen als *im Raum verteilt* angesehen werden, wird das oben beschriebene Verhalten nicht unmittelbar berücksichtigt. In solchen Modellen bleibt als einzige Möglichkeit, ein Paradoxon zu deklarieren. Die Stochastische Mechanik zeigt jedoch, dass es sich hierbei nicht um ein Paradoxon handelt, sondern lediglich um eine Änderung der Rahmenbedingungen, die zu angepassten Berechnungsansätzen führt.

17.1.1 Kopplung an die Umgebung

In der orthodoxen Quantenmechanik geht man davon aus, dass das betrachtete System vom Rest des Universums unabhängig ist. Es ist aber tatsächlich nicht möglich, ein System vollständig von der Umgebung zu isolieren. Dies ist eine sofort einleuchtende Ursache der Vakuumfluktuationen. Die Kopplung an die Vakuumfluktuationen kann grundsätzlich *nicht* eliminiert werden.

17.1.2 Stabilität von Atomen

Geschichtliche Einführung: Die Erklärung von Aufbau, Stabilität und Linienspektren von Atomen war eines der vorrangigsten Arbeitsgebiete der Physik Ende des 19. und Anfang des 20. Jahrhunderts.

Rutherford'sches Modell des Wasserstoffatoms bot eine plausible Erklärung für seine Streuexperimente, jedoch blieb unklar, warum das Elektron des Wasserstoffatoms nicht ständig Energie durch Lichtemission verliert und schließlich im Atomkern endet.

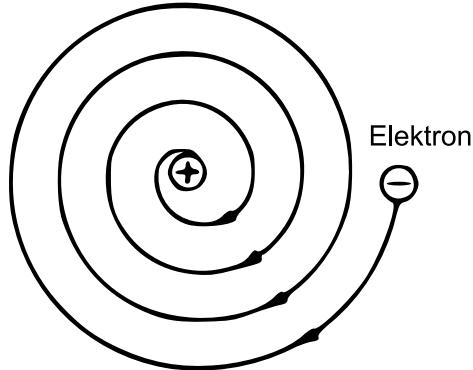


Abbildung 17.2: Instabilität von Atomen im Rutherford'schen Modell.

Eine Erweiterung kam dann mit dem Bohr-Sommerfeldsche Atommodell. Dieses Modell ähnelt einem Planetensystem, mit dem elektrisch geladenen Atomkern im Zentrum und den sich auf Ellipsenbahnen bewegenden Elektronen. Allerdings kann dieses Modell die Stabilität von Atomen nicht erklären, sondern postuliert diese nur. Denn entsprechend der klassischen Elektrodynamik müssten die Elektronen bei ihrer Bewegung um den Kern Energie abstrahlen und damit zwangsweise in den Atomkern stürzen. Dies liegt daran, dass die kreisförmige Bewegung um den Atomkern eine, ständig in Richtung Atomkern, beschleunigte Bewegung ist. Beschleunigte Ladungen wiederum strahlen nach den Gesetzen der Elektrodynamik Energie ab, folglich wären Atome nach der klassischen Elektrodynamik nicht stabil. [284]

Bohrs und de Broglies Modelle lösten dieses grundlegende Problem nicht, sondern umging es, indem es die nicht-radiative Stabilität elektronischer Orbitale postulierte, deren Drehimpulse ganzzahlige Vielfache der reduzierten Planckschen Konstante $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ sind. Später konnte Schrödinger [?] zeigen, dass diese Stabilitätszustände Eigenfunktionen seiner partiellen Differentialgleichung entsprechen. Dennoch blieb rätselhaft, was ein Elektron im niedrigsten Eigenzustand (der keinen Drehimpuls besitzt) daran hindert, vom Kern verschlucht zu werden oder diesem so nahe wie möglich zu kommen.

Mit der Quantenmechanik wurde klar, dass sich ein Elektron im Grundzustand des Wasserstoff-Atoms nicht im Kreis bzw. in einer Ellipse um den Kern bewegt. Der mittlere Drehimpuls des Elektrons im Grundzustand ist gleich Null. Damit wurde das anschauliche Bohr-Sommerfeldsche Atommodell zur Erklärung des Atomaufbaus hinfällig. Allerdings wird es im Standardzugang zur Quantenmechanik nicht durch ein anderes anschauliches Modell ersetzt, da man hier üblicherweise die Vorstellung vom Elektron als lokalisiertes Teilchen aufgibt. Indem man sich vom Bild eines lokalisierten Teilchens verabschiedet, vermeidet man jede Diskussion über die Ursache

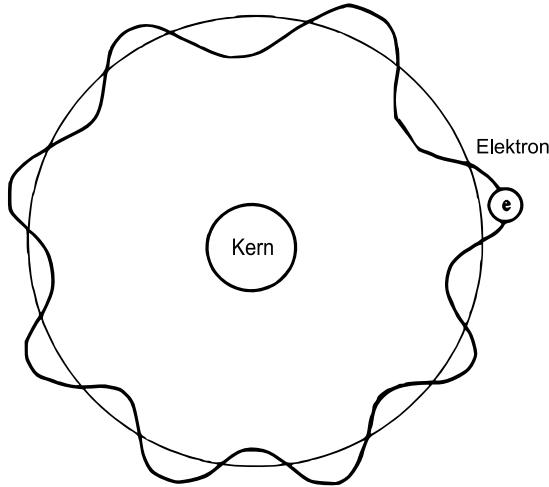


Abbildung 17.3: Instabilität von Atomen im Modell nach de Broglie.

für die Stabilität von Atomen und die Form des Grundzustands.

Bei der Erweiterung von Schrödingers Theorie auf Mehrelektronen-Atome wurde klar, dass auch die Lösungen dieser N -Elektronen-Gleichung keinen Hinweis auf den Mechanismus hinter der atomaren Stabilität liefern.

Erklärung der Stabilität durch Streuung aufgrund der Vakuumfluktuationen: Der Ansatz der stochastischen Mechanik ist hier jedoch ein grundsätzlich anderer und die Stabilität von Atomen wird nicht postuliert, sondern erschließt sich sofort durch die Theorie als solchem.

Zur Veranschaulichung kann man von einem einfachen, naiven Bild für einander Wasserstoffatom ausgehen. Hierzu werden zwei Annahmen getroffen:

- Der Atomkern, das heißt das Proton, wird als ruhend angenommen. Das Elektron kann sich in beliebiger Bahn um den Kern bewegen. Diese Annahme ist deshalb sinnvoll, da ein Proton fast 2000-mal schwerer ist als ein Elektron.
- Weiterhin nimmt man vereinfacht an, dass zwischen Elektron und Proton lediglich die klassische elektrostatische Anziehungskraft wirkt. Es besteht allerdings die Möglichkeit, dass das Coulombsche Gesetz bei sehr kleinen Abständen zwischen Elektron und Proton (im Bereich von klassischem Elektronen- bzw. Protonenradius) nicht mehr uneingeschränkt gültig ist. Für die hier dargestellte Betrachtung kann dies vernachlässigt werden.⁷

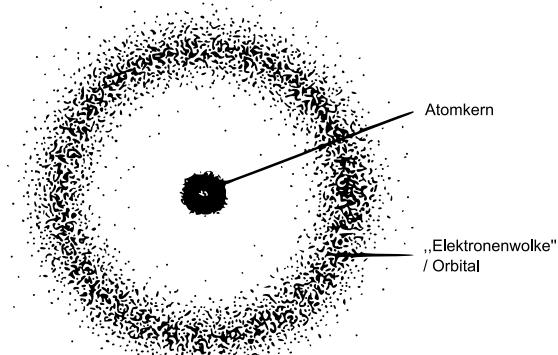


Abbildung 17.4: Atommodell nach Schrödinger.

ABBILDUNG FEHLT NOCH!

Abbildung 17.5: 5-5.

Entsprechend der Grundannahmen der stochastischen Mechanik befinden sich im Vakuum virtuelle Teilchen, welche sich genauso wie das Elektron im Potential des Atomkerns bewegen und welche gleichzeitig das Elektron durch Stöße aus der Ruhelage im Zentrum des Kerns wegstreuen. Dies ist vergleichbar mit thermischen Energieschwankungen die Gasmoleküle der Erdatmosphäre aus Positionen nahe der Erdoberfläche gegen das Gravitationsfeld bis in die Stratosphäre hinausstreuen.

Betrachtet man die Form des Grundzustandes, welche in Abb. 17.1.2 dargestellt ist, so erkennt man, dass das Elektron durch Stöße mit virtuellen Teilchen vom Kern weggestreut. Da es keine ausgezeichnete Richtung für die Streuung gibt, erhält man ein zentrale-symmetrisches Bild, wobei die Aufenthaltswahrscheinlichkeit mit zunehmender Nähe zum Kern steigt. Die Bewegung des Elektrons selbst ist dabei aber keine geschlossene Kreisbahn. Vielmehr ergibt sich das Bild als Überlagerung aus vielen Streuvorgängen des Elektrons vom Kern weg im Scharmittel bzw. in diesem Fall auch im Zeitmittel.

Anmerkung 30:

Entsprechend dieser Überlegung ist es theoretisch möglich, dass positiver Kern und Elektron kollidieren. Dies ist aufgrund der Stöße mit den Vakuumfluktuationen und bei den kleinen Radien

⁷Hinweis: Auch bei der hier im Kompendium beschriebenen Herleitung der Schrödinger-Gleichung wurde dieser Umstand stillschweigend vernachlässigt.

von Elektron und Proton lediglich unwahrscheinlich, aber nicht unmöglich. Man beobachtet bei Atomen mit höherer Protonenzahl tatsächlich unter bestimmten Umständen den sogenannten Elektroneneinfang. Hierbei verschmilzt ein Elektron in der Regel aus der kernnächsten *Schale* (sog. *K-Einfang*) mit einem Proton zu einem Neutron und einem Neutrino.

Kommt man noch einmal zurück auf den erwähnten sehr einfachen Vergleich zwischen Molekülen in der Lufthülle und dem Wegstreuen des Elektrons vom Kern durch die virtuellen Teilchen. Wendet man dieses sehr vereinfachte Modell an, so kann man damit den mittleren Abstand des Elektrons vom Kern berechnen. Dazu gehen man von der Annahme aus, dass durch die Vakuumfluktuationen in der Zeit Δt im Mittel die Energie

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar/2$$

an das Elektron übertragen und wieder abgegeben wird. Man beachte hierzu ?? und ??, wobei man das Ergebnis des Scharmittels wieder auf das Zeitmittel überträgt. Als Ergebnis dieser Betrachtung erhält man einen mittleren Aufenthaltsradius, der sehr gut mit dem *Bohrschen Radius* übereinstimmt.

Einfache Rechnung hierzu: Wie bereits angedeutet, ist eine der zentralen Aussagen dieser Darstellung, dass Vakuumfluktuationen für die Stabilität der Atome verantwortlich sind und somit auch die Existenz von atomarer und kondensierter Materie im Universum erklären. Es wird sich hier zunächst auf das Wasserstoffatom beschränkt. Als Ergebnis erhält man eine grobe Schätzung seiner linearen Dimension, die sich aus diesen Fluktuationen ergibt. Die grundsätzlichen Überlegungen gelten analog für jedes andere Atom des Periodensystems.

Wie schon gesagt ist die Grundannahmen, dass ein Elektron durch n aufeinanderfolgende und gleiche Portionen kinetischer Energie ΔE_{kin} von seiner Position in der Nähe des Kerns weggestoßen wird, sodass es sich in kleinen Zeitschritten Δt_ν entlang des nuklearen Coulomb-Potentials zur Atomperipherie bewegt. Diese Zeitschritte sind implizit durch folgende Gleichung definiert:

$$\Delta E_{\text{kin}} \Delta t_\nu = \int_{t_\nu}^{t_\nu + \Delta t_\nu} \frac{m_0}{2} \dot{r}_{(t)}^2 dt$$

Hierbei bezeichnet m_0 die Masse des Elektrons und $\dot{r}_{(t)}$ die radiale Geschwindigkeit des Elektrons in einem sphärischen Koordinatensystem mit dem Atomkern als Ursprung.

Für die gesamte übertragene Energie ΔE innerhalb eines Zeitintervalls $\frac{\Delta t}{2}$ gilt somit:

$$\Delta E_{\text{kin}} \frac{\Delta t}{2} = \sum_{\nu=1}^n \Delta E_{\text{kin}} \Delta t_\nu = \int_0^{\frac{\Delta t}{2}} \frac{m_0}{2} \dot{r}_{(t)}^2 dt \quad (17.1)$$

Am Ende dieses Zeitintervalls hat das Elektron seine letzte Portion kinetischer Energie aufgebraucht und kommt in einer Entfernung R vom Kern zum Stillstand. Man könnte ebenso sagen, dass das Elektron während des Zeitintervalls $\frac{\Delta t}{2}$ die mittlere kinetische Energie

$$\Delta E_{\text{kin}} = \frac{2}{\Delta t} \int_0^{\frac{\Delta t}{2}} \frac{m_0}{2} \dot{r}_{(t)}^2 dt \quad (17.2)$$

besessen hat.

Beim Aufstieg im nuklearen Potential wird diese mittlere Energie, die durch das Vakuum bereitgestellt wird, schließlich verbraucht, wenn das Elektron die Entfernung R vom Kern erreicht. Im folgenden gleich langen Zeitintervall fällt das Elektron zurück zum Kern, wobei es die gewonnene kinetische Energie wieder an das Vakuum abgibt. Die Dauer des gesamten Fluktuationsprozesses beträgt also $\Delta t/2$.

Wenn das Elektron in $r = R$ zum Stillstand kommt, ist seine kinetische Energie bei einer kleineren Entfernung $r < R$ durch

$$\frac{m_0}{2} \dot{r}^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \quad (17.3)$$

gegeben, wobei e die Elementarladung und ϵ_0 die Permittivität des Vakuums ist. Dies kann umgeschrieben werden als

$$\dot{r} = \frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{1}{r} - \frac{1}{R}}$$

oder alternativ:

$$\frac{dt}{dr} = \beta \sqrt{\frac{R \cdot r}{R - r}}, \quad (17.4)$$

wobei

$$\beta = \frac{1}{e} \sqrt{2\pi m_0 \epsilon_0} \quad (17.5)$$

ist.

Setzt man die Gleichung 17.2 in 17.3 ein, so ergibt sich:

$$\Delta E_{\text{kin}} \frac{\Delta t}{2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^R \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R} \right) \frac{dt}{dr} dr \quad (17.6)$$

Hier wurde die untere Integrationsgrenze näherungsweise mit $r = 0$ gleichgesetzt.

Wenn man nun Gleichung 17.4 verwendet und das Integral berechnet, erhält man

$$\Delta E_{\text{kin}} \cdot \Delta t = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\pi} \pi \beta \sqrt{R} \quad (17.7)$$

Gemäß der Beziehung

$$\Delta E \cdot \Delta t = f \quad \text{mit} \quad f \approx 1 \text{ to } 2$$

ergibt sich für die linke Seite $f \cdot \hbar$. Daher ergibt sich, wenn man dies und β aus Gleichung 17.5 in Gleichung 17.5 einsetzt und nach R auflöst, folgende Beziehung:

$$R = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{m_0 e^2}$$

wobei hier $f = 2,2$ als einen der zulässigen Werte für f eingesetzt wurde. Dieser *Stopp-Wert* von R ist der Bohrsche Radius, der allgemein eine fundamentale Länge in der Atom-, Molekül- und Festkörperphysik darstellt.

Der Bohrsche Radius geht ursprünglich auf das *semi-klassische Bohrsche Atommodell* zurück, bei dem sich das Elektron in Kreisbahnen um den Kern bewegt. Für die innerste Kreisbahn, das heißt den Grundzustand des Elektrons, legte Bohr dabei den Drehimpuls \hbar fest. Setzt man die resultierende Zentrifugalkraft gleich der elektrostatischen Anziehung zwischen Elektron und Kern, so erhält man einen Gleichgewichtsradius, den *Bohrschen Radius* a_0 .

Wie allerdings aus der Abb. 17.1.2 sichtbar wird, gibt es allerdings in der räumlichen Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Grundzustands keinen ausgezeichneten Radius. Der Erwartungswert für den Ort ist Null, was bei einer kugelsymmetrischen Wahrscheinlichkeitsverteilung auch sofort offensichtlich ist.

Nun gibt es in der Quantenmechanik jedoch eine weitere Fragestellung, in der neben der räumlichen Wahrscheinlichkeitsverteilung $\rho_{(r)}$ die Größe $r^2 \rho_{(r)}$ eine Rolle spielt.

Hier geht es darum, bis zu welchem Abstand zwei sich nähern Wasserstoff-Atome einander nicht spüren. Offensichtlich ist dies der Fall, solange die Atome einander ladungsneutral erscheinen. Doch es stellt sich die Frage, bis zu welchem Abstand dies erfüllt ist.

Betrachtet man dazu zunächst eine Punktladung, die sich einem Wasserstoff-Atom bis zum Abstand r nähern. Diese spürt dann eine effektive Ladung

$$Q_{eff} = e - 4\pi e \int_0^r \rho_{(r)} r'^2 dr'$$

Die effektive Ladung steigt von Null an und erreicht ihren steilsten Anstieg dort, wo $r^2 p(r)$ maximal ist. Dieser Maximalwert liegt genau beim Bohrschen Radius. Wenn sich zwei Atome so weit annähern, dass sich ihre Elektronendichten überlappen und sie einander nicht mehr ladungsneutral erscheinen, nimmt die Abstoßung (Repulsion) beim Doppelten des Bohrschen Radius am stärksten zu.

Mathematisch ergibt sich der Ausdruck $r^2 \rho_{(r)}$ beim Übergang von kartesischen zu Kugelkoordinaten. Er repräsentiert die Wahrscheinlichkeitsdichte in konzentrischen Schalen um den Ursprung, welche beim Bohrschen Radius a_0 ein Maximum erreicht (siehe Abbildung ??). Es ist jedoch wichtig, den Unterschied zwischen der räumlichen Aufenthaltswahrscheinlichkeit und der Aufenthaltscheinlichkeit in Kugelschalen zu betonen.

Oft wird in quantenmechanischen Lehrbüchern fälschlicherweise der Eindruck vermittelt, dass es sich bei $r^2 \rho_{(r)}$ um die räumliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit handelt, was jedoch nicht korrekt ist.

ABBILDUNG FEHLT NOCH!

Abbildung 17.6: 5-5.

$$\beta = \frac{e^2}{2\pi m_0 \epsilon_0}$$

Setzt man diese Gleichung in die Integrale ein, ergibt sich nach weiteren Schritten für den **Bohrscher Radius**:

$$R = 4\pi \epsilon_0 \frac{\hbar^2}{m_0 e^2}.$$

Dies ist eine fundamentale Länge in der Atom-, Molekül- und Festkörperphysik.

17.1.3 Zusammenhang zwischen den statistischen Vakuumkräften und den Schwankungen der Energie um ihren klassischen Erhaltungswert

In der Theorie der Brownschen Bewegung ergibt sich für die mittlere kinetische Energie des betrachteten Teilchens bei Abwesenheit äußerer Kräfte

$$\overline{\left(\frac{\delta p^2}{2m_0}\right)} = \frac{3}{2}k_bT \quad (17.8)$$

Ist ein äußeres Kraftfeld $\vec{F}_{(\vec{r})}$ vorhanden, so tritt eine zusätzliche kinetische Energie auf, die durch den nicht mehr verschwindenden Mittelwert von $\overline{\vec{p}_{(t)}}$ bestimmt wird. Der Ausdruck $\overline{\Delta p^2}$ in 17.8 stellt in diesem Fall die mittlere quadratische Schwankung von \vec{p} um diesen Mittelwert dar. Die gesamte kinetische Energie des Brownschen Teilchens besteht also im Scharmittel aus einem Anteil E_{konv} , der von seiner konvektiven, durch $\overline{\vec{p}_{(t)}}$ beschriebenen Bewegung herrührt und einem Schwankungsanteil ΔE :

$$E_{kin} = E_{konv} + \Delta E \quad (17.9)$$

wobei ΔE durch 17.8 gegeben ist. Dieselben statistischen Kräfte, welche zu der mittleren Energieschwankung ΔE des Brownschen Teilchens führen, bewirken im Scharmittel innerhalb der Zeit τ seine Abbremsung zu praktischem Stillstand, wenn man die äußere Kraft abschaltet. Die Zeit τ kann in diesem Sinne

als charakteristische Wirkungszeit der statistischen Kräfte angesehen werden, welche gleichzeitig für die Energieschwankung ΔE am Brownschen Teilchen verantwortlich sind. Führt man 17.8 in die Definition ?? des Diffusionskoeffizienten ein, so ergibt sich:

$$\Delta E\tau = \frac{3}{4} \cdot 2\nu m_0 \quad (17.10)$$

Überträgt man diese Beziehung auf ein quantenmechanisches Teilchen, das unter Wirkung von Vakuumkräften eine (nichtdissipative) Brownsche Bewegung ausführt, so hat man nach ?? $2\nu m_0$ durch \hbar zu ersetzen. Man gelangt somit zu der Beziehung

$$\Delta E\tau = \frac{3}{4}\hbar \quad (17.11)$$

die den Zusammenhang zwischen der charakteristischen Wirkungszeit der statistischen Kräfte und der durch sie bewirkten Energieschwankung um den klassischen Erhaltungswert ?? herstellt.

Man kann nun das Ergebnis auch wie folgt beschreiben:

Die Existenz von statistischen Vakuumkräften hat Verletzungen des Energieerhaltungssatzes zur Folge. Das Produkt aus der mittleren Energieschwankung ΔE und der mittleren Zeitdauer τ dieser Schwankung ist gleich $3/4\hbar$.

Auch andere Effekte lassen sich unmittelbar als Folge der Beziehung 17.11 verstehen. Dazu gehören der Tunneleffekt und die Nullpunktsbewegung von Atomen in Molekülen und Festkörpern am absoluten Temperaturnullpunkt. Diese Nullpunktsbewegung, die nach 17.9 für $T = 0$ wegen $E_{konv} = 0$ mit der Nullpunktsenergie

$$E_{kin} = \Delta E$$

verknüpft ist, tritt besonders auffällig beim flüssigen ^4He in Erscheinung, wo sie das Kristallisieren der Flüssigkeit bei noch so niedriger absoluter Temperatur verhindert. Schließlich folgt aus 17.11 auch das Auftreten einer gewissen *Ortsunschärfe* des betrachteten Teilchens unter Wirkung der Vakuumkräfte. Analog zu 17.8 folgt für die Schwankung der x-Komponente des Teilchenimpulses (bei Abwesenheit äußerer Kräfte):

$$\overline{\left(\frac{\delta p_x^2}{2m_0} \right)} = \frac{1}{2}k_b T \quad (17.12)$$

Aufgrund derselben Argumentation wie zuvor ergibt sich dann analog zu 17.11:

$$\frac{\delta p_x^2}{2m_0} \cdot \tau = \frac{\hbar}{4} \quad (17.13)$$

(Dabei haben wurde $\Delta p_x = \sqrt{\Delta p_x^2}$ gesetzt.)

Sei δv_x die mit Δp_x verknüpfte Geschwindigkeitsschwankung des Teilchens, so ist

$$\frac{\Delta p_x}{m_0} = \Delta v_x$$

und

$$\Delta x = \Delta v_x \tau$$

der in x-Richtung aufgrund dieser Geschwindigkeit zurückgelegte Weg. Also folgt aus 17.13:

$$\Delta p_x \Delta x = \frac{\hbar}{2}$$

Für die y- und z-Koordinaten ergeben sich entsprechende Beziehungen. Zum Abschluß soll ausdrücklich darauf hingewiesen werden, dass die Beziehung **17.11**:

$$\Delta E \tau = \frac{3}{4} \hbar$$

im Prinzip nichts mit der üblicherweise diskutierten *Energie-Zeit-Unschärfe* zu tun hat. Der in diesen Diskussionen gemeinte Zusammenhang betrifft die Frequenzunschärfe $\Delta\omega$, z. B. bei der Emission einer atomaren Strahlung mit der Frequenz

$$\omega = \frac{1}{\hbar} (E_1 - E_2)$$

bei der also ein Übergang vom Energieniveau E_1 zum Niveau E_2 auftritt. Die Frequenzunschärfe dieser Strahlung und die Emissionszeit Δt stehen dabei in dem Zusammenhang

$$\delta\omega \Delta t \geq \frac{1}{2}$$

Dies ist eine Konsequenz des Fouriertheorems für eine Zeitfunktion und deren Frequenzspektrum. Multipliziert man diese Relation mit \hbar , so ergibt sich mit $\Delta E = \hbar\delta\omega$:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

wobei man jetzt ΔE die Bedeutung einer Unschärfe der involvierten Atomniveaus bei Ankopplung an das Strahlungsfeld beilegen kann. Es ist also klar, dass ΔE hier nichts mit der Energieschwankung aufgrund von Vakuumkräften zu tun hat, obwohl die beiden Energie-Zeit-Relationen formal fast identisch sind. Ganz Entsprechendes gilt für die in der Literatur diskutierte *Orts-Impuls-Unschärfe*.

Nullpunktsschwingungen und Lokalisierungsenergie

Die vorangegangenen Überlegungen zur Stabilität von Atomen (vgl. Abschnitt 17.1.2) gelten in ähnlicher Weise für einen harmonischen Oszillatoren, dessen potenzielle Energie in einem Kugelkoordinatensystem gegeben ist durch

$$V(r) = \frac{1}{2}m_0\omega^2r^2, \quad (17.14)$$

wobei m_0 die schwingende Punktmasse ist und ω für die Kreisfrequenz steht. Man geht wieder von Gl. 17.2 aus und kommt zu

$$\frac{1}{2}m_0\dot{r}^2 = \frac{1}{2}m_0\omega^2(R^2 - r^2), \quad (17.15)$$

Hierbei bezeichnet R den Punkt, an dem die Masse zum Stillstand kommt und ihre Bewegung umkehrt. Alle Teile des Gedankengangs aus Abschnitt 17.1.2 werden übernommen und man erhält

$$R = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0\omega}} \quad (17.16)$$

Hiermit wurde der Wert für f festgelegt, der an der unteren Grenze des zulässigen Bereichs liegt:

$$f = \frac{\pi}{4} \approx 0,78 < 2$$

Die klassische Energie eines harmonischen Oszillators für eine Schwingungsamplitude R ist somit gegeben durch

$$\Delta E = \frac{1}{2}m_0\omega^2R^2 \quad (17.17)$$

Setzt man R in Gl. 17.16 ein, erhält man den bekannten Ausdruck für die Nullpunktenergie:

$$\Delta E = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (17.18)$$

Die durchschnittliche potentielle Energie beträgt ein Drittel dieser Energie

$$\bar{\mathbf{V}} = \frac{1}{2} m_0 \omega^2 \overline{\Delta r^2} \quad (17.19)$$

$$= \frac{1}{3} \cdot \frac{\hbar \omega}{2} \quad (17.20)$$

mit

$$\bar{r^2} = \frac{1}{R} \int_0^R r^2 dr$$

Man kann einen effektiven Durchmesser des Oszillators definieren, indem man

$$d_0 = \sqrt{3\overline{\Delta r^2}} \quad (17.21)$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{m_0 \omega}} \quad (17.22)$$

Unter Verwendung von Gl. 17.18 kann diese Beziehung umformuliert werden

$$\Delta E = \frac{\hbar}{2m_0} \cdot \frac{1}{d_0^2} \quad (17.23)$$

Dieser Ausdruck wird gelegentlich auch als *Lokalisierungsenergie* bezeichnet. Sie nimmt offensichtlich mit abnehmendem d_0 zu.

Beispiel: Gleichung 17.21 veranschaulicht ein interessantes Merkmal oszillierender Atome als Bestandteile bestimmter Materie. Betrachten man z. B. flüssiges Ne⁸:

Die Atome halten bei einer bestimmten Temperatur T einen bestimmten durchschnittlichen Abstand ein. Dieser Abstand schrumpft, wenn man die Temperatur senkt, und die Atome bilden schließlich ein festes Gitter, in dem sie lediglich eine Nullpunktsbewegung um eine (mehr oder weniger) regelmäßige Anordnung von Ruhepositionen bei $T = 0$ ausführen. Die letztgenannte Situation ist jedoch nur möglich, wenn die Breite d_0 ihrer Nullpunktsbewegung erheblich kleiner ist als der Abstand zwischen benachbarten Ruhepositionen. Die Flüssigkeiten aller Edelgase erfüllen diese Bedingung mit Ausnahme von flüssigem He. Da die Atommasse von He am kleinsten ist, ist die Breite am größten. Es stellt sich heraus, dass ein stabiles Gitter nicht mehr gebildet

⁸Oder ein anderes Edelgas (außer Helium) als einfaches Einatomiges Modellsystem. Grundsätzlich sind die Aussagen auch für mehratomige Gasmoleküle gültig.

werden kann. Flüssiges He schmilzt gewissermaßen in seiner eigenen Nullpunktsbewegung. Dennoch kann es durch Anlegen von Druck verfestigt werden, wodurch sich der Abstand zwischen den Atomen verringert und dadurch der Potentialtopf, in dem die Atome schwingen, enger wird. Die Schwingungsfrequenz ω in diesem engeren Potentialtopf ist höher als zuvor, und aufgrund von Gleichung 17.21 nimmt d_0 ab, so dass nun ein stabiles Gitter möglich ist.

Die Existenz der Nullpunktsbewegung von Atomen in Molekülen wurde erstmals von Mullikan [?] im Jahr 1924 nachgewiesen.

Ein noch spektakuläreres Experiment wurde 1942 von Clusius [324] durchgeführt. Er adsorbierte leichte Wasserstoffmoleküle an einer festen Oberfläche, wo sie nicht zerfallen und somit durch ein schwächeres (negatives) Adsorptionspotential gebunden sind, in dem sie (fast harmonische) Schwingungen ausführen können. Die zugehörige Nullpunktenergie ΔE liegt um den Betrag

$$\Delta E = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (17.24)$$

über dem niedrigsten Punkt \mathbf{V}_0 des Adsorptionspotentials. Der Absolutwert des letzteren wäre die Sublimationsenergie des Wasserstoffs in Abwesenheit der Nullpunktsbewegung.

Aufgrund seiner Anwesenheit misst man stattdessen einen kleineren Betrag $|\mathbf{V}_0 + \Delta E|$. Ersetzt man den leichten Wasserstoff durch schweren Wasserstoff, bleibt das Adsorptionspotential unverändert, da es nur durch die Wechselwirkung zwischen den Wasserstoff- und den Substratelektronen gesteuert wird. Wegen der größeren Masse des schweren Wasserstoffs und wegen der

$$\omega = \sqrt{\frac{\kappa}{m_0}} \quad \kappa = \text{effektive Federkonstante} \quad (17.25)$$

wird ΔE kleiner, und die Sublimationsenergie nimmt zu. Clusius ermittelte zwei Sublimationsenergien,

$$\begin{aligned} 184 \text{ cal/mol} &\quad \text{für leichten Wasserstoff} \\ \text{und } 274 \text{ cal/mol} &\quad \text{für schweren Wasserstoff (Deuterium).} \end{aligned}$$

Dieser große Unterschied ist ausschließlich auf das Vorhandensein der Nullpunktsbewegung und somit auf die *Vakuumfluktuationen* zurückzuführen.

ABBILDUNG FEHLT NOCH!

Abbildung 17.7: Schematische Darstellung des Tunneleffektes.

17.1.4 Tunneleffekt

Ein Phänomen, das dem Teilchenverhalten im Doppelspalteperiment ähnlich verblüffend ist, ist der sogenannte **Tunneleffekt**. Um dies zu erklären, betrachte man Abb. 17.1.4.

Ein Teilchen, das sich mit der Energie E in einer Potentialmulde bewegt, kann sich klassisch nur zwischen den beiden Umkehrpunkten x_1 und X_2 bewegen.

Obwohl seine Energie ausreichen würde, um sich vom Punkt x_3 nach rechts zu bewegen, kann das Teilchen die Barriere der Stelle x_m im klassischen Fall nicht überwinden. Dafür wäre eine zusätzliche Energie von

$$\Delta E = E_{(x_n)} - E_{(x_2)}$$

notwendig. Nach der stochastischen Mechanik ist leicht ersichtlich, dass diese zusätzliche Energie dem Teilchen durch stochastische Kräfte kurzzeitig zugeführt werden kann.

Somit ist das Überwinden der Barriere kein Mysterium, sondern hängt von der Wahrscheinlichkeit des Auftretens ausreichend großer Kräfte im Rahmen der Fluktuationen ab.⁹

Beharrt man jedoch auf der herkömmlichen Vorstellung eines *absolut leeren Vakuums* ohne Fluktuationen, so ist das Ausbrechen des Teilchens aus der Potentialmulde nur möglich, wenn es sich irgendwie durch die Barriere bewegt oder durch sie hindurch *tunnelt*. Aus dieser Vorstellung leitet sich der Name des Phänomens ab. Die Eleganz der stochastischen Mechanik zeigt sich genau hier im Effekt des Tunnels, der sehr plausibel und nachvollziehbar hergeleitet wird, während bei der orthodoxen Quantenmechanik der Effekt des Tunnels intuitiv nicht erfassbar ist.

17.1.5 Wellenförmige Struktur der Wahrscheinlichkeitsdichten für Teilchen in Potentialen

Für Teilchen, die in einem Potential im Zustand niedrigster Energie gebunden sind, ergibt sich in der Quantenmechanik eine glatte, nicht-wellenförmige Verteilung ihrer Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte. Dieser Zustand wird als Grundzustand des Teilchens bezeichnet. Beispiele hierzu sind die Wahrscheinlichkeitsdichten im Wasserstoffatom (siehe ??), aber auch der einfache Fall eines Teilchens in einem parabelförmigen Potentialtopf (Harmonischer Oszillator, Abb. 17.1.5) für $n = 0$.

⁹Insgesamt wirken dabei die stochastischen Kräfte im quantenmechanischen Fall so, dass die Energie im zeitlichen Mittel konstant bleibt, also erhalten bleibt.

ABBILDUNG FEHLT NOCH!

Abbildung 17.8: Wellenförmige Struktur der Wahrscheinlichkeitsdichten für Teilchen in Potentia- len.

In sogenannten angeregten Zuständen mit höherer Energie zeigt die Wahrscheinlichkeitsdichte des betreffenden Teilchens eine wellenförmige Verteilung, wie beispielsweise in Abb. 17.1.5 für $n > 0$ dargestellt. In der konventionellen Quantenmechanik wird dies auf die *duale Natur* des quantenmechanischen Teilchens angesehen. Nach der orthodoxen Quantenmechanik verhält es sich sowohl wie eine Welle als auch wie ein Teilchen, abhängig von den jeweiligen Versuchsbe dingungen.

Aus der rein korpuskularstatistischen Sicht der stochastischen Mechanik ergibt sich jedoch das Phänomen einer wellenförmigen Wahrscheinlichkeitsdichte ganz zwangslässig. Sehr einfach kann dies am Beispiel des harmonischen Oszillators (Abb. 17.1.5) erläutert werden:

Ein klassisches Teilchen befindet sich im Grundzustand des harmonischen Oszillators im tiefsten Punkt des Potentials. Wenn man nun Energieschwankungen ΔE zulässt, die das Teilchen aus seiner Ruhelage herausbewegen, können diese nur positiv sein, das heißt, sie führen dem Teilchen Energie zu.

Im Gegensatz dazu hat das Teilchen bei einer klassischen Bewegung in diesem Potential mit der Geschwindigkeit v^{10} bereits eine kinetische Energie, die es vorübergehend an das Vakuum abgeben kann. Nach der Abgabe der Energie muss das Teilchen natürlich wieder auf seine ursprüngliche Energie kommen, damit der Vorgang eine Energiefluktuation im Sinne des hier hergeleiteten Konzepts ist.

Durch abwechselndes Abbremsen und Beschleunigen innerhalb eines bestimmten Zeitintervalls Δt hält sich das Teilchen entlang der x -Achse in den einzelnen Intervallen Δx unterschiedlich lange auf, was bedeutet, dass seine Aufenthaltswahrscheinlichkeit oszilliert. Die Periode lässt sich ähnlich wie im Abschnitt zur Stabilität von Atomen (17.1.2) berechnen, wenn man für die Wirkdauer der Kräfte ebenfalls

$$\Delta E \Delta t \approx \hbar/2$$

ansetzt. Damit erhält man die in der orthodoxen Quantenmechanik bekannte de Broglie-Beziehung für Materiewellen.

Bei einer freien Bewegung eines Teilchens kann es keinen ausgezeichneten Punkt geben, auf den der Beginn einer Periode bezogen sein könnte. Somit ergibt sich keine oszillierende Wahrscheinlichkeitsdichte. Aber bei einer Hin- und Herbewegung, wie bei einem harmonischen Oszillator

¹⁰Also in einem angeregten Zustand

oder in einem Potentialtopf, sind die klassischen Umkehrpunkte solche ausgezeichneten Stellen. Hier fallen die Punkte großer Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei der Hinbewegung mit denen bei der Rückwärtsbewegung zusammen, und der wellenförmige Charakter der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte wird deutlich. Man findet große Intervalle (*Wellenlängen*) für große Aufenthaltswahrscheinlichkeit, wo v klein ist, also in Richtung der klassischen Umkehrpunkte, und kleine Intervalle, wo v groß ist, also um das Potentialminimum herum. Jenseits der klassischen Umkehrpunkte, wo eine klassische Bewegung nicht mehr möglich ist, verhält sich die Wahrscheinlichkeitsdichte ähnlich wie im Grundzustand, also glatt und monoton abfallend.

Man erkennt also, dass die wellenförmige Struktur der Wahrscheinlichkeitsdichte eines Teilchens nach der stochastischen Mechanik nicht einem *Welle-Teilchen-Dualismus*, also der Eigenschaft eines Teilchens mal Teilchen, mal Welle zu sein, zugeordnet werden muss. Es ist vielmehr eine Eigenschaft des Vakuums, Energiefluktuationen zuzulassen.

17.1.6 Teilchen in der Quantenmechanik

Ist ein Elektron jetzt ein Teilchen oder eine Welle?

Ein Elektron ist keine klassische Billardkugel, deren zukünftige Bahn aus ihrem jetzigen Bewegungszustand sich vorausberechnen lässt. Es ist aber auch keine oszillierende gauß förmige Dichtewolke, die mit der Zeit auseinanderfließt.

Der Teilchenbegriff

Auch in der Quantenphysik ist ein Teilchen ein physikalisches Objekt, das *abgezählt* werden kann.

Wenn also durch eine Messung festgestellt werden kann, dass von einem Objekt 0, 1, 2 oder mehr Stück vorhanden sind, dann handelt es sich in jeglichem Sinn um Teilchen.

Elektronen, Protonen etc. sind nach dieser Definition in jedem Fall ein Teilchen. Sie sind Träger von bestimmten unveränderlichen Eigenschaften wie einer Ruhemasse ¹¹, elektrischer Ladung. Häufig wird hier auch der Spin genannt. Ob es sich beim Spin um eine intrinsische Eigenschaft handelt, hängt von der Interpretation der Quantenmechanik ab. Für die stochastische Mechanik ist der Spin keine intrinsische Eigenschaft von Teilchen (siehe Kap. 7).

Nach der stochastischen Mechanik verhält sich ein quantenmechanisches Teilchen von seinen intrinsischen Eigenschaften grundsätzlich wie ein klassisches, nur dass seine extrinsichen Eigenschaften wie Energie, Impuls, Drehimpuls, Aufenthaltsort durch die Vakuumfluktuationen überlagert werden.

¹¹Die Ruhemasse kann auch Null sein (z. B. bei Photonen), allerdings werden diese Teilchen dann nicht durch die (nichtrelativistische) Schrödingergleichung beschrieben.

Wie in Abschnitt 5.1.3 dargelegt, beschreiben die stochastischen Gleichungen von Langevin und Fokker-Planck eine Brownsche Bewegung. Allerdings sind die Struktur der Teilchen und die mit Messfehlern verbundene Unsicherheiten keine Bestandteile dieser Gleichungen. Demzufolge sollte es keine grundlegenden Unterschiede zwischen makroskopischen und quantenmechanischen Teilchen ($\approx 10^{-4}$ cm und $\approx 10^{-10} \dots 10^{-13}$ cm) geben. [219] Grundsätzlich ist diese Anmerkung hinsichtlich der Theorie, als auch den in Abschnitt 17.1.9 dargestellten Experimenten richtig. Allerdings gibt es einen entscheidenden Unterschied, der hier berücksichtigt werden müssen:

- Brownsche makroskopische (kolloidale) Teilchen können direkt (z. B. mit einem Mikroskop) beobachtet werden, ohne sie zu beeinflussen.
- Quantenmechanische Teilchen hingegen können nicht direkt, wechselwirkungsfrei beobachtet werden.

17.1.7 Identische Teilchen in der Quantenmechanik

Mit identisch bezeichnet man Teilchen, deren innere Eigenschaften (Masse, Ladung, Spin, etc.) übereinstimmen.

- Identische mikroskopische Teilchen sind ununterscheidbar.
Z. B. sind alle Elektronen, die es im Universum gibt, identisch. Ebenso alle Atome eines Elements, die sich im gleichen elektronischen Zustand befinden.
- Wenn ein physikalisches System zwei identische Teilchen enthält, bleiben seine Eigenschaften unbeeinflusst, wenn wir die Teilchen vertauschen.

In der orthodoxen Quantenmechanik, als auch in der stochastischen Mechanik kann man einem Teilchen keine wohldefinierten Bahnkurven zuordnen. Die Konsequenzen kann man am Beispiel eines Stoßexperimentes zweier Elektronen beleuchten (Abb. 17.1.7). Wegen der Identität der Teilchen kann man nicht entscheiden, welcher Weg tatsächlich gewählt wurde. Dieses Verhalten wird als Konsequenz der Vakuumfluktuationen und der daraus auf die Teilchen wirkenden stochastischen Kräfte sofort offensichtlich.

17.1.8 Der Spin – Phänomenologische Beschreibung

Dieser Abschnitt beschäftigt sich mit einer allgemeineren Beschreibung des Teilchenspins. Die exakte Beschreibung im Rahmen der Stochastischen Mechanik findet sich im Abschnitt 7.

Die hier beschriebenen grundlegenden Ideen stammen aus [134], [135], [136], [136].

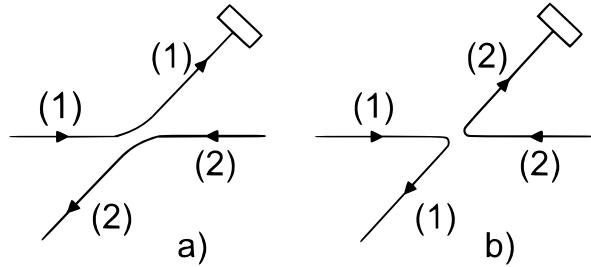


Abbildung 17.9: Schematische Darstellung der Ununterscheidbarkeit quantenmechanischer Teilchen.

Der **Spin** wird üblicherweise als eine Eigenschaft quantenmechanischer Teilchen beschrieben, die in der klassischen Physik keine direkte Entsprechung besitzt. Obwohl er formal wie ein Drehimpuls behandelt wird, unterscheidet er sich grundlegend vom klassischen Eigendrehimpuls. Der Spin entzieht sich einer direkten anschaulichen Erklärung, wird aber aufgrund mathematischer Ähnlichkeiten als eine Art Drehimpuls interpretiert.

Es ist jedoch klar, dass es sich dabei weder um einen Bahndrehimpuls noch um eine klassische Eigenrotation handeln kann.

Tatsächlich würde eine klassische Eigenrotation, etwa eines geladenen Teilchens um seine eigene Achse, zu Widersprüchen führen, etwa zu Oberflächengeschwindigkeiten, die die Lichtgeschwindigkeit überschreiten müssten, um die beobachteten magnetischen Momente zu erklären. Daher wird der Spin heute als rein quantenmechanisches Phänomen verstanden.

In diesem Abschnitt wird ein phänomenologischer Zugang gewählt, der es ermöglicht, den Spin nicht nur als abstrakte mathematische Eigenschaft, sondern als Resultat tieferliegender physikalischer Prozesse zu interpretieren. Im Mittelpunkt steht dabei das Konzept der *Vakuumfluktuationen*, also spontane, kurzlebige Veränderungen der Energieverteilung im Quantenvakuum.

Der Spin wird als Konsequenz dieser Fluktuationen verstanden, wenn das Teilchen nicht als punktförmige Entität, sondern als dynamisches System in ständiger Wechselwirkung mit dem Vakuum betrachtet wird. Diese Sichtweise führt auf natürliche Weise zur Beschreibung durch Spinoren und liefert schließlich auch einen Zugang zu den grundlegenden Gleichungen der Quantenmechanik, insbesondere zur **Dirac-Gleichung** und der **Pauli-Gleichung**.

Im Folgenden werden zunächst grundlegende Eigenschaften des Spins beschrieben, bevor anschließend der Zusammenhang mit Vakuumfluktuationen und die daraus resultierende Dynamik untersucht werden.

Die Geschichte des Spins in Experiment und Theorie

Wie bereits zu Beginn dieses Kompendiums dargestellt, entstand die Quantenmechanik aus dem Versuch, die Lichtemission auf atomarer Ebene zu beschreiben. Die Schrödinger-Gleichung erwies sich hierbei als äußerst erfolgreich bei der Vorhersage der beobachteten optischen Linienspektren, insbesondere bei wasserstoffähnlichen Atomen.

Schon in der Anfangszeit der Quantenmechanik stieß man jedoch auf Abweichungen, die sich mit der Schrödinger-Theorie allein nicht erklären ließen. In den Spektren von Alkalimetallen etwa traten merkwürdige, sehr eng benachbarte Doppellinien auf (sogenannte **Dubletts**), obwohl nach damaligem Kenntnisstand nur einfache, unaufgespaltene Linien zu erwarten gewesen wären. Ein bekanntes Beispiel ist die gelbe **D-Linie** des Natriums, die bei einer Flammenfärbung (z. B. durch Zugabe von Kochsalz in eine Gasflamme) deutlich sichtbar wird.

Noch auffälliger war das Verhalten dieser Spektrallinien im Magnetfeld. Während der sogenannte **normale Zeeman-Effekt** – die Aufspaltung einer Linie in mehrere Komponenten – bereits durch den klassischen Bahndrehimpuls erklärt werden konnte, wich das beobachtete Aufspaltungsmuster bei vielen Übergängen deutlich davon ab. Dieser Effekt wurde als **anomaler Zeeman-Effekt** bekannt und stellte eine Herausforderung für die frühe Quantenmechanik dar.

Um diese Diskrepanzen zu erklären, schlug Wolfgang Pauli im Jahr 1924 einen neuen *quantenmechanischen Freiheitsgrad* vor, der zwei mögliche Werte annehmen kann. Damit konnte die beobachtete Aufspaltung der Linien korrekt beschrieben werden. 1927 entwickelte Pauli darauf aufbauend eine vollständige Quantentheorie dieses neuen Freiheitsgrads [371], in der er postulierte, dass das Elektron über einen *intrinsischen Drehimpuls* verfügt – den **Spin** –, der unabhängig vom Bahndrehimpuls ist und stets den festen Betrag $\hbar/2$ besitzt.

Parallel zu Paulis theoretischem Ansatz gab es Versuche, den Spin klassisch zu deuten. Mehrere Physiker, darunter Ralph Kronig sowie Samuel Goudsmit und George Uhlenbeck, schlugen im Jahr 1925 in einer inzwischen berühmten Arbeit [?] vor, den Spin als Folge einer Eigenrotation des Elektrons zu verstehen. Sie gingen davon aus, dass das Elektron keine punktförmige Struktur besitzt, sondern eine elektrisch geladene Kugel mit einem Radius von etwa $2,8 \cdot 10^{-15}$ m ist *dem sogenannten klassischen Elektronenradius*.¹²

Diese Vorstellung führte allerdings rasch zu Problemen:

Um den beobachteten Spin von $\hbar/2$ zu erklären, müsste sich die Elektronoberfläche mit einer Geschwindigkeit drehen, die die Lichtgeschwindigkeit übersteigen würde – ein klarer Widerspruch

¹²Den klassischen Elektronenradius erhält man, indem man die elektrische Ladung des Elektrons gleichmäßig auf der Oberfläche einer Kugel mit Radius r_e verteilt. Die potentielle Energie dieser Konfiguration wird mit der Ruheenergie des Elektrons ($m_0 c^2$) gleichgesetzt. Der so berechnete Radius ist jener Wert, bei dem die gesamte Ruhemasse des Elektrons durch elektrostatische Energie erklärbar wäre. Hochenergiestreuexperimente zeigen jedoch, dass das Elektron punktförmig ist oder zumindest eine Ausdehnung besitzt, die mindestens um den Faktor 100 kleiner ist.

zur speziellen Relativitätstheorie. Diese klassische Interpretation wurde daher verworfen, und der Spin wurde fortan als genuin quantenmechanisches Phänomen verstanden, das sich nicht durch makroskopische Analogien erfassen lässt.

Die Einführung des Spins markierte einen Meilenstein in der Entwicklung der Quantenmechanik. Sie leitete über zu einer umfassenderen Theorie, in der nicht nur die Schrödinger-Gleichung, sondern auch relativistische Effekte (wie in der [Dirac-Gleichung](#)) berücksichtigt wurden. Die Spinquantenzahl ist seither ein zentraler Bestandteil der Beschreibung mikroskopischer Systeme, von der Struktur des Periodensystems bis hin zur Quantenfeldtheorie.

Anmerkung 31:

Nach jetzigem Kenntnisstand hat das [Elektron](#) folgende Eigenschaften:

1. Eine räumliche Ausdehnung (Radius) mit einer *Obergrenze* von 10^{-19} m. Das heißt nach heutigem Kenntnisstand kann das Elektron als *punktförmig* angesehen werden.
2. Ebenso besitzt das Elektron nach heutigem Kenntnisstand *kein* Dipolmoment. Dies ist ein weiteres Argument dafür, dass das Elektron als punktförmig angesehen werden kann und keine Unterstrukturen aufweist.

Dies sind starke Argumente dafür, dass der [Spin](#) keine intrinische Eigenschaft des (freien) Elektrons ist.

Der Spin als Ergebnis der Streuung an virtuellen Teilchen

Wie in den vorhergehenden Kapiteln gezeigt, führen [Vakuumschwankungen](#) dazu, dass ein Teilchen aus seiner Ruhelage ausgelenkt wird und eine bestimmte Nullpunktsenergie besitzt. Bewegt sich das Teilchen um ein Zentrum bei $r = 0$ (zum Beispiel die Bewegung eines Elektrons um den Atomkern), so wird es nicht nur linear vom Zentrum weg bewegt, sondern auch um dieses herum. Die sich ergebende Rotationsenergie ist im Mittel über lange Zeit Null, da durch die Vakuumfluktuationen keine Energie an das Teilchen abgegeben werden darf.

Diese Drehbewegung soll genauer betrachtet werden. Dazu wird vereinfacht ein System angenommen, in dem sich das betrachtete Teilchen ausschließlich kreisförmig in einem zentralsymmetrischen Potential bewegen kann. Die Vakuumschwankungen führen dazu, dass dem Teilchen eine Nullpunktsrotationsenergie zugeführt wird mit dem Wert

$$\Delta E = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{1}{2} m r^2 \omega^2 \quad (17.26)$$

wobei $I = mr^2$ das Trägheitsmoment des Teilchens darstellt und ω seine Winkelgeschwindigkeit. Der mit dieser Nullpunktsrotationsenergie verbundene Drehimpuls kann bestimmt werden, in-

dem von der vereinfachten Annahme ausgegangen wird, dass sich Energieaufnahme und -abgabe ausgleichen, während das Teilchen das Zentrum einmal umläuft. Weiterhin wird angenommen, dass die Energieschwankungen innerhalb dieses Umlaufs (mit der Zeit $T = 2\pi/\omega$) in der Größenordnung $\Delta E \cdot \Delta t = \Delta E \cdot T \approx \hbar/2$ liegen. Speziell wird $\Delta E \cdot T = \pi/2 \cdot \hbar$ gewählt, wobei der Faktor π an dieser Stelle willkürlich gewählt wurde. Damit erhält man nach Einsetzen in Gl. 17.26:

$$m_0 v r = \frac{\hbar}{2} \quad (17.27)$$

mit $v = 2\pi r/T$. Die linke Seite dieser Gleichung hat die Bedeutung eines Drehimpulses.

Obwohl Gleichung ?? auf starken Vereinfachungen basiert, liefert sie ein fundamentales Ergebnis: Der Betrag des entstehenden Drehimpulses (rechte Seite der Gleichung) ist unabhängig von der Masse des Teilchens und vom Radius der angenommenen Kreisbahn.

Dabei sei betont, dass es sich nicht um einen *echten* Drehimpuls handelt. Die Bewegung um das Zentrum ist ähnlich der Auslenkung eines Teilchens beim harmonischen Oszillatoren im Grundzustand, wo ebenfalls der resultierende Impuls Null ist. Betrachtet man das Scharmittel aus vielen Teilchen, so gibt es genauso viele, die sich links um das Zentrum bewegen wie rechts herum. Im Scharmittel ist der Drehimpuls des Systems also Null.

Die aus der Zitterbewegung resultierenden Drehimpulsanteile wurden bis jetzt nicht in den Gleichungen berücksichtigt. Es stellen sich die Fragen:

- Wenn der Spin seine Ursache in der stochastischen Bewegung hat, warum taucht er dann noch nicht in der Schrödinger-Gleichung auf?
- Und wie gelangt man zu einer Beschreibung, welche den Spin enthält?

Bei der Herleitung der Quantenmechanik wurde von einer stochastischen Zitterbewegung des betrachteten Teilchens ausgegangen, welche die *spinartige* Bewegung natürlicherweise enthält. Allerdings ist der Ansatz für die Wellenfunktion aus Kapitel 5.2 zu einfach gewählt, um den Spin zu beschreiben:

Aus der bisher diskutierten Schrödinger-Gleichung berechnet sich der Erwartungswert des Drehimpulses direkt aus dem Scharmittel der Geschwindigkeit \vec{v} .

Hierzu wird folgende Ansatz gewählt (vgl. Abschnitt 6.4):

$$\langle \vec{L} \rangle = m_0 \int \vec{r} \times \rho_{(r)} \vec{v}_{(r)} d^3 r \quad (17.28)$$

Nun ergibt sich

$$\vec{v} = \frac{\hbar}{m} \vec{\nabla} \varphi_{(r,t)}$$

aus dem komplexwertigen Teil der Wellenfunktion

$$\Psi_{(r,t)} = |\Psi_{(r,t)}| e^{i\varphi_{(r,t)}}$$

Für den Fall, dass $\Psi_{(r,t)}$ reellwertig und damit $\Psi_{(r,t)} = 0$ ist, gibt es folglich auch keinen Beitrag zum Drehimpuls. Dies ist beispielsweise für viele Atomorbitale im Wasserstoffatom der Fall (siehe Kapitel 6.4). Der oben hergeleitete Drehimpuls muss aber auch in diesem Fall reeller Wellenfunktionen gleich $\hbar/2$ sein. Daher kann das Auftreten eines Zusatzdrehimpulses nur durch eine Erweiterung der formalen Systembeschreibung erreicht werden.

Diese Erweiterung könnte mit dem Übergang von der klassischen zur relativistischen Mechanik verglichen werden. In den meisten Fällen (niedrige Geschwindigkeiten) ist es ausreichend, Geschwindigkeiten zu addieren. Erst bei hohen Geschwindigkeiten müssen relativistische Korrekturen berücksichtigt werden. Ebenso ist es in der Quantenmechanik möglich, viele Probleme ohne Berücksichtigung des Spins zu beschreiben. Im Folgenden soll dargestellt werden, wie der Spin in die Gleichungen einbezogen werden kann.

Bei der Herleitung der Schrödinger-Gleichung wurde bisher nicht unterschieden, ob die Teilchen in der Schar eine Geschwindigkeitskomponente mit rechtem oder linkem Drehsinn bezüglich einer beliebig gewählten Achse besitzen. In Abbildung 17.10 ist diese Unterscheidung schematisch dargestellt. Die Gesamtschar der Teilchen wird daher in zwei Unterscharen zerlegt: Teilchen mit einem Anteil der Zitterbewegung mit rechtem Drehsinn (\uparrow) und Teilchen mit linkem Drehsinn (\downarrow). Beide Unterscharen erzeugen Wahrscheinlichkeitsdichten, die in Summe die Gesamtwahrscheinlichkeitsdichte ergeben müssen. Es gilt also

$$\rho_{(r)} = |a|^2 \rho_{\uparrow(r)} + |b|^2 \rho_{\downarrow(r)} \quad (17.29)$$

Dabei wird über die Koeffizienten a und b zugelassen, dass beide Anteile unterschiedliches Gewicht haben können. Gilt für die Teilchendichten $\int_V \rho_{\uparrow\downarrow(r)} d^3r = 1$, so muss $|a|^2 + |b|^2 = 1$ gelten.

Die Zerlegung der Wahrscheinlichkeitsdichte aus Gleichung 17.29 lässt sich nicht äquivalent auf die Wellenfunktion übertragen, denn aus

$$\Psi_{(\vec{r})} = a\Psi_{\uparrow(\vec{r})} + b\Psi_{\downarrow(\vec{r})}$$

folgt

$$\begin{aligned}\rho &= \Psi^* \Psi \\ &= \underbrace{a^* \Psi_{\uparrow(\vec{r})}^* a \Psi_{\uparrow(\vec{r})}}_{|a|^2 \rho_{\uparrow(\vec{r})}} + \underbrace{b^* \Psi_{\downarrow(\vec{r})}^* b \Psi_{\downarrow(\vec{r})}}_{|b|^2 \rho_{\downarrow(\vec{r})}} + (\text{Mischterme } \neq 0)\end{aligned}$$

Das gewünschte Ergebnis kann jedoch erzielt werden, indem die Wellenfunktion durch einen zweikomponentigen Spaltenvektor ersetzt wird:

$$\vec{\Psi}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow(\vec{r})} \\ \Psi_{\downarrow(\vec{r})} \end{pmatrix} = \Psi_{\uparrow(\vec{r})} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \Psi_{\downarrow(\vec{r})} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (17.30)$$

mit der entsprechenden adjungierten Funktion

$$\vec{\Psi}^+(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow(\vec{r})}^* \\ \Psi_{\downarrow(\vec{r})}^* \end{pmatrix}.$$

Damit wird

$$\rho(\vec{r}) = \vec{\Psi}^+(\vec{r}) \vec{\Psi}(\vec{r}) = |a|^2 \rho_{\uparrow}(\vec{r}) + |b|^2 \rho_{\downarrow}(\vec{r})$$

und aus der Normierung der Teilchendichte ergibt sich

$$\int_V \vec{\Psi}^+(\vec{r}) \vec{\Psi}(\vec{r}) d^3r = 1$$

Nun ist die Form der Wellenfunktion bekannt, jedoch noch nicht die Beschreibung des Spins in der Bewegungsgleichung der Quantenmechanik. Wie aus dem Modell hervorgeht, ist bei ungestörten Systemen die Wahrscheinlichkeit gleich groß, dass ein Teilchen einen Drehimpulsanteil links oder rechts um eine beliebig gewählte Achse besitzt. Damit sind $\Psi_{\uparrow(\vec{r})}$ und $\Psi_{\downarrow(\vec{r})}$ einander gleich und gehen jeweils mit einem Faktor $1/\sqrt{2}$ in die Gesamtwellenfunktion ein. Es ergibt sich keinerlei physikalischer Effekt, sodass ohne Spin gerechnet werden kann.

Wird allerdings ein Magnetfeld \mathbf{B} eingeschaltet, so sinkt die Energie des Zustandes $\Psi_{\uparrow}(\vec{r})$, dessen magnetisches Moment parallel zum Feld ist, um den Betrag $\mu_B \mathbf{B}$. Umgekehrt erhöht sich die Energie des Zustandes $\Psi_{\downarrow}(\vec{r})$ mit entgegengesetztem magnetischen Moment um den gleichen Betrag. Die Richtung des Magnetfeldes wird im kartesischen Koordinatensystem mit z gekennzeichnet. Um zur erweiterten Schrödinger-Gleichung zu gelangen, wird der Beitrag zur Energiedichte aufgrund der Wechselwirkung mit dem magnetischen Feld berechnet:

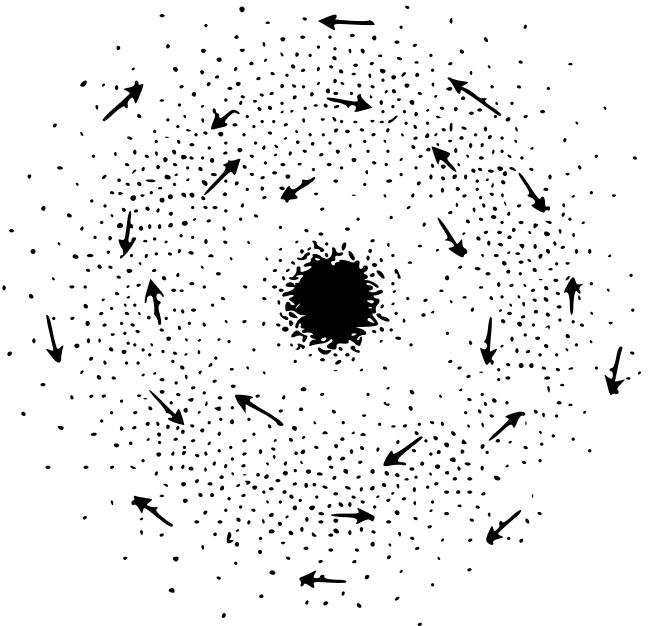


Abbildung 17.10: Angedeutete Verteilung der radialen Geschwindigkeitskomponenten im Wasserstoffatom bei einem beliebigen Schnitt durch den Ursprung (Reproduziert mit freundlicher Genehmigung von L. Fritzsche [137]).

$$u_{\text{mag}} = -\vec{\Psi}_{(\vec{r})}^+ \mu_B \underline{\underline{\mathbf{B}}} \vec{\Psi}_{(\vec{r})}$$

mit

$$\underline{\underline{\mathbf{B}}} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}_z & 0 \\ 0 & -\mathbf{B}_z \end{pmatrix}$$

Damit lässt sich die spinabhängige Schrödinger-Gleichung für ein Magnetfeld in z -Richtung herleiten [?]:

$$(\underline{\underline{\mathbf{H}}} - \mu_B \underline{\underline{\mathbf{B}}}) \vec{\Psi}_{(\vec{r})} = \mathbf{E} \vec{\Psi}_{(\vec{r})}$$

mit

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m_0} (\vec{\mathbf{P}} - e\vec{\mathbf{A}}(\vec{r}))^2 + \mathbf{U}(\vec{r})$$

und

$$\underline{\underline{1}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Mathematisch lässt sich diese Gleichung mittels der Caley-Kleinschen Parameter und der Paulischen Spin-Matrizen für ein Magnetfeld in beliebiger Richtung umformen (siehe genauere Herleitung im Abschnitt 7.0.1). Man erhält die Pauli-Gleichung:

$$(\hat{H}\mathbf{I} - \mu_B \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (17.31)$$

wobei $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ mit

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

ein Vektor aus den Paulischen Spin-Matrizen ist und $\underline{\underline{\mathbf{B}}} = (B_x, B_y, B_z)$.

Hinweis: Die grundlegenden Annahmen zur Beschreibung des Spins in der Stochastischen Mechanik darzulegen:

- Der Spin beschreibt ein bestimmtes Bewegungsverhalten im *Scharmittel*, welches durch die *Zitterbewegung* hervorgerufen wird.
- Er ist eine Eigenschaft der Wellenfunktion und *nicht* eines Teilchens.
- Das Teilchen selbst hat weiterhin nur zwei Eigenschaften: einen Ort und eine Geschwindigkeit.

Ohne ein äußeres Feld, das eine Aufteilung in die zwei Unterscharen bewirkt, gibt es keine Spin-Effekte. In der Standard-Literatur wird häufig der Spin für eine beliebige Richtung z berechnet, wobei implizit unterstellt wird, man könne sich eine beliebige Richtung aussuchen. Mit der hier vorgestellten Beschreibung ist klar, dass diese Richtung durch äußere Felder vorgegeben wird.¹³

¹³In [135] wird korrekterweise darauf hingewiesen, dass das vorhandene Magnetfeld der Erde für eine Ausrichtung sorgen wird.

Mit Gleichung 17.31 ist es möglich, die Aufspaltung der Emissionslinien beim **anomalen Zeeman-Effekt** (siehe auch Abschnitt [?]) zu berechnen und die Energieabsorption bei der Elektronenspinresonanz quantitativ zu bestimmen. In der Quantenmechanik ohne Spin lassen sich diese Energiedifferenzen nicht erklären.

Die gyromagnetische Anomalie

Bei geladenen Teilchen ist mit einer Rotation stets ein magnetisches Moment verbunden. Für Elektronen ergibt sich das magnetische Moment des Spins aus der **Quantenelektrodynamik** zu:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0} \quad (17.32)$$

Dieser Ausdruck definiert das **Bohrsche Magneton** μ_B und entspricht dem magnetischen Moment eines Elektrons.

Dieser quantenmechanische Wert steht im Widerspruch zur klassischen Elektrodynamik, in der sich das magnetische Moment eines rotierenden geladenen Körpers bei gegebenem Drehimpuls L zu

$$M = \frac{e}{2m_0} L \quad (17.33)$$

ergibt. Setzt man hier für einen spinartigen Drehimpuls $L = \hbar/2$, so erhält man ebenfalls

$$\mu = \frac{e\hbar}{4m_0}, \quad (17.34)$$

also nur die Hälfte des quantenmechanisch ermittelten Wertes. Um diesen Widerspruch zu beheben, führt man einen dimensionslosen Proportionalitätsfaktor g ein, den sogenannten *gyromagnetischen Faktor* oder **Landé-Faktor**. Die entsprechende Gleichung lautet:

$$M = g \cdot \frac{e}{2m_0} \cdot S \quad (17.35)$$

Für freie Elektronen beträgt der gyromagnetische Faktor experimentell sehr genau:

$$g \approx 2,002319$$

Der Wert $g = 2$ ergibt sich in guter Näherung aus der Dirac-Theorie für punktförmige Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen.¹⁴ Die kleine Abweichung von diesem Wert wird als *gyromagnetische Anomalie* bezeichnet und kann durch höhere Ordnungen der Quantenfeldtheorie (insbesondere durch Schleifenkorrekturen in der Quantenelektrodynamik) erklärt werden. Der klassische Wert wäre hingegen $g = 1$, sodass sich eine Abweichung von nahezu 100% ergibt.

Anmerkung 32:

Es sollte beachtet werden, dass es sich beim Spin nicht um einen klassischen Bahndrehimpuls handelt, sondern um einen intrinsischen Drehimpuls, der quantenmechanisch beschrieben wird. In der Dirac-Theorie ergibt sich der Spin als Folge relativistischer Wellengleichungen, wobei u. a. auch die sogenannte *Zitterbewegung* zur Entstehung eines effektiven Zusatzdrehimpulses führt.

Hinweis: Für Elektronen, die eine negative Elementarladung e tragen, ergibt sich das magnetische Moment aus Gleichung (17.35) in entgegengesetzter Richtung zum Spinvektor. Das bedeutet, dass sich die Richtungen von Spin und magnetischem Moment antiparallel verhalten.

Der Begriff des Landé-Faktors ist noch allgemeiner gefasst. Betrachtet man ein Teilchen in einem zentraalsymmetrischen Potential, so kann es eine zirkulare Bewegung um das Zentrum ausführen und besitzt dann zusätzlich zum Spin einen **Bahndrehimpuls** mit Werten $L = m\hbar$, wobei $m = 1, 2, 3, \dots$.

Der *Gesamtdrehimpuls* des Systems ergibt sich dann aus der Kopplung von Spin S und Bahndrehimpuls L :

$$L = \left(m \pm \frac{1}{2} \right) \hbar \quad (17.36)$$

je nachdem, ob der Spin parallel oder antiparallel zum Bahndrehimpuls steht.

Für solche Zustände ergibt sich der effektive Landé-Faktor g_J nach der **Landé-Formel** zu:

$$g_J = \frac{m \pm 1}{m \pm 1/2} \leq 2 \quad (17.37)$$

wobei $j = l \pm \frac{1}{2}$, $s = \frac{1}{2}$ der Spin und l der Bahndrehimpulsquantenzahl ist.

Anmerkung 33:

¹⁴Z. B. Fermionen bzw. speziell Elektronen.

Der Gesamtdrehimpuls für ein quantenmechanisches System, bestehend aus der Summe von Spin und Bahndrehimpuls ist eine Erhaltungsgröße.

Experimenteller Ergebnisse: In hochpräzisen Experimenten wie der **Elektronenspinresonanz (ESR)** oder Messungen der Anomalie des magnetischen Moments (g -2-Experimente) kann der Wert von g äußerst genau bestimmt werden. Die gemessene Präzessionsfrequenz des Spins ist direkt proportional zum magnetischen Moment und würde bei einem klassischen Wert von $g = 1$ nur halb so groß ausfallen wie tatsächlich beobachtet.

Der Stern-Gerlach-Versuch

Der **Stern-Gerlach-Versuch** gilt heute als erster experimenteller Nachweis des Spins. Zum Zeitpunkt des Experiments im Jahr 1922 war jedoch noch das Bohrsche Atommodell vorherrschend, welches die Elektronenbahnen in diskrete Energieniveaus unterteilte. Otto Stern und Walther Gerlach wollten mit ihrem Versuch die Quantisierung des Bahndrehimpulses von Elektronen empirisch bestätigen.

Insbesondere interessierten sie sich für das äußere Elektron in Silberatomen, welches ein magnetisches Moment tragen sollte, das mit dem Bahndrehimpuls verknüpft ist (siehe Gleichung ??). Dieses magnetische Moment sollte sich in einem inhomogenen Magnetfeld entlang der Feldrichtung ausrichten – entweder parallel oder antiparallel. Man erwartete daher eine Aufspaltung des Silberstrahls in zwei diskrete Komponenten.

Später stellte sich jedoch heraus, dass das Valenzelektron in Silber im Grundzustand *keinen* Bahndrehimpuls besitzt ($l = 0$). Die beobachtete Aufspaltung konnte daher nicht auf den Bahndrehimpuls zurückgeführt werden, sondern ist vielmehr ein direkter Hinweis auf den **Spin** des Elektrons und das damit verknüpfte magnetische Moment.

Trotz dieser anfänglichen Fehlinterpretation bleibt der Stern-Gerlach-Versuch ein Meilenstein der Quantenphysik. Allerdings ist die heute gebräuchliche Deutung dieses Experiments bei genauerer Betrachtung nicht frei von Problemen:

- Es ist aus der Quantenmechanik bekannt, dass sich der Spin eines Teilchens bei Anlegen eines externen Magnetfelds zunächst um das Feld präzessierend bewegt (**Larmorpräzession**) und sich *nicht spontan* entlang des Feldes ausrichtet. Dieses Verhalten wird z. B. bei der **Elektronenspinresonanz (ESR)** technisch ausgenutzt.
- Im Rahmen der üblichen Interpretation des Stern-Gerlach-Versuchs wird diese Präzession jedoch ignoriert. Stattdessen wird implizit angenommen, dass sich das magnetische Moment des Atoms augenblicklich und stabil entlang der Magnetfeldrichtung ausrichtet.

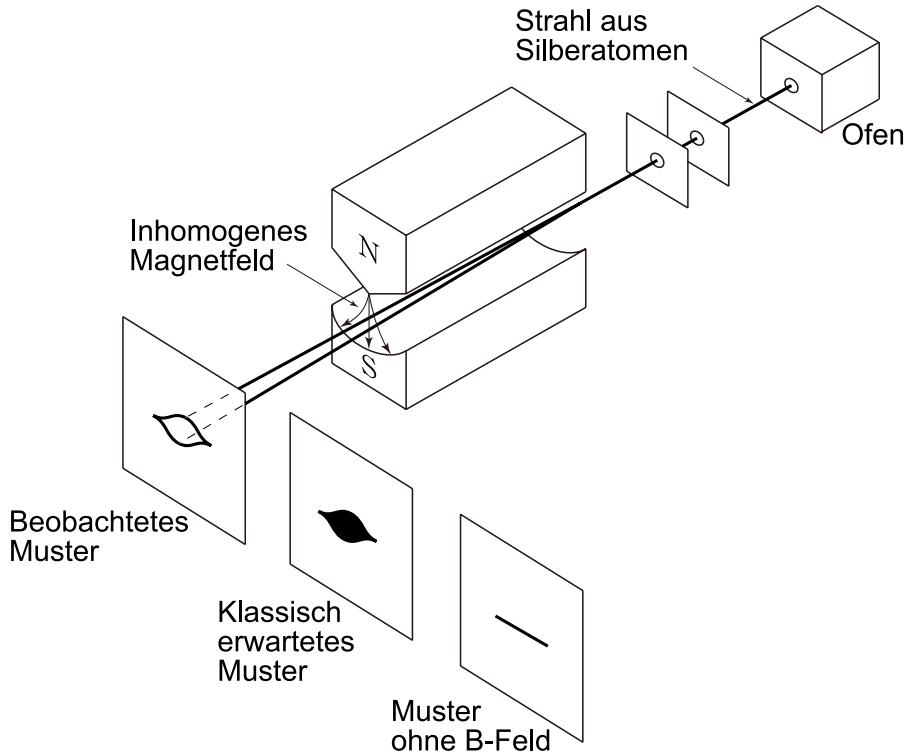


Abbildung 17.11: Schematischer Aufbau des Stern-Gerlach-Versuchs [388].

- Ferner wird häufig behauptet, die Komponente des Spins in Feldrichtung (häufig z -Richtung) könne nur diskrete Werte annehmen (etwa $\pm\hbar/2$ beim Elektron). Dies entspricht zwar den Eigenwerten des Spinoperators \hat{S}_z , aber es existiert physikalisch kein *zwingender Grund*, warum die Richtung des Spins vor Messung eine definierte Komponente besitzen sollte. Nur der *Betrag* des Spins ist festgelegt, nicht jedoch seine räumliche Orientierung.

Ein weiterer häufig anzutreffender Irrtum besteht in der Übertragung des Stern-Gerlach-Versuchs auf freie Elektronen, etwa im Rahmen von Gedankenexperimenten zum **Einstein-Podolsky-Rosen-Paradoxon** (EPR-Paradoxon). Solche Darstellungen sind aus mehreren Gründen problematisch [133]:

- Ein freies Elektron unterliegt starken Wechselwirkungen mit Magnetfeldern, ist jedoch aufgrund seiner geringen Masse und hohen Beweglichkeit nur schwer in einem inhomogenen Feld kontrolliert ablenkbar.
- Der klassische Stern-Gerlach-Aufbau funktioniert nur für *neutral geladene* Atome (wie Sil-

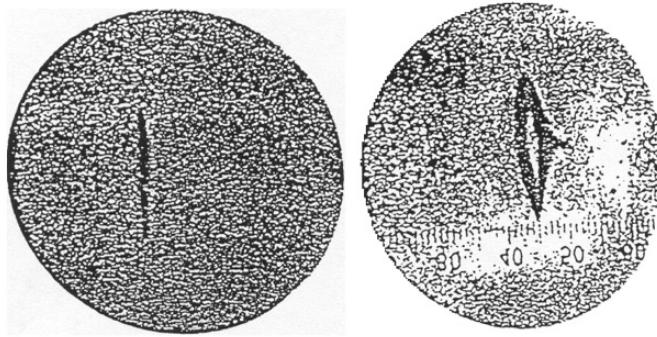


Abbildung 17.12: Ergebnismuster der originalen Stern-Gerlach-Experiments [388].

ber), bei denen die Ablenkung durch das inhomogene Magnetfeld dem magnetischen Moment zugeschrieben werden kann, ohne dass elektrostatische Kräfte dominant werden.

Der Spin selbst ist dabei ein rein quantenmechanisches Phänomen, das nicht als klassischer Bahndrehimpuls gedeutet werden darf. In hier dargestellten Beschreibung ist der Spin das Ergebnis einer quantisierten Scharbewegung , welche zur Ausbildung zweier energetisch stabiler Richtungszustände im Magnetfeld führt.

Wenn im weiteren von *Spin eines Teilchens* gesprochen wird, dann muss berücksichtigt werden, dass der Spin aus der Sichtweise der Stochastischen Mechanik in Wirklichkeit das Ergebnis einer kollektiven quantenmechanischen *Scharstruktur* ist.

In dieser Interpretation spaltet ein äußeres Magnetfeld die Gesamtheit aller möglichen Teilchenzustände in zwei energetisch *unterscheidbare Unterscharen* auf. Einzelne Teilchen manifestieren dann den Effekt des Spins und seines magnetischen Moments direkt durch ihre Bahnabweichung im Stern-Gerlach-Versuch.

Keine freien Elektronen in Spin-Experimenten

In der Literatur werden zur Erklärung des EPR-Paradoxons gelegentlich *Zwillings-Elektronen* beschrieben, die gleichzeitig aus einer Quelle emittiert werden und nach einfacher Lehrbuchmeing einen entgegengesetzten Spin aufweisen. Mittels des Stern-Gerlach-Versuchs soll dann die jeweilige Spin-Orientierung nachgewiesen werden.

Ein wesentlicher Kritikpunkt besteht jedoch darin, dass Stern-Gerlach-Experimente mit *freien Elektronen* praktisch *nicht* durchführbar sind (vgl. [132], [135]). Die Ursache hierfür ist einfach, aber in ihrer Konsequenz weitreichend:

Die auf geladene Teilchen wirkende Lorentz-Kraft im Magnetfeld ist um Größenordnungen stärker als die magnetische Wechselwirkung, die für die Spinaufspaltung verantwortlich ist. Dadurch wird der subtile Effekt der Spin-Wechselwirkung vollständig überlagert und ist experimentell nicht mehr erfassbar. Auf diesen Umstand hatte bereits Niels Bohr hingewiesen (siehe [337]).

Subtiler ist hingegen die Aussagekraft, die ein Spin bei freien Elektronen überhaupt nach der Stochastischen Mechanik hätte. Nach dem Modell von Fritsche [?] ist der Spin mit einer Kreisbewegung verknüpft; typischerweise in einem Atom etwa mit der Bewegung um den Kern. Insofern wäre der Spin von freien Elektronen nach der Stochastischen Mechanik bedeutungslos.

In dieser Sichtweise ist der Spin freier Elektronen nicht nur praktisch unmessbar, sondern sogar theoretisch nicht sinnvoll definierbar.

Dies erklärt, warum neutrale Teilchen mit gebundenem Spin, wie etwa Wasserstoffatome oder Neutronen, für Stern-Gerlach-Experimente unabdingbar sind.

Anmerkung 34:

Bei neutralen Fermionen wie dem Neutron kann der beobachtbare Spin als Resultat der zirkulären Bewegung der kernbestandteile (Quarks) innerhalb des Kerns verstanden werden.

Die Spin-Präzession im Magnetfeld

Betrachtet man den Fall, dass sich ein Hüllenelektron in einem Atom durch ständig vorhandene Magnetfelder – etwa das Erdmagnetfeld – in einem der beiden energetisch stabilen Spinzustände befindet. Es stellt sich nun die Frage, was passiert, wenn ein äußeres Magnetfeld \vec{B}_{in} beliebiger Richtung langsam (adiabatisch) eingeschaltet wird.

Oft wird beschrieben, dass sich der Spin dabei *sofort / instantan* in Richtung des Magnetfeldes ausrichtet. Eine solche spontane Ausrichtung widerspricht jedoch sowohl klassischen Vorstellungen als auch experimentellen Beobachtungen.

Wie in Abbildung 17.1.8 gezeigt, beginnt der Spin – genauer gesagt, das mit dem Spin verknüpfte magnetische Moment $\vec{\mu}$ – um die Richtung des Magnetfeldes mit einer Frequenz ω zu präzedieren, analog zum Verhalten eines klassischen Kreisels. Der Anteil des Drehimpulses \vec{J} parallel zum Magnetfeld (z-Richtung) bleibt dabei erhalten und ist nur durch die Orientierung beim Einschalten des Magnetfeldes bestimmt.

Ein konstantes Magnetfeld \vec{B} bewirkt lediglich ein Drehmoment um eine horizontale Achse und führt zur Präzession. Wenn jedoch der Winkel zwischen dem Drehimpuls und der Feldrichtung verändert werden soll, ist ein Drehmoment um die z-Achse notwendig. Dies kann experimentell

durch ein schwaches, zusätzliches Magnetfeld \vec{B}' , das senkrecht zu \vec{B} steht und mit der Präzessionsfrequenz schwingt, realisiert werden.

Ein solcher Aufbau ist zentral für die Technik der Elektronenspinresonanz (ESR):

Hier wird ein schwaches Wechselfeld seitlich eingestrahlt, während die Stärke des Hauptfeldes variiert wird. Wenn die Frequenz des Wechselfeldes mit der Präzessionsfrequenz übereinstimmt, erfolgt eine Resonanz. Dabei wird Energie auf das Elektron übertragen, was zu einer Umorientierung des Spins und damit zu messbarer Energieabsorption führt.

Das Verhalten des Spins im Magnetfeld lässt sich auch formal aus der Pauli-Gleichung herleiten. Man erhält die Bewegungsgleichung

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \vec{\mu}_{\text{Spin}} \times \vec{B} \quad (17.38)$$

wobei $\vec{\mu}_{\text{Spin}}$ das vom Spin erzeugte magnetische Moment ist. Diese Gleichung entspricht formal der klassischen Gleichung für einen Kreisel unter einem externen Drehmoment. Sie verdeutlicht, dass sich der Spin kontinuierlich ändern kann, solange sein Betrag (typisch $\hbar/2$ für Elektronen) erhalten bleibt.

Die Standardinterpretation der Quantenmechanik spricht allerdings von *Richtungsquantelung*:

Der Spin in z-Richtung soll dabei nur diskrete Werte, z. B. $\pm\hbar/2$, annehmen können. Im stochastischen Modell hingegen ist auch ein kontinuierlicher Übergang zulässig, insbesondere solange keine Messung erfolgt. Das Verhalten im Magnetfeld lässt sich somit vollständig durch klassische Präzessionsmechanik beschreiben.

Eine spontane Ausrichtung ist auch in dieser Sichtweise denkbar, jedoch durch Emission von magnetischer Dipolstrahlung vermittelt. Solche Übergänge verlaufen jedoch extrem langsam, sodass der Zustand als metastabil angesehen werden kann. Dies spielt insbesondere beim Stern-Gerlach-Experiment eine Rolle, das im folgenden Kapitel behandelt wird.

Ein Modell für das Stern-Gerlach-Experiment

Nachdem das Verhalten des Spins im Magnetfeld beschrieben wurde, stellt sich die Frage, wie der Ausgang des Stern-Gerlach-Experiments erklärt werden kann. Hierzu betrachte man folgenden Versuchsaufbau an (Abbildung 17.1.8).

Ein Strahl neutraler Silberatome durchläuft ein inhomogenes Magnetfeld und wird anschließend auf einem Schirm aufgefangen. Tatsächlich stellt man fest, dass sich der Strahl der Atome in zwei

Teilstrahlen aufspaltet.¹⁵ Dies deutet darauf hin, dass es nur zwei ausgezeichnete Richtungen des magnetischen Moments der Atome gibt, mit welchem diese durch den Magneten laufen.

Man stelle sich sich zunächst noch einmal der Frage, warum ein inhomogenes Magnetfeld notwendig ist und betrachte dazu Abbildung 17.1.8.

Befände sich der Magnet in einem homogenen Magnetfeld, so würde keine Kraft auf ihn wirken. Im inhomogenen Magnetfeld liegen die Feldlinien (im Beispiel) am Südpol des inhomogenen Magneten dichter als am Nordpol. Es resultiert eine stärkere Anziehung am Südpol des eingebrachten Magneten als am Nordpol. Er wird nach oben abgelenkt. Wären im Beispiel die Pole des Magneten vertauscht, so würde er nach unten abgelenkt. Auf einen waagerecht liegenden Magneten würde entsprechend keine Kraft wirken. Für jede beliebige andere Lage ergibt sich eine entsprechend geringere Abstoßung oder Anziehung.

Geht man beim Stern-Gerlach-Versuch davon aus, dass die Atome mit beliebiger Spin-Orientierung einfliegen, dann sollte das magnetische Moment der Atome um das Magnetfeld präzidieren (siehe vorhergehendes Kapitel und Abbildung 17.1.8).

Es treten also für die einfliegenden Atome entsprechend beliebige Winkel zwischen ihrem jeweiligen magnetischen Moment und dem Magnetfeld des Stern-Gerlach-Magneten auf. Die Aufspaltung in zwei Teilstrahlen lässt sich damit nicht begründen. Dies gelingt nur, wenn man annimmt, dass die magnetischen Momente der Atome bereits beim Einlaufen in den Stern-Gerlach-Magneten parallel oder anti-parallel zum Feld ausgerichtet sind.

Die übliche Interpretation dafür ist – wie bereits erwähnt – die sogenannte Richtungsquantelung, das heißt die *automatische* Vorgabe des Spins in Feldrichtung. Wie ebenfalls im vorigen Kapitel erwähnt, kommt dies aus unserer Sicht nicht in Frage. Daher bleibt natürlich zu klären, woher das Drehmoment kommt, welches die Spins ausrichtet.

Eine Antwort ist das Streufeld des Stern-Gerlach-Magneten. Dieses bewirkt durch seine in Flugrichtung abnehmende x -Komponente ein Drehmoment wie im vorhergehenden Kapitel beschrieben. Andererseits beschreibt dieses Bild nicht den kompletten Versuchsablauf.

In den ständig vorhandenen Magnetfeldern¹⁶ bilden sich die zwei energetisch unterschiedlichen Niveaus für den Spin aus. Da der Energieunterschied sehr gering ist, sind diese beiden Niveaus bei den vorherrschenden Temperaturen im Gas gleich besetzt.

Beim Einfliegen der Atome in den Magneten ändert sich das Gesamt-magnetfeld kontinuierlich, bis sein endgültiger Zustand im Magnet erreicht ist. Man kann nun zeigen [?], dass der Spin exakt der Veränderung des Magnetfelds folgt. Dies ähnelt der Physik von Geschossen mit Drall, wo die Drehachse des rotierenden Geschosses der Flugbahn nachfolgt.

¹⁵In diesem Experiment gibt es nicht zwei *scharfe* Linien. Bewegt man einen Detektor entlang der z -Achse, so beobachtet man einen kontinuierlichen Verlauf der Intensität mit zwei Maxima. Es gibt also nicht zwei exakt feste Punkte, an denen die eintreffenden Atome gemessen werden (siehe Abbildung 17.1.8).

¹⁶Z. B. das Erdmagnetfeld oder das schwache Streufeld des Stern-Gerlach-Magneten.

Entsprechend dieser Überlegungen ist klar, dass die Atome in jedem Fall bereits ausgerichtet in den Stern-Gerlach-Magneten einlaufen. Dort wirkt dann aufgrund des inhomogenen Magnetfeldes eine Kraft auf den magnetischen Dipol, und der Atomstrahl wird in zwei Teilstrahlen aufgespalten.

Der wesentliche Unterschied zwischen der Stochastischen Mechanik und der herkömmlichen Interpretation besteht darin, dass nach diesem Modell ein kontinuierlicher Prozess angenommen wird. Auch Messergebnisse (siehe Abbildung 17.1.8) stützen diese Interpretation, da keine *scharfen* Punkte nachgewiesen werden, sondern eine stetige Kurve mit *lediglich* zwei Maxima.

17.1.9 Hydrodynamische Analoga der Quantenmechanik

Als hydrodynamische Quantenanaloga¹⁷ werden in der Physik experimentell beobachtete Phänomene bezeichnet, bei denen Flüssigkeitströpfchen auf einem vibrierenden Flüssigkeitsbad hüpfen und sich analog zu verschiedenen quantenmechanischen Systemen verhalten[1].[2][3] Der experimentelle Nachweis ist umstritten.

Ein Tröpfchen kann in einer stationären Position auf einer vibrierenden Flüssigkeitsoberfläche unendlich lange hin und her springen. Dies ist möglich, weil eine durchdringende Luftsicht verhindert, dass der Tropfen mit dem Bad verschmilzt.[4] Bei bestimmten Kombinationen von Beschleunigung der Badoberfläche, Tropfengröße und Vibrationsfrequenz bleibt ein hüpfender Tropfen nicht mehr in einer stationären Position, sondern "wandert" in einer geradlinigen Bewegung auf dem Flüssigkeitsbad. [5] Es wurde festgestellt, dass wandernde Tröpfchensysteme verschiedene quantenmechanische Phänomene nachahmen, darunter Teilchenbeugung, Quantentunneln, quantisierte Bahnen, den Zeeman-Effekt und das Quantenkoral[6][7][8][9][10].

Abgesehen davon, dass sie ein interessantes Mittel zur Veranschaulichung von Phänomenen sind, die für die quantenmechanische Welt typisch sind, weisen schwebende Tropfen auf einer vibrierenden Badewanne interessante Analogien zur Pilotwellentheorie auf, einer der vielen Interpretationen der Quantenmechanik in ihren frühen Stadien der Konzeption und Entwicklung. Diese Theorie wurde ursprünglich von Louis de Broglie im Jahr 1927 vorgeschlagen[11] und besagt, dass alle Teilchen, die sich bewegen, in Wirklichkeit von einer wellenartigen Bewegung getragen werden, ähnlich wie ein Objekt sich auf einer Flut bewegt. In dieser Theorie wird die Entwicklung der Trägerwelle durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben. Es handelt sich um eine deterministische Theorie, die vollständig nichtlokal ist. Sie ist ein Beispiel für eine Theorie der verborgenen Variablen, und die gesamte nichtrelativistische Quantenmechanik kann in dieser Theorie berücksichtigt werden. Die Theorie wurde 1932 von de Broglie aufgegeben, wobei der Kopenhagener Deutung, wurde aber 1952 von David Bohm als De Broglie-Bohm-Theorie wiederbelebt. Die Kopenhagener Deutung verwendet weder das Konzept der Trägerwelle noch die Annahme, dass

¹⁷Wiki: ([Link](#)), ([Link](#))

sich ein Teilchen auf bestimmten Bahnen bewegt, bis eine Messung durchgeführt wird. Physik der hüpfenden und wandernden Tröpfchen Geschichte

Schwebende Tröpfchen auf einem vibrierenden Bad wurden erstmals 1978 von Jearl Walker in einem Artikel in der Zeitschrift Scientific American schriftlich beschrieben.

Im Jahr 2005 untersuchten Yves Couder und sein Labor als Erste systematisch die Dynamik hüpfender Tröpfchen und entdeckten die meisten quantenmechanischen Entsprechungen.

John Bush und sein Labor bauten auf Couders Arbeit auf und untersuchten das System eingehender. Im Jahr 2015 versuchten drei verschiedene Gruppen, darunter auch John Bush, den Effekt zu reproduzieren, was ihnen nicht gelang.[12][13][14] Stationäres hüpfendes Tröpfchen

Ein Flüssigkeitstropfen kann über einem vibrierenden Flüssigkeitsbad schweben oder hüpfen, weil sich zwischen dem Tropfen und der Badoberfläche eine Luftsicht befindet. Das Verhalten des Tropfens hängt von der Beschleunigung der Badoberfläche ab. Unterhalb einer kritischen Beschleunigung wird das Tröpfchen immer kleinere Sprünge machen, bevor die dazwischen liegende Luftsicht schließlich abfließt und das Tröpfchen zusammenwächst. Oberhalb der Abprallschwelle füllt sich die dazwischenliegende Luftsicht bei jedem Abprall wieder auf, so dass das Tröpfchen die Badoberfläche nie berührt. In der Nähe der Badoberfläche steht das Tröpfchen im Gleichgewicht zwischen Trägheitskräften, Schwerkraft und einer Reaktionskraft, die durch die Wechselwirkung mit der Luftsicht über der Badoberfläche entsteht. Diese Reaktionskraft dient dazu, das Tröpfchen wie ein Trampolin wieder über die Luft zu schleudern. Molacek und Bush haben zwei verschiedene Modelle für die Reaktionskraft vorgeschlagen. Wanderndes Tröpfchen

Für einen kleinen Bereich von Frequenzen und Tropfengrößen kann ein Flüssigkeitstropfen auf einem vibrierenden Bad dazu gebracht werden, auf der Oberfläche zu laufen", wenn die Oberflächenbeschleunigung ausreichend hoch ist (aber noch unterhalb der Faradayschen Instabilität). Das heißt, das Tröpfchen prallt nicht einfach an einer festen Stelle ab, sondern wandert in einer geraden Linie oder in einer chaotischen Bahn. Wenn ein Tröpfchen mit der Oberfläche interagiert, erzeugt es eine transiente Welle, die sich vom Aufprallpunkt ausbreitet. Diese Wellen klingen normalerweise ab, und stabilisierende Kräfte verhindern, dass das Tröpfchen abdriftet. Wenn die Oberflächenbeschleunigung jedoch hoch ist, klingen die beim Aufprall entstehenden transienten Wellen nicht so schnell ab und verformen die Oberfläche, so dass die Stabilisierungs Kräfte nicht ausreichen, um den Tropfen zu halten. So beginnt das Tröpfchen zu "wandern". Quantenphänomene auf makroskopischer Ebene

Es wurde festgestellt, dass sich ein wanderndes Tröpfchen auf einem vibrierenden Flüssigkeitsbad analog zu mehreren verschiedenen quantenmechanischen Systemen verhält, nämlich zu Teilchenbeugung, Quantentunnels, quantisierten Umlaufbahnen, dem Zeeman-Effekt und dem Quantenkoral.

Einzel- und Doppelspaltbeugung

Seit dem frühen 19. Jahrhundert ist bekannt, dass sich auf einem weit von den Schlitten entfernten Bildschirm ein Beugungsmuster zeigt, wenn Licht durch einen oder zwei kleine Schlitzte fällt. Das Licht verhält sich wie eine Welle und interferiert mit sich selbst durch die Spaltöffnungen, wodurch ein Muster aus abwechselnd hoher und niedriger Intensität entsteht. Einzelne Elektronen zeigen ebenfalls wellenförmiges Verhalten als Ergebnis des Welle-Teilchen-Dualismus. Wenn Elektronen durch kleine Schlitzte geschossen werden, zeigt die Wahrscheinlichkeit, dass das Elektron an einem bestimmten Punkt auf dem Schirm auftrifft, ebenfalls ein Interferenzmuster.

Im Jahr 2006 wiesen Couder und Fort nach, dass Tröpfchen, die durch einen oder zwei Schlitz laufen, ein ähnliches Interferenzverhalten zeigen.^[?] Sie verwendeten ein vibrierendes Flüssigkeitsbad in quadratischer Form mit konstanter Tiefe (abgesehen von den Wänden). Bei den "Wänden" handelte es sich um Bereiche mit viel geringerer Tiefe, in denen die Tröpfchen aufgehalten oder reflektiert wurden. Wenn die Tröpfchen an der gleichen Stelle platziert wurden, passierten sie die Schlitzte und wurden scheinbar zufällig gestreut. Bei der Erstellung eines Histogramms der Tröpfchen auf der Grundlage des Streuwinkels stellten die Forscher jedoch fest, dass der Streuwinkel nicht zufällig war, sondern die Tröpfchen bevorzugte Richtungen hatten, die dem gleichen Muster folgten wie Licht oder Elektronen. Auf diese Weise kann das Tröpfchen das Verhalten eines Quantenteilchens beim Durchgang durch den Spalt imitieren.

Trotz dieser Forschungen wurden 2015 drei Teams gegründet: Die Gruppe von Bohr und Andersen in Dänemark, das Team von Bush am MIT und ein Team unter der Leitung des Quantenphysikers Herman Batelaan an der Universität von Nebraska machten sich daran, das Doppelspaltexperiment von Couder und Fort mit aufspringenden Tröpfchen zu wiederholen. Nachdem sie ihre Versuchsaufbauten perfektioniert hatten, konnte keines der Teams das von Couder und Fort berichtete interferenzähnliche Muster beobachten.^[?] Die Tröpfchen liefen in fast geraden Linien durch die Schlitzte, und es erschienen keine Streifen.^[?]

Quantentunneln

Quantentunneln ist ein quantenmechanisches Phänomen, bei dem ein Quantenteilchen eine Potenzialbarriere durchquert. In der klassischen Mechanik kann ein klassisches Teilchen eine potentielle Barriere nicht durchdringen, wenn das Teilchen nicht genügend Energie hat, so dass der Tunneleffekt auf den Quantenbereich beschränkt ist. Ein rollender Ball würde zum Beispiel ohne ausreichende Energie nicht den Gipfel eines steilen Hügels erreichen. Ein Quantenteilchen, das sich wie eine Welle verhält, kann jedoch sowohl eine Reflexion als auch eine Transmission an einer potentiellen Barriere erfahren. Dies kann als Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung gezeigt werden. Es besteht eine endliche, aber in der Regel geringe Wahrscheinlichkeit, das Elektron an einem Ort hinter der Barriere zu finden. Diese Wahrscheinlichkeit nimmt mit zunehmender Barrierefürbreite exponentiell ab.

Die makroskopische Analogie mit Flüssigkeitströpfchen wurde erstmals 2009 demonstriert. Die Forscher richteten ein quadratisches Vibrationsbad ein, das an seinem Rand von Wänden umgeben war. Bei diesen "Wänden" handelte es sich um Bereiche mit geringerer Tiefe, an denen ein wanderndes Tröpfchen reflektiert werden kann. Wenn die wandernden Tröpfchen sich in dem Bereich bewegen durften, wurden sie in der Regel von den Wänden weg reflektiert. Überraschenderweise hüpfte das wandernde Tröpfchen jedoch manchmal an der Barriere vorbei, ähnlich wie ein Quantenteilchen, das einen Tunnel durchläuft. Tatsächlich wurde auch festgestellt, dass die Wahrscheinlichkeit, die Barriere zu passieren, mit zunehmender Breite der Barriere exponentiell abnimmt, genau wie bei einem Quantentunnelteilchen [?].

Quantisierte Bahnen

Wenn zwei atomare Teilchen miteinander wechselwirken und einen gebundenen Zustand bilden, wie z. B. beim Wasserstoffatom, ist das Energiespektrum diskret. Das heißt, die Energieniveaus des gebundenen Zustands sind nicht kontinuierlich, sondern existieren nur in diskreten Mengen und bilden "quantisierte Bahnen". Im Falle des Wasserstoffatoms sind die quantisierten Bahnen durch Atomorbitale gekennzeichnet, deren Form eine Funktion diskreter Quantenzahlen ist.

Auf makroskopischer Ebene können zwei wandernde Flüssigkeitströpfchen auf einer vibrierenden Oberfläche interagieren. Es wurde festgestellt, dass die Tröpfchen einander in einer stabilen Konfiguration mit einem festen Abstand umkreisen. Die stabilen Abstände wurden in diskreten Werten angegeben. Die stabilen kreisenden Tröpfchen stellen analog einen gebundenen Zustand in einem quantenmechanischen System dar. Die diskreten Werte des Abstands zwischen den Tröpfchen entsprechen auch den diskreten Energieniveaus [?].

Zeeman-Effekt

Wenn ein äußeres Magnetfeld an ein Wasserstoffatom angelegt wird, verschieben sich die Energieniveaus zu Werten, die leicht über oder unter dem ursprünglichen Niveau liegen. Die Richtung der Verschiebung hängt vom Vorzeichen der z-Komponente des Gesamtdrehimpulses ab. Dieses Phänomen ist als Zeeman-Effekt bekannt.

Im Zusammenhang mit wandernden Tröpfchen kann ein analoger Zeeman-Effekt durch die Beobachtung kreisender Tröpfchen in einem vibrierenden Flüssigkeitsbad demonstriert werden [?] Das Bad wird ebenfalls mit konstanter Winkelgeschwindigkeit in Rotation versetzt. In dem rotierenden Bad verschiebt sich der Gleichgewichtsabstand zwischen den Tröpfchen etwas weiter oder näher. Die Richtung der Verschiebung hängt davon ab, ob die umlaufenden Tropfen in der gleichen Richtung wie das Bad oder in entgegengesetzter Richtung rotieren. Die Analogie zum Quanteneffekt ist offensichtlich. Die Rotation des Bades entspricht einem von außen angelegten

Magnetfeld, und der Abstand zwischen den Tröpfchen entspricht den Energieniveaus. Der Abstand verschiebt sich unter einer angelegten Badrotation, so wie sich die Energieniveaus unter einem angelegten Magnetfeld verschieben.

Quantenkorral

Im Rahmen der Experimente wurde herausgefunden, dass ein wanderndes Tröpfchen in einem kreisförmigen Bad nicht wahllos umherwandert, sondern dass es bestimmte Orte gibt, an denen das Tröpfchen mit größerer Wahrscheinlichkeit zu finden ist. Insbesondere ist die Wahrscheinlichkeit, das wandernde Tröpfchen zu finden, in Abhängigkeit von der Entfernung vom Zentrum ungleichmäßig und es gibt mehrere Spitzen mit höherer Wahrscheinlichkeit. Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung ähnelt der eines Elektrons, das in einem Quantenkorral eingeschlossen ist.[?]

17.1.10 Observablen

In der Regel kommt man in Standardwerken zur Quantenmechanik nach dem Bekanntmachen der Schrödinger-Gleichung recht schnell zum *Korrespondenzprinzip*. Dazu wird durch Erraten eine Regel aufgestellt, wie sogenannte Observablen, also *messbare* physikalische Größen, allgemeingültig auf mathematische Operatoren abgebildet werden. Mit Hilfe dieser Operatoren lässt sich aus der Wellenfunktion der Erwartungswert für die entsprechende physikalische Größe, das heißt die Observable, berechnen.

Etwas *moderner* wird diese Abbildung als POVM (Positive Operator Valued Measure) bezeichnet. Trotzdem bleibt dies ein rein mathematisches Konzept, dessen physikalische Begründung nicht einfach ersichtlich ist. Diese Situation kann mit einem Zitat von G. Ludwig illustriert werden [?]:

„In dieser Sachlage können wir also den Leser beruhigen, wenn er den Eindruck hat, rein gar nichts von der physikalischen Bedeutung der Struktur der Gesetze für das Rechnen mit Operatoren erkennen zu können; es ist eben unmöglich, eine solche physikalische Bedeutung unmittelbar zu erkennen. Er muss sich zunächst damit zufrieden geben, dass es uns gelungen ist, mit Hilfe des Korrespondenzprinzips ein formales Schema für die gesuchte Quantentheorie zu erraten ...“

Ein weiteres Manko dieser Abbildungsregeln ist, dass einige der sogenannten Observablen selbst gar nicht messbar sind, beispielsweise die Energie. Messbar sind lediglich Energiedifferenzen in Form von Emissions- und Absorptionsspektren, die daneben auch eine natürliche Linienbreite aufweisen. Auf der anderen Seite gibt es experimentell sehr gut bestimmbare Größen, wie die Bindungswinkel Molekülen oder die Gitterkonstanten von Festkörpern, die keinem *Hermiteschen Operator* der Standard-Theorie entsprechen.

Diese Probleme tauchen bei der Stochastischen Mechanik nicht auf. Energie und Impuls lassen sich, wie im Abschnitt ?? gezeigt, konsequent aus ihrer physikalischen Bedeutung herleiten. Dazu bedarf es keines Korrespondenzprinzips oder anderer erratener Formalismen. Das Gleiche gilt auch für den Drehimpuls.

Das Problem einer Observable *Bindungswinkel* besteht bei der Stochastischen Mechanik nicht, da hier keine Operatoren abgebildet werden müssen. Den Bindungswinkel erhält man einfach, indem man für das entsprechende Molekül die Atomanordnung mit der niedrigsten Gesamtenergie sucht.

Ein weiterer Punkt sei hier nur kurz erwähnt. Im Standardzugang zur Quantenmechanik wird oft unterstellt, man könne den Erwartungswert eines Operators beliebig genau messen (oder die Erwartungswerte mehrerer Operatoren gleichzeitig, falls diese Vertauschungsregeln gehorchen). Es wird aber völlig offen gelassen, wie solche Messungen auszuführen sind. Messgeräte bestehen aus Atomen, die damit ebenfalls schon Unschärfe aufweisen. Die Spektrallinien von Atomen weisen eine natürliche Linienbreite auf. Es ist sehr aufschlussreich, wenn selbst Eugene Wigner, Physik-Nobelpreisträger des Jahres 1963 und einer der großen Mitwirkenden bei der Entstehung der Quantenmechanik, in einem Buch „Quantum Theory of Measurement“ schreibt:

„All these are concrete and clearly demonstrated limitations on the measurability of operators. They should not obscure the other, perhaps even more fundamental weakness of the Standard theory, that it postulates the measurability of operators but does not give directions as to how the measurement should be carried out.“

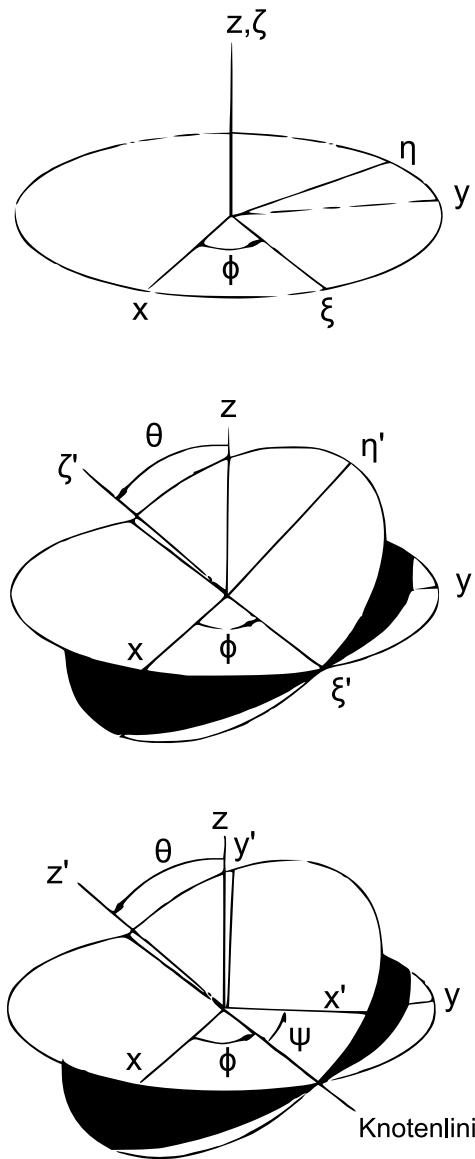


Abbildung 17.13: Klassische Präzession eines Atoms mit dem magnetischen Moment $\vec{\mu}$ und dem Drehimpuls \vec{J} im Magnetfeld \vec{B} . Der Präzessionswinkel kann durch Anlegen eines horizontalen Magnetfeldes \vec{B}' verändert werden, welches entweder ständig senkrecht zu $\vec{\mu}$ steht oder mit der Präzessionsfrequenz oszilliert. (Reproduziert mit freundlicher Genehmigung von L. Fritzsche [?])

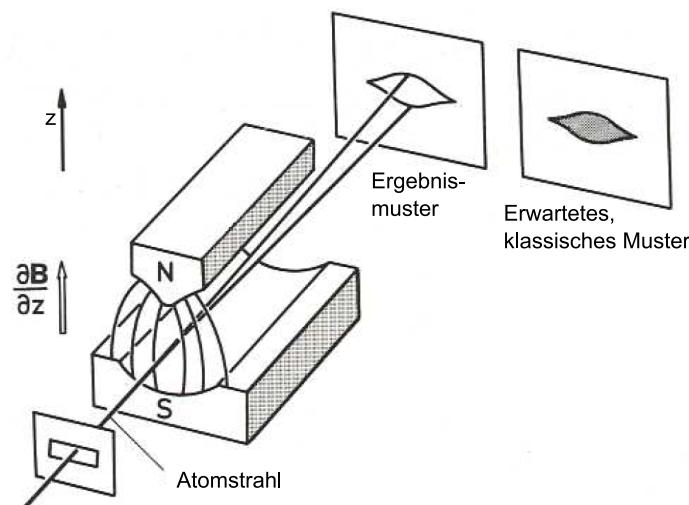


Abbildung 17.14: Versuchsaufbau beim Stern-Gerlach-Experiment [388].

Abbildung 17.15: Magnet im inhomogenen Magnetfeld (schematisch)

Abbildung 17.16: Spin-Präzession im Stern-Gerlach-Magneten (schematisch)

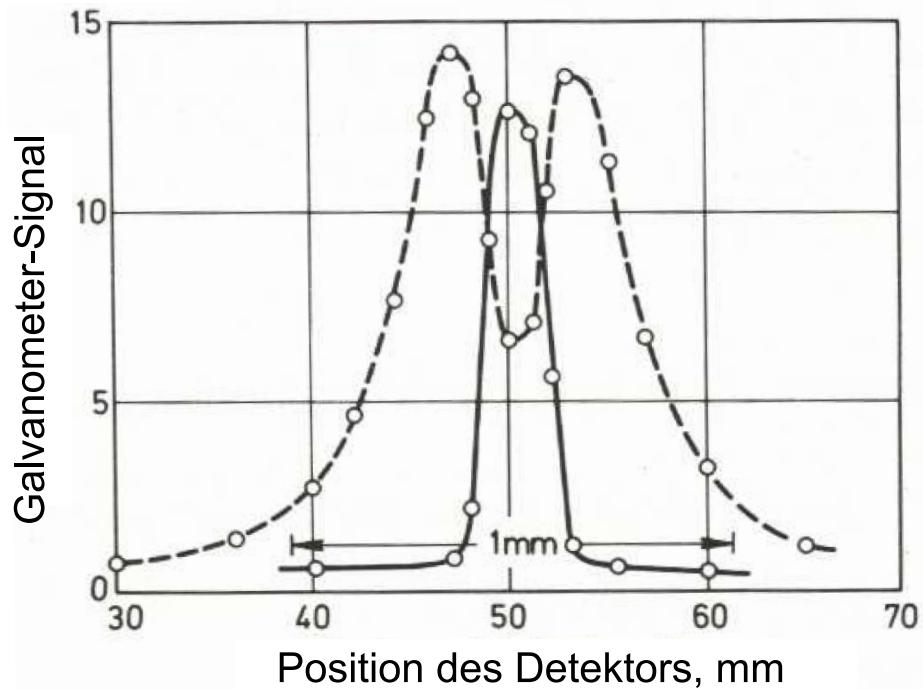


Abbildung 17.17: Experimentalkurven für den Stern-Gerlach-Versuch bei ausgeschaltetem (durchgezogene Linie) und eingeschaltetem (gestrichelte Linie) Magneten

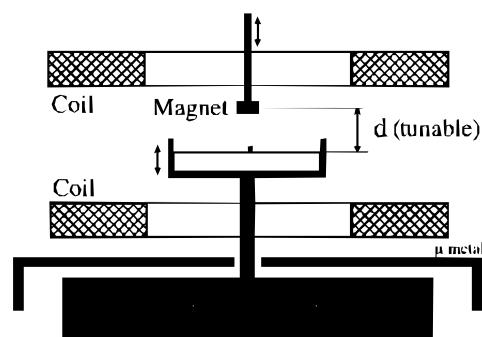


Abbildung 17.18: Experimenteller Aufbau zur Untersuchung Hydrodynamische Analoga.

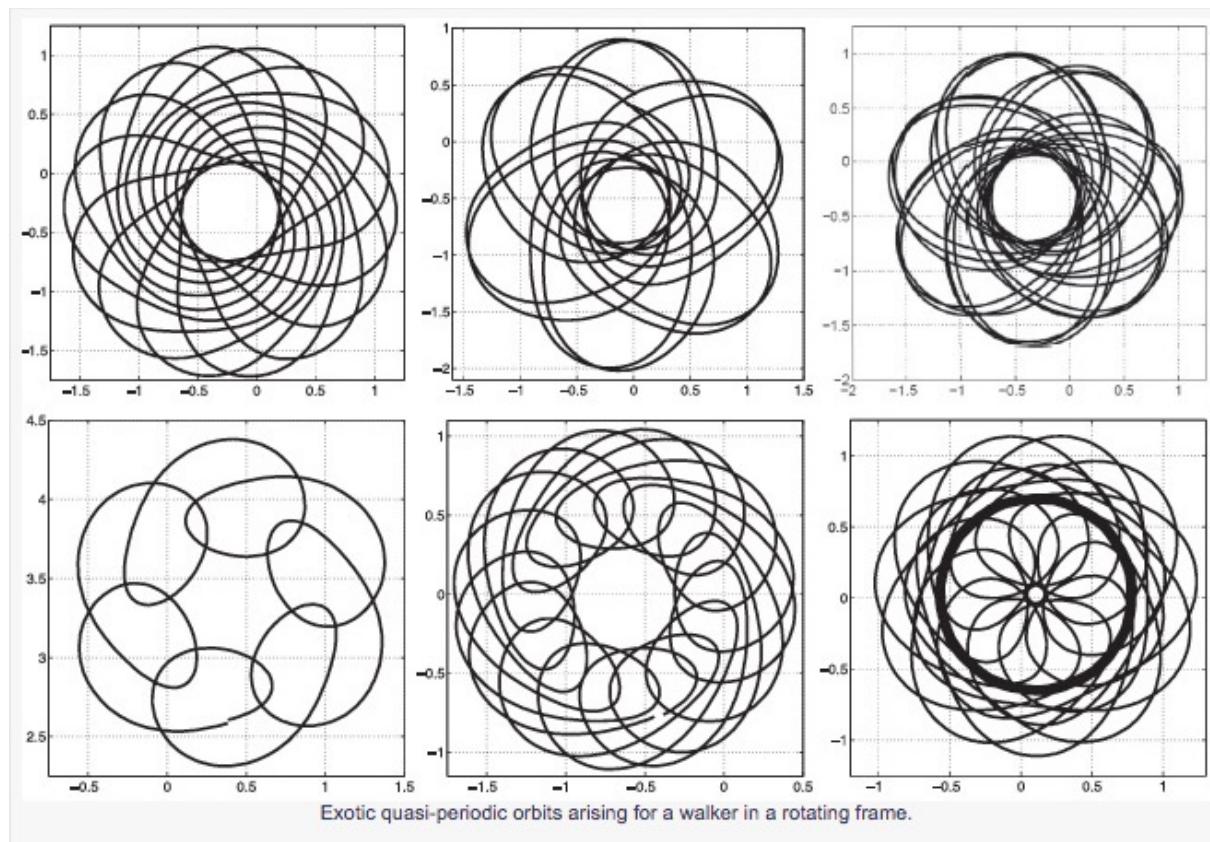


Abbildung 17.19: Bewegungsmuster eines Tröpfchens auf einer vibrierenden Oberfläche (Quelle: [\(Link\)](#)).

18 Kritik an der Stochastischen Mechanik

Ausgewählte Literatur: [7]

18.1 Die Stochastische Mechanik als phänomenologische Theorie

Häufig wird der Stochastischen Mechanik vorgeworfen lediglich eine phänomenologische Theorie zu sein, die keine weiteren Erkenntnisse hinsichtlich der Quantenmechanik liefert. Dazu muss zunächst definiert werden, was man unter einer phänomenologischen Theorie versteht.

Als **phänomenologische Theorien** werden in der Physik solche Theorien bezeichnet, welche die Erscheinungen mitsamt ihren Konsequenzen nur fehlerfrei beschreiben, ohne ihre Ursachen zu erklären.

Die stochastische Mechanik ist eine Theorie, welche die Dynamik von Teilchen unter Berücksichtigung zufälliger Einflüsse zu beschreibt. Sie kann insofern als eine phänomenologische Theorie angesehen werden, da sie die Quantenmechanik zwar beschreibt, allerdings nicht auf die Ursachen oder die dort zugrundeliegenden Mechanismen einzugehen:

- Die Wirkung der Vakuumfluktuationen wird vorausgesetzt. Allerdings liefert die Stochastische Mechanik keine weiteren Erkenntnisse zur Ursache und Natur der Fluktuationen.
- Elementarteilchen werden mit ihren inhärenten Eigenschaften (Impuls, Energie, Ladung etc.) vorausgesetzt. Weitere Erkenntnisse über ihre Struktur liefert die Stochastische Mechanik hingegen nicht.

19 Quantencomputing

Quantencomputing wird oft als die nächste große Revolution in der Informatik gefeiert und verspricht, Berechnungen in einer Geschwindigkeit durchzuführen, die für klassische Computer unerreichbar scheint. Nach der orthodoxen Quantenmechanik nutzt er sogenannte Qubits, die sich in Zuständen befinden können, die nicht nur 0 oder 1 sind, sondern eine Überlagerung dieser Zustände darstellen. Diese Überlagerung und die Möglichkeit zur Verschränkung von Qubits sollen eine exponentielle Beschleunigung bei bestimmten Berechnungen ermöglichen.

Jedoch zeigt sich, dass sowohl die orthodoxe Sichtweise, als auch technologische Grenzen Quantencomputing in der Praxis limitieren.

Im Folgenden wird auf ein Thema *Quantencomputing* unter besonderer Berücksichtigung der Stochastischen Mechanik eingegangen. Im Fokus steht dabei eine saubere *Ontologie*.

- Quantencomputing
 - Quantenalgorithmen
 - Quantencomputer
 - * Quantengatter, Quantenregister
(mit massebehafteten Teilchen)
 - * Quantenannealer
 - * Photonische Quantenrechner
(nicht Bestandteil dieses Kompendiums)

Grundsätzlich wird die Stochastische Mechanik im Zusammenhang mit dem Quantencomputing nur wenig erwähnt. Dies beruht zu einen darauf, dass sie nach wie vor eine Außenseiterinterpretation darstellt und viel ihrer Konzepte nicht mit der orthodoxen Interpretation kompatibel sind. Aus diesem Grund ist dieser Abschnitt eher als ein Essay, als eine wissenschaftliche Betrachtung anzusehen.

Als erstes müssen für eine sauber definierte Ontologie die folgenden Begrifflichkeiten definiert und voneinander abgegrenzt werden:

- Quantenalgorithmen
- Quantencomputing

Dies ist insbesondere essenziell wichtig, da diese Begriffe in populärwissenschaftlichen Veröffentlichungen fälschlicherweise durcheinandergebracht werden.

Quantenalgorithmen : Ein Quantenalgorithmus ist ein [Algorithmus](#), der auf einem Quantencomputer oder der Simulation eines Quantencomputers ausgeführt werden kann. Die hier zugrundeliegenden Konzepte und Theorien sind dabei vom Standpunkt der Mathematik und theoretischen Informatik grundsätzlich funktionsfähig. Die Quantenalgorithmen treffen jedoch keine Aussagen über eine technische Umsetzung von Quantencomputern. Die wichtigsten Quantenalgorithmen sind:

Der Shor-Algorithmus Entwickelt von Peter Shor im Jahr 1994, dient dieser Algorithmus zur effizienten Faktorisierung großer Zahlen, ein Problem, das klassisch nur schwer lösbar ist. Der [Shor-Algorithmus](#) kann dieses Problem in polynomialem Zeit berechnen. Dabei ist der Shor-Algorithmus ein probabilistischer Algorithmus. In einigen, je nach Anzahl der Wiederholungen beliebig wenigen, Fällen führt er zu keinem Ergebnis; der Algorithmus zählt somit zur Klasse der [Monte-Carlo-Algorithmen](#).

Der Grover-Algorithmus Der [Grover-Algorithmus](#), entwickelt von Lov Grover 1996, bietet eine quadratische Beschleunigung für das Durchsuchen unsortierter Datenbanken. Während ein klassischer Algorithmus für ein unstrukturiertes Suchproblem $\mathcal{O}(N)$ Schritte benötigt, kann der Grover-Algorithmus dieses Problem in $O(\sqrt{N})$ Schritten lösen.¹

Quanten-Simulationsalgorithmen Diese Algorithmen simulieren quantenmechanische Systeme, z. B. chemische Reaktionen oder Festkörperphysik-Probleme.

Quantencomputer : Sehr vereinfacht ausgedrückt ist ein Quantencomputer ein Gerät, das mittels Quantenalgorithmen Daten verarbeitet. Dabei können u. a. folgende Technologien verwendet werden.

Quantengatter, Quantenregister: Dies sind die momentan die Konzepte, die (zumindest in der populärwissenschaftlichen Literatur) am häufigsten synonym als Quantencomputer bezeichnet werden. Wichtig ist an dieser Stelle, dass sie mit massebehafteten Teilchen arbeiten und somit der Schrödinger-Gleichung bzw. der Stochastischen Mechanik genügen müssen.

Quantenannealer Dies ist eine besondere Form des Quantencomputers und vom Konzept her kompatibel mit der Stochastischen Mechanik (vgl. Abschnitt ??).

¹Zur Nomenklatur: Siehe [Landau-Symbole](#)

Photonische Quantenrechner Dies sind Quantenrechner und Quantenelektronik, deren Arbeitsweise auf Photonen beruhen. Da Photonen als relativistische Teilchen nicht der Schrödinger-Gleichung unterliegen (vgl. Abschnitt ??), werden sie hier im Weiteren nicht berücksichtigt. Die in Abschnitt 19.1 getroffen Aussagen sind ebenfalls nicht oder zumindest nur eingeschränkt auf Photonen zu übertragen.

Quantencomputing und Stochastische Mechanik

Nach der Stochastischen Mechanik werden die Quantenphänomene als stochastische Prozesse beschrieben. Hieraus ergeben sich für die Realisierung von Quantencomputern Paradigmenwechsel und Einschränkungen. Die Stochastische Mechanik postuliert, dass alle beobachtbaren Quanteneffekte, die normalerweise durch die Schrödinger-Gleichung erklärt werden, auch als zufällige Driftprozesse beschrieben werden können. Dieser stochastische Ansatz vermeidet einige der paradoxen Eigenschaften der Quantenmechanik und eliminiert die Notwendigkeit von Konzepten wie Superposition und Instantaneität bei Verschränkung.

Der Kern der Quantenalgorithmen und darauf aufbauender Quantencomputer besteht darin, dass **Qubits** sich in einer Superposition aus Zuständen befinden und somit gleichzeitig mehrere Werte annehmen können. Durch Quantenverschränkung und Quantenparallelität kann ein Quantencomputer potenziell mehrere Berechnungen gleichzeitig durchführen. Diese fundamentalen Konzepte der Quantenmechanik, die Quantencomputing leistungsstark machen, sind jedoch in der Stochastischen Mechanik nicht existent oder lassen sich nur eingeschränkt erklären. Es ergeben sich folgende Paradigmenwechsel und Probleme die im Weiteren erklärt werden.

19.1 Die Ontologie des Quantencomputings

Die **Ontologie** des Quantencomputings stellt grundlegende Fragen zur Realität und den zugrunde liegenden Strukturen, die Quantenberechnungen ermöglichen. Im Zentrum der konventionellen Interpretation stehen Phänomene wie **Superposition**, **Verschränkung** und **Nicht-Lokalität**, die sich aus der mathematischen Struktur der Quantenmechanik ableiten.

Ontologie des Quantencomputings in der orthodoxen Quantenmechanik In der konventionellen Quantenmechanik ist die Ontologie des Quantencomputings stark auf die Konzepte der Wellenfunktion, Superposition und Verschränkung angewiesen. Die Wellenfunktion repräsentiert den Zustand eines Systems und enthält alle Informationen, die zur Beschreibung von Quantenzuständen notwendig sind. Hierbei ist die Überlagerung von Zuständen zentral: Ein Qubit kann sowohl 0 als auch 1 sein und somit in einer Superposition existieren. Durch Verschränkung kann der Zustand eines Qubits sofort mit dem eines anderen Qubits verbunden sein, unabhängig von

der Distanz. Diese Effekte sind durch die Schrödinger-Gleichung und das Kollabieren der Wellenfunktion bei der Messung theoretisch beschrieben. Die konventionelle Ontologie postuliert, dass Quantenzustände „real“ sind, auch wenn sie nicht direkt beobachtbar sind, sondern nur über Wahrscheinlichkeitsamplituden beschrieben werden. Die mathematischen Strukturen der Quantenmechanik spiegeln eine *nicht-klassische Realität* wider, die durch Wahrscheinlichkeiten und nicht durch deterministische Prozesse charakterisiert ist. In diesem Modell ermöglicht die Wellenfunktion Quantencomputern, Berechnungen parallel durchzuführen und Rechenprobleme effizienter zu lösen als klassische Computer.

Ontologie des Quantencomputings in der Stochastischen Mechanik Die ontologischen Unterschiede zwischen der konventionellen Quantenmechanik und der stochastischen Mechanik werfen grundlegende Fragen zur Funktionsweise und Realisierbarkeit von Quantencomputern auf. Im Folgenden werden einige dieser Unterschiede betrachtet und ihre Bedeutung für das Quantencomputing erläutert.

Superposition und Parallelität Die konventionelle Quantenmechanik besagt, dass ein Qubit mehrere Zustände gleichzeitig einnehmen kann und so Berechnungen parallelisiert. Die stochastische Mechanik sieht die Zustände eines Systems jedoch als Ergebnisse deterministischer und zufälliger Prozesse, ohne dass eine tatsächliche Überlagerung von Zuständen stattfindet. Ontologisch bedeutet dies, dass in der stochastischen Mechanik keine *Parallelität* existiert, wie sie für Quantenalgorithmen erforderlich wäre. Dies widerspricht dem Kernkonzept des Quantencomputings, das auf der gleichzeitigen Existenz mehrerer Zustände basiert, und lässt Zweifel daran auftreten, ob Quantenparallelität mittels der Stochastischen Mechanik überhaupt abbildungbar ist.

Verschränkung und Nicht-Lokalität Verschränkung ermöglicht es Quantencomputern, Zustände miteinander zu verknüpfen und somit kohärente Systeme mit außergewöhnlichen Rechenfähigkeiten zu erzeugen. Die Stochastische Mechanik hingegen vermeidet Nicht-Lokalität und interpretiert die Korrelationen zwischen Teilchen als Ergebnis gemeinsamer stochastischer Prozesse, die auf einer gemeinsamen Drift- und Diffusionsquelle beruhen. Damit entfällt der nicht-lokale Charakter der Verschränkung, was die Anwendung für das Quantencomputing unmöglich macht, da Verschränkung für den Aufbau von komplexen, kohärenten Quantensystemen unerlässlich ist.

Kollaps der Wellenfunktion und Messproblem Im Quantencomputing tritt beim Messen eines Qubits der Kollaps der Wellenfunktion auf, wodurch das System in einen klar definierten Zustand wechselt. In der Stochastischen Mechanik gibt es jedoch keinen solchen Kollapsmechanismus. Stattdessen bleibt das System in einer stochastischen Dynamik gefangen, die durch kontinuierliche Drift- und Diffusionsprozesse bestimmt ist. Dies wirft das Problem auf, wie ein definitives Ergebnis in der Stochastischen Mechanik erhalten werden kann, da kein klarer Kollapszustand erreicht wird.

Ontologische Realitätsfrage der Quantenlogik In der konventionellen Quantenmechanik wird die Quantenlogik als eine von der klassischen Logik abweichende Struktur angenommen, die die Grundlage für die Funktionsweise von Quantencomputern bildet. Diese Quantenlogik basiert auf Wahrscheinlichkeiten, Überlagerungen und Nicht-Lokalität. Die stochastische Mechanik hingegen bleibt innerhalb eines deterministischeren Rahmens und deutet darauf hin, dass das klassische logische Denken auf quantenmechanische Prozesse angewendet werden könnte, was die Notwendigkeit der speziellen Quantenlogik infrage stellt. Ontologisch betrachtet bedeutet dies, dass das logische Fundament des Quantencomputings in der Stochastischen Mechanik keinen Bestand hätte, da dort klassische Prinzipien ausreichen, um die Realität zu erklären.

Physikalische Realität von Qubits Ein zentrales Element der Quantencomputing-Ontologie ist das Qubit, das die kleinste Informationseinheit in einem Quantencomputer darstellt. In der konventionellen Quantenmechanik kann ein Qubit in einer Superposition aus 0 und 1 existieren und so Rechenoperationen effizienter gestalten. In der stochastischen Mechanik lässt sich diese Superposition jedoch nicht realistisch interpretieren, da die Zustände nur zufällig variieren und niemals tatsächlich *überlagert* sind. Dies untergräbt die ontologische Grundlage des Quantencomputing-Systems und lässt das Qubit als physikalisches Konzept problematisch erscheinen.

Fehlende Superposition: Der entscheidende Vorteil von Quantencomputern ist die Überlagerung (Superposition) von Zuständen, die es einem Qubit ermöglicht, gleichzeitig 0 und 1 zu sein. In der stochastischen Mechanik hingegen existiert das Konzept der Superposition nicht in der konventionellen Form. Stattdessen wird der Zustand eines Systems durch eine probabilistische Verteilung beschrieben, die keine gleichzeitige Existenz in mehreren Zuständen ermöglicht. Die Superposition ist somit nur eine scheinbare Erscheinung, die durch die stochastische Bewegung zustande kommt, jedoch nicht den parallelen Zustand eines Qubits darstellt. Dadurch entfällt der Vorteil der simultanen Zustandsberechnung.

Kein direkter Zugang zur Quantenverschränkung: Quantenverschränkung, die es verschränkten Qubits ermöglicht, unabhängig von der Distanz sofortig aufeinander zu reagieren, spielt eine zentrale Rolle im Quantencomputing, insbesondere für die Implementierung von Algorithmen wie Shor oder Grover. Die Stochastische Mechanik erklärt Verschränkung jedoch nicht als reale Verbindung zwischen Teilchen, sondern als eine Korrelation, die auf gemeinsamen statistischen Hintergründen beruht. Es gibt keine Instantaneität oder *spukhafte Fernwirkung*, da die Korrelationen lediglich das Ergebnis von stochastischen Prozessen sind, die nicht die gleiche *verbundene* Dynamik ermöglichen wie die Quantenverschränkung.

Schwierigkeiten mit Quanteninterferenz: Quanteninterferenz ist ein weiteres entscheidendes Prinzip, das es Quantencomputern ermöglicht, bestimmte Pfade auszublenden und andere zu verstärken, wodurch die Berechnungszeit bei einigen komplexen Algorithmen reduziert wird. In der stochastischen Mechanik gibt es jedoch keine Quantenwellen, die konstruktiv oder destruktiv interferieren können. Die Wahrscheinlichkeitsverteilungen, die in der

Stochastischen Mechanik verwendet werden, erlauben keine Interferenzeffekte, wie sie in der Schrödinger-Gleichung auftreten. Ohne Interferenz fällt einer der bedeutendsten Effekte für das Quantencomputing weg, was die Effizienz und Funktionsweise der Algorithmen stark beeinträchtigen würde.

Dekohärenz und klassische Interpretation: In der konventionellen Quantenmechanik stellt die Dekohärenz ein Problem dar, das die Zustände von Qubits kollabieren lässt, sobald sie mit der Umgebung in Kontakt kommen. Nach Nelsons Theorie wird die *Verschwommenheit* der Quantenzustände jedoch rein stochastisch interpretiert, und es gibt keinen Begriff eines koherärenten Superpositionszustands. Da sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung kontinuierlich entwickelt, anstatt in einen klassischen Zustand zu kollabieren, wird der *Zustand* des Systems immer diffus bleiben und kann nicht den fest definierten Zuständen eines Qubits in der Messung entsprechen.

Die Stochastische Mechanik bietet eine viel klarere Sichtweise auf die Quantenmechanik, die viele der Paradoxien und ontologischen Probleme der konventionellen Quantenmechanik vermeidet. Sie postuliert eine realistische, stochastische Basis. Da die Stochastische Mechanik keine Superposition, keine echte Verschränkung und keinen Kollaps der Wellenfunktion kennt, steht sie in einem fundamentalen Widerspruch zu den Prinzipien, die für Quantencomputer postuliert werden. Die ontologischen Annahmen der Stochastischen Mechanik das Konzept eines *parallelen Rechnens* sowie die Idee einer *Nicht-Lokalität* unmöglich. Für die Realisierbarkeit und das Verständnis des Quantencomputings könnte dies schwerwiegende Folgen haben, ebenso wie für die Stochastische Mechanik an sich. Bei einem uneingeschränkten Nachweis der Funktionsfähigkeit eines Quantencomputers auf Basis der orthodoxen Quantenmechanik könnte dies zu einer Falsifizierung der Stochastischen Mechanik führen. Es wäre vermessen an dieser Stelle die grundsätzliche Funktion von Quantencomputern in Frage zu stellen.² Umgekehrt kann ein Scheitern der Quantencomputer zu einer Renaissance der Stochastischen Mechanik führen.

19.2 Quantencomputer auf Basis des „Quantum Annealing“

Quantum Annealing (deutsch: Quanten-Tempern) ist ein Optimierungsverfahren, das zur Lösung komplexer Optimierungsprobleme verwendet wird. Insbesondere bei Aufgaben, die im klassischen Computing extrem viel Rechenleistung benötigen, kann Quantum Annealing eine effizientere Alternative bieten. Ob das Geräte bzw. Rechner, die auf Basis des Quantum Annealing arbeiten zu Quantencomputern zählen ist strittig. Allerdings sind die zugrundeliegenden physikalischen Grundlagen kompatibel mit der Stochastischen Mechanik (siehe auch [Simulated Annealing](#)).

²Das würde höchstens zu Kuriositäten wie den folgenden führen:

„Ich denke, dass es weltweit einen Markt für vielleicht fünf Computer gibt.“ — Thomas Watson, ehemaliger Vorstandsvorsitzender von IBM, im Jahr 1943.

„Der Mensch wird es in den nächsten 50 Jahren nicht schaffen, sich mit einem Metallflugzeug in die Luft zu erheben.“ — Wilbur Wright, Luftfahrtspieler, im Jahr 1901

Grundprinzipien : Quantum Annealing basiert auf einem physikalischen Prozess, der als Adiabatischer Quanten-Computing (AQC) bezeichnet wird. Bei diesem Prozess wird ein System von einem leicht lösbarer Anfangszustand (oder einer Konfiguration) in einen schwierigeren Zielzustand überführt, wobei das System das niedrigste Energieniveau - den sogenannten Grundzustand - erreichen soll. Während des Übergangs wird das System vorsichtig und langsam „abgekühlt“ oder modifiziert, um den Zielzustand zu erreichen, ohne in Zwischenzustände oder unerwünschte Energie-Level zu fallen. Die mathematische Grundlage für Quantum Annealing ist das sogenannte **Ising-Modell**, welches die Energiezustände eines Systems beschreibt. Das Ising-Modell repräsentiert dabei einzelne Elemente (oder *Spins*), die entweder in einem Zustand *up* oder *down* sein können und in einer bestimmten Wechselwirkung zueinander stehen. Ziel ist es, die Kombination der Spins zu finden, die die Gesamtenergie des Systems minimiert.

Funktionsweise und Ablauf eines Quantum-Annealing-Prozesses: Der Quantum-Annealing-Prozess verläuft in mehreren Schritten:

Initialisierung des Systems Zunächst wird das Quanten-System in einen Anfangszustand gebracht, der einen leicht lösbarer Energiekonfigurationszustand darstellt. Dieser Zustand wird als Superposition verschiedener Möglichkeiten gestartet, was das Prinzip der Quantenmechanik nutzt, in dem ein System sich in mehreren Zuständen gleichzeitig befinden kann.

Evolution des Systems Das System wird im Verlauf der Zeit durch ein externes Feld gesteuert, das langsam verändert wird. Während dieser *Temperung* oder *Annealing-Phase* wird das System vom Anfangszustand in den Zielzustand überführt. Da es sich um einen adiabatischen Prozess handelt, bleibt das System mit großer Wahrscheinlichkeit im energetisch niedrigsten Zustand, wodurch die Wahrscheinlichkeit eines Fehlers minimiert wird.

Erreichen des Grundzustands Wenn das Annealing-Feld korrekt moduliert wird, erreicht das System den optimalen Grundzustand für die spezifische Aufgabenstellung. Dieser Zustand entspricht der besten Lösung für das Optimierungsproblem.

Herausforderungen und Grenzen des Quantum Annealing: Wie alle Konzepte für Quantencomputer besitzt auch das Quantum Annealing die gleichen Schwierigkeiten, die gelöst werden müssen:

Störanfälligkeit: Quantencomputer sind empfindlich gegenüber Störungen, was zur Dekohärenz führen kann. Das bedeutet, dass das System seinen Quanten-Zustand verliert und damit möglicherweise aus dem optimalen Zustand herausfällt.

Temperatur und Stabilität: Quantum-Annealing-Systeme müssen meist bei extrem niedrigen Temperaturen betrieben werden, was technologisch aufwendig und kostspielig ist.

Eingeschränkte Problemlösungskompetenz: Quantum Annealing ist für Optimierungsprobleme geeignet, jedoch nicht für jede Art von Berechnung. Traditionelle Quantenalgorithmen wie der Shor-Algorithmus (Faktorisierung großer Zahlen) oder der Grover-Algorithmus (Suchprobleme) sind mit Quantum Annealing nicht effizient lösbar.

Skalierbarkeit: Derzeit ist die Anzahl der Qubits (quantisierten Einheiten, die Informationen in einem Quantencomputer tragen) limitiert, was die Anzahl der darstellbaren Lösungen einschränkt.

Quantum Annealing und die stochastische Mechanik: Das Ziel von Quantum Annealing ist es, das Energieminimum einer Funktion zu finden, was einer *Optimierung* gleichkommt. Der traditionelle Quantum-Annealing-Ansatz nutzt Quantenmechaniken und das Prinzip des Quanten-Tunneling, um das System in Richtung eines globalen Energietiefs zu bewegen. Die stochastische Mechanik liefert hierfür eine alternative Sichtweise. Anstelle eines direkten Übergangs zum Energie-Minimum durch Quanten-Tunneling können wir die Bewegung des Systems als eine Art stochastischen Prozess betrachten. Der Quantum-Annealing-Prozess lässt sich in der stochastischen Mechanik nach Nelson durch folgende Schritte beschreiben:

Energie-Minimierung als stochastischer Drift: Die Suche nach dem optimalen Zustand kann als Drift eines Teilchens in einem Kraftfeld mit zufälligen Einflüssen modelliert werden. Hierbei bewegt sich das Teilchen gemäß eines stochastischen Prozesses hin zu energetisch günstigen Zuständen.

Thermische Fluktuationen und Brown'sche Bewegung: Die stochastische Mechanik beschreibt das Quanten-Annealing-System als eine Kombination aus deterministischen Kräften und zufälligen Fluktuationen. Während des Annealing-Prozesses unterliegt das System einer Rauschbewegung, die mit der Brown'schen Bewegung vergleichbar ist (vgl Abschnitt ??). Das System „erkundet“ durch diese zufällige Bewegung verschiedene Zustände und „zittert“ letztlich in Richtung des globalen Minimums.

Verhältnis von Drift und Diffusion: In der stochastischen Mechanik bewegt sich ein System durch eine Kombination von Drift (gerichtete Bewegung) und Diffusion (zufällige Streuung). Dieser Prozess entspricht dem Übergang von einem hochenergetischen Zustand hin zu einem niedrigeren Energiezustand. Durch die Drift bewegt sich das System auf ein optimales Minimum zu, während die Diffusion dafür sorgt, dass das System auch kleinere lokale Minima überspringt. Dies vermeidet das Risiko, dass das System in einem suboptimalen Zustand stecken bleibt.

Ausblick: Die Stochastische Mechanik bringt als stochastische Theorie spezifische Vorteile mit sich, die sich: zur Optimierung von Quantencomputern auf Basis des Quantum-Annealing nutzen lassen:

Verständnis des Rauschens und der Fehlertoleranz Die stochastische Beschreibung erlaubt es, die Rolle des Rauschens genauer zu modellieren und dessen Beitrag zur Lösung des Problems zu untersuchen. Dies könnte dabei helfen, Quantum Annealing so anzupassen, dass es weniger anfällig gegenüber Störgeräuschen wird.

Verbesserte Optimierungsprozesse Die Balance zwischen Drift und Diffusion erlaubt es, das Quantum Annealing für spezifische Probleme anzupassen und so das Risiko von *lokalen Minima* zu minimieren. Dies könnte besonders in Anwendungen nützlich sein, bei denen klassische Optimierungsverfahren oft scheitern.

19.3 Paradigmenwechsel

Die Stochastische Mechanik als eine Interpretation der Quantenmechanik erklärt alle relevanten Aspekte bzw. grundlegende Experimente zur Quantenmechanik (vgl. Abschnitt ??).

Allerdings gibt es aus der Perspektive der Stochastischen Mechanik erhebliche Hindernisse, die die Grundprinzipien des Quantencomputings unhaltbar machen. Konzepte wie Superposition, Verschränkung und Interferenz, die im Zentrum des Quantencomputings stehen, sind der Stochastischen Mechanik nicht vorhanden oder erscheinen in einer Form, die für Quantenberechnungen nicht nützlich ist. Stattdessen beschreibt die Stochastische Mechanik ein stochastisches System, das nur auf Wahrscheinlichkeiten beruht und keine parallele Zustandsentwicklung zulässt. Dieser Ansatz widerspricht daher den Prinzipien, die momentan für Quantencomputer postuliert werden.³

Die Realisierung von Quantencomputern basierend auf der Stochastischen Mechanik erfordert einen Paradigmenwechsel:

Darstellung der Qubits durch stochastische Prozesse: In der Stochastischen Mechanik müssen Qubits durch stochastische Zustandsdynamiken repräsentiert werden, die die Diffusionsprozesse und Driften der Wahrscheinlichkeiten modellieren. Ein einzelnes Qubit wäre dann durch die Wahrscheinlichkeiten seiner Zustände bestimmt, wobei die Wahrscheinlichkeitsdynamik stochastisch schwankt und dabei den klassischen Überlagerungszustand simuliert.

Algorithmisches Design auf Basis stochastischer Differentialgleichungen: Algorithmen im Quantencomputing basieren oft auf komplexen Manipulationen der Wellenfunktion. Mit einem stochastischen Ansatz könnte ein Algorithmus durch Differentialgleichungen modelliert werden, die die Drift- und Diffusionskräfte steuern. Dies kann eine interessante Analogie zu Quantenalgorithmen wie dem Shor-Algorithmus (zur Primfaktorzerlegung) oder dem Grover-Algorithmus (zur Suche in ungeordneten Listen) darstellen, indem der Berechnungsprozess durch gezielte stochastische Steuerung optimiert wird.

³For sale – Quantum computer. Never used. ([Link](#))

Thermisches Rauschen zur Simulation von Quantenfluktuationen: Ein wesentlicher Bestandteil der Quantenmechanik sind Quantenfluktuationen. Dies ist eine inhärente Eigenschaft der Stochastischen Mechanik. Diese Fluktuationen wären nicht zwangsläufig allein durch Quantenmechanik bestimmt, sondern können zusätzlich durch eine kontrollierte Einführung thermischer Rauschprozesse modelliert werden.

Neben vielen vermeintlichen Erfolgsmeldungen zu Quantencomputern gibt es auch zunehmend grundlegende Kritik an ihnen (siehe Veröffentlichung der IEEE: ([Link](#))). Grundsätzlich kann gesagt werden, dass ein funktionierender Quantencomputer zu einer Falsifizierung der Stochastischen Mechanik oder zumindest zu einer grundlegenden Überarbeitung führen wird. Das gleiche gilt allerdings auch in die andere Richtung. Sollte sich zeigen, dass die orthodoxe Interpretation nicht zur Lösung der momentanen Probleme, wie Fehlerquote und Rauschen, beitragen kann, wird dies zu einer Renaissance der Stochastischen Mechanik führen.⁴

19.3.1 Physikalische Probleme des Quantencomputings

Instabilität durch Dekohärenz

Orthodoxe Sichtweise: Quantencomputer sind extrem anfällig für äußere Einflüsse, was dazu führt, dass die Qubits ihre Quantenzustände schnell verlieren. Die Dekohärenz wird sofort auftreten, wenn Qubits mit ihrer Umgebung wechselwirken, sei es durch Temperaturänderungen, elektromagnetische Felder etc. Diese Interferenzen verursachen das sofortige *Kippen* eines Qubits in einen klassischen Zustand. Solche Störungen können kaum vermieden werden, da es praktisch unmöglich ist, einen perfekten, isolierten Raum für Qubits zu schaffen.

Die Kohärenzzeit, also die Dauer, in der Qubits ihren Quantenzustand halten können, wird nach der orthodoxen Sichtweise oft im Mikrosekunden- bis Millisekundenbereich postuliert. Selbst für kleinste Berechnungen sind diese Zeitfenster zu kurz, da die benötigte Stabilität für komplexe Rechenprozesse schlicht nicht erreicht werden kann. Die fundamentale Unstabilität der Qubits ist eine der größten Herausforderungen des Quantencomputings.

Sichtweise der Stochastischen Mechanik: Das Konzept der Kohärenz wird in der Stochastischen Mechanik nicht verwendet. Die zugrundeliegende Verschränkung von Zuständen kann hier allenfalls als ein *Grenzfall* bei der Präparation eines Zustandes angesehen werden. Hierzu kann auch auf die populärwissenschaftliche Monographie von Fritzsche [135] verwiesen werden (siehe auch Abschnitt ??). Die Dekohärenz in der orthodoxen Sichtweise wird auch als *Verrauschen* des Quantencomputers bezeichnet. Aus Sicht der Stochastischen Mechanik ist dies lediglich das Ergebnis der zugrundeliegenden Stochastischen Prozesse, die letztendlich auf den Vakuumfluktuationen beruhen.

⁴Eine sehr umfangreiche Link-Sammlung zu kritischen Artikeln zum Quantencomputing findet sich unter: ([Link](#)).
(Die weiteren dort behandelten Themen gehören leider in den Abschnitt 20 - Gitschrenk.)

Unlösbares Problem der Fehlerkorrektur

Orthodoxe Sichtweise: Die Quantenphysik verhindert eine effektive Fehlerkorrektur in Quantencomputern. Während klassische Computer Fehler über einfache Mechanismen beheben können, ist dies bei Quantencomputern nicht möglich, da Qubits durch die Quantenmechanik nur schwer kopiert oder dupliziert werden können? ein Prozess, der für klassische Fehlerkorrekturmethoden zentral ist. In der Quantenmechanik gilt das **No-Cloning-Theorem**, das besagt, dass es nicht möglich ist einen unbekannten Quantenzustand exakt zu kopieren.

Diese Unmöglichkeit macht eine Fehlerkorrektur in Quantencomputern komplex und resourcenintensiv, dass sie unpraktikabel wird. Die theoretischen Ansätze zur Fehlerkorrektur, die existieren, sind bislang auf wenige Qubits beschränkt und erfordern extrem viele zusätzliche Qubits zur Fehlerkorrektur selbst. Eine Skalierung dieser Methoden auf die für praktische Anwendungen erforderliche Qubit-Anzahl ist daher extrem schwierig. Ohne eine effektive Fehlerkorrektur ist es allerdings unmöglich, zuverlässige Quantenberechnungen durchzuführen.

Sichtweise der Stochastischen Mechanik: Aus der Sicht der Stochastischen Mechanik sind Fehler eine inhärente Eigenschaft von Quantencomputern. Daher werden aus der Sicht der Stochastischen Mechanik insbesondere solche Konzepte von Quantencomputern favorisiert, die eine große Menge an Zufallszahlen benötigen (vgl. Abschnitt 19.2).

19.3.2 Technologische Barrieren

Häufig werden mit Zusammenhang mit dem Quantumcomputing folgende Argumente angebracht, die eine grundsätzliche Realisierbarkeit in Frage stellen⁵:

- Skalierbarkeit
- Energieaufwand und Kühlbedarf
- Algorithmen und Anwendungen

Hier ist zu anzumerken, dass dies alles technologische Hürden sind. Hier gibt es keine grundsätzlichen Grenzen die eine Realisierbarkeit einschränken.

⁵Viele diese Argumente hätten bei den ersten Computern auf Basis von Elektrorenröhren in ähnlicher Form gegolten. Durch die technologische Weiterentwicklung hin zur Mikroelektronik wurden diese Argumente obsolet.

Skalierbarkeit: Während klassische Computer in ihrer Architektur leicht zu skalieren sind, sind Quantencomputer extrem schwer skalierbar. Selbst wenn es gelingt, eine kleine Anzahl von Qubits für eine kurze Zeit zu stabilisieren, wird dies exponentiell schwieriger, je mehr Qubits hinzukommen. Die Anforderungen an Präzision und Stabilität steigen massiv mit der Anzahl der Qubits, und die Fehlerquote nimmt exponentiell zu. Dies ist ein inhärentes Problem der Quantenmechanik selbst und kein technologisches Problem, das durch bessere Hardware gelöst werden könnte.

Da die Berechnungen in Quantencomputern von der Interaktion mehrerer Qubits abhängen, führt jede zusätzliche Qubit-Anzahl zu einer erheblichen Erhöhung der Instabilität. Eine praktische, skalierbare Umsetzung von Quantencomputern mit Millionen oder Milliarden von Qubits [?] die nötig wären, um die Versprechen des Quantencomputings zu erfüllen [?] ist daher momentan sehr schwer zu realisieren.

Energieaufwand und Kühlbedarf: Heutige Quantencomputer benötigen extrem niedrige Temperaturen, oft nahe dem absoluten Nullpunkt, um ihre Qubits überhaupt in einem überlagerten Zustand zu halten. Das Erreichen und Aufrechterhalten dieser Temperaturen erfordert spezialisierte Kryotechnik und einen immensen Energieaufwand, was eine erhebliche Herausforderung darstellt. Eine solche Infrastruktur ist schwierig zu skalieren. Allerdings handelt es sich hier ebenfalls um ein rein technologisches Problem.

Algorithmen und Anwendungen: Ein weiteres fundamentales Problem des Quantencomputings ist die begrenzte Anzahl von Algorithmen, die wirklich nützliche Vorteile bieten könnten. Während es einige wenige Quantenalgorithmen wie Shors Algorithmus zur Faktorisierung oder Grovers Algorithmus zur Datenbanksuche gibt, die eine theoretische Leistungssteigerung aufzeigen, sind diese nur für sehr spezifische Probleme nutzbar.

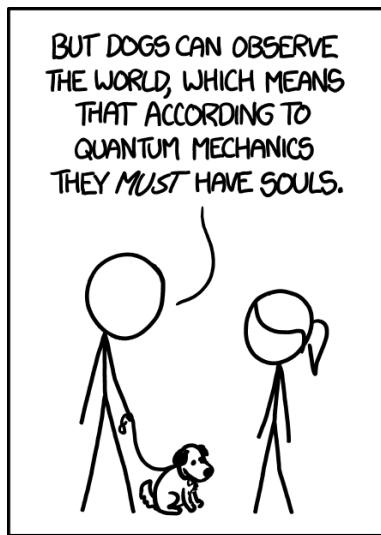
Wie bereits gesagt kann man Quantencomputer als hoch spezialisierte **Analogrechner** ansehen. Dies wirft dann sofort Fragen hinsichtlich der **Turing-Vollständigkeit** der verwendeten Programmiersprachen auf.

20 Giftschrank der Quantenmechanik

Es ist immer wieder kurios, wie die Quantenmechanik mit folgenden pseudowissenschaftlichen Themen in Verbindung gebracht wird:

- Freie Energie¹,
- Freie Energie Maschinen,
- Casimir-Energie²

Hier werden überall physikalische Gesetze mit Esoterik gemischt. Da diese Themen immer wieder in polärwissenschaftlichen Medien auftauchen, wurde diesem Komplex hier ein eigenes Kapitel gewidmet.



PROTIP: YOU CAN SAFELY IGNORE ANY SENTENCE THAT INCLUDES THE PHRASE "ACCORDING TO QUANTUM MECHANICS"

¹Nicht zu verwechseln mit der freien Energie in der Thermodynamik.

²Im Sinne von technisch nutzbaren Energiemengen.

Und ein Tipp von xkcd , ([link](#)).

Eine gute Einführung findet sich bei der GWUP ([Link](#))

Die Zahl an populärwissenschaftlichen Büchern, in denen versucht wird, dem geneigten Leser die „fantastische“ Welt der Quantenmechanik (QM) näher zu bringen, ist in letzter Zeit so schnell gewachsen, dass jeder Versuch, den Überblick zu behalten, zwecklos wäre.

Wie die Relativitätstheorie scheint die Quantenmechanik interessanter, attraktiver als andere Gebiete der Physik (z. B. gibt es kaum Bücher über Festkörperphysik, die sich an ein breites Publikum wenden), weil sie

- fundamental ist,
- Phänomene behandelt, die dem gesunden Menschenverstand scheinbar widersprechen,
- daher bei der Suche nach Antworten auf wichtige Fragen der Philosophie nicht ignoriert werden darf.

Durch die Popularisierung der Quantenmechanik sind manche ihrer Fachausdrücke in die Alltagssprache übernommen worden; die ursprüngliche, mathematisch präzise definierte Bedeutung dieser Begriffe geht dabei zwangsläufig verloren. Auch die berühmten Paradoxien der Quantenmechanik (Schrödingers Katze, das Einstein-Podolsky-Rosen-Paradoxon usw.) gehören heutzutage zum Grundwissen des eifigen Konsumenten der populärwissenschaftlichen Literatur.

Trotz der Bedeutung und Erfolge der Quantenmechanik ist die klassische Physik, von manchen als reduktionistisch und materialistisch verschrien, aber nach wie vor das richtige Werkzeug, um Vorgänge aus dem Bereich des alltäglichen Lebens, der Biologie oder der Medizin zu beschreiben...

Eine gute Zusammenstellung zum Thema zur „Nutzung“ der Nullpunktenergie hat [Victor J. Stenger](#) gegeben³. Nachfolgend ist der in Deutsch übersetzte Text wiedergegeben:

Ein Jahrzehnt ist nun vergangen, seit Pons und Fleischmann auf ihrer berüchtigten Pressekonferenz die Entdeckung der „kalten Fusion“ verkündeten. Die meisten Physiker waren sofort skeptisch, aber nicht nur, weil man erstaunlichen Behauptungen immer verblüffenden Behauptungen immer skeptisch sein sollte. Und sie waren nicht skeptisch, weil sie die kalte Fusion für unmöglich hielten. Tatsächlich war das Phänomen bereits im Labor beobachtet worden. Neu war hier die Behauptung, dass die

³aus: Skeptical Briefs June 1999; Victor J. Stenger

kalte Fusion eine praktische Quelle für unbegrenzte und im Wesentlichen kostenlose Energie sein könnte.

Die kalte Fusion der Pons-Fleischmann-Variante ist durch einen Prozess möglich, der als Quantentunnelung bekannt. Zwei Wasserstoffkerne in einem Palladium-Gitter können durch die abstoßende elektrische Barriere tunneln, die sich aus ihrer gegenseitigen positiven Veränderung ergibt. Eine Berechnung mit Formeln, die in jedem Physiklehrbuch der unteren Klassenstufen zu finden sind, bestätigt jedoch schnell, dass die Wahrscheinlichkeit für ein solches Tunneln bei den betreffenden Entfernung verschwindend gering ist, etwa fünfzig Größenordnungen kleiner als eins. Es wurden andere Mechanismen vorgeschlagen, die ebenso unwahrscheinlich sind. Und natürlich wurde in keinem einzigen Experiment jemals ein positiver Nettoenergieertrag nachgewiesen. Jeder, über den Sie gelesen haben, war noch an die Steckdose angeschlossen.

Dennoch wird die Forschung an der kalten Fusion in einigen kleinen Labors auf der ganzen Welt weitergeführt. Verfechter behaupten weiterhin Effekte, die von der Physik und der Chemie weitgehend ignoriert werden. Das Versprechen von unendlich viel freier Energie ist verführerisch, mit unsagbaren Reichtümern, die denjenigen erwarteten, der sie erreichen kann - ähnlich wie das Versprechen des ewigen Lebens.

*Zu den Verfechtern der kalten Fusion gesellten sich andere, die in den Bann des Phantoms der freien Energie geraten sind dem Phantom der freien Energie verfallen sind, auf der Ersten Internationalen Konferenz über freie Energie, die vom 29. bis 30. April in Bethesda, MD, stattfand. Gesponsert von der Zeitschrift *Infinite Energy* gesponsert und vom Integrity Research Institute ausgerichtet, sollte die Konferenz ursprünglich vom US-Außenministerium mitgesponsert werden. Als sich das Außenministerium nach eingehender Prüfung zurückzog, übernahm das Handelsministerium Co-Sponsorschafft. Schließlich zog sich das Handelsministerium zurück, so dass es sich um eine private Veranstaltung handelte.*

Neben der kalten Fusion war eines der anderen zentralen Themen der Konferenz eine andere Quelle „freier Energie“, die in den letzten Jahren in den Medien große Beachtung gefunden hat. Der Vorschlag besteht darin, die Nullpunktenergie zu nutzen, die in dem Bereich existiert, den wir uns normalerweise als leeren Raum vorstellen.

*Ein wichtiger Befürworter der Nullpunktenergie ist der Physiker Harold Puthoff, der vielen Lesern von *Skeptical Briefs* gut bekannt ist. (Siehe Martin Gardners Kolumne im *Skeptical Inquirer* Mai/Juni 1998 und Puthoffs Antwort in der folgenden Ausgabe).*

Wir wissen aus der Quantenfeldtheorie, dass das Vakuum nicht wirklich leer ist, sondern von „virtuellen Teilchen-Antiteilchen-Paaren wimmelt, die ständig durch Quantenfluktuationen erzeugt und zerstört werden. Im Jahr 1948 zeigte der niederländische Physiker Hendrick Casimir, dass bei zwei in einem Vakuum Vakuum eine Nettokraft existiert, die die beiden Platten zusammenzieht. Diese Kraft

resultiert aus der Tatsache, dass den virtuellen Teilchen zwischen den Platten weniger Zustände zur Verfügung stehen zwischen den Platten zur Verfügung stehen als die außerhalb. Ein Energieungleichgewicht führt dazu, dass die Platten zusammengedrückt werden.

Die Realität der Casimir-Kraft wurde 1996 von Steven Lamoreaux bestätigt, und zwar auf genau dem quantitativen Niveau, das in den Casimir-Gleichungen vorhergesagt wurde. Die Gewinnung dieser Energie ist prinzipiell möglich, und Puthoff propagiert sie als eine praktische Möglichkeit. Aber auch hier haben wir eine nicht unmögliche Idee die mit ein paar einfachen Berechnungen, die ein Schüler durchführen kann, schnell als unpraktisch verworfen werden kann die auch ein Schüler durchführen kann.

Ich habe Casimirs Formeln genommen, die in Puthoffs Arbeiten zu finden sind, und berechnet, dass zwei hochglanzpolierte Metallplatten, die 200 Kilometer mal 200 Kilometer auf einer Seite durch ein Mikron (ein Millionstel eines Meters) getrennt sind genug potenzielle Energie haben, um eine 100-Watt-Glühbirne eine Sekunde lang zum Leuchten zu bringen. Wenn wir 30 Millionen solcher Strukturen im Weltraum stoßen würden, könnten wir sie an unsere könnten wir sie an unsere Glühbirne anschließen und sie ein Jahr lang leuchten lassen.

Nun ist Puthoff kein Dummkopf. Er kennt diese Zahlen und argumentiert, dass wir vielleicht einige Mikrostrukturen entdecken werden, die sich nutzen lassen. Aber die Chancen dafür sind in der Tat gering. Im Grunde müssten diese Mikrostrukturen schon bereits in einer Form existieren, aus der diese Energie gewonnen werden kann. Die Energie ist nicht wirklich frei. Wenn zwei Platten durch eine gewisse Distanz getrennt sind, muss die Energie, die die Energie, die beim Zusammenprall entsteht, in das System eingebracht werden in das System eingebracht werden, um die Platten in dieser Entfernung zusammenzufügen.

Das ist wie die Energie, die wir aus fallendem Wasser gewinnen. Wir finden dies in der Natur, also ist sie in diesem Sinne frei". Aber die Sonne lieferte die ursprüngliche Energie die das Wasser verdampft und in die Luft gehoben hat, wo es dann als Regen und Schnee wieder herabfallen konnte. Es nützt nichts, wenn wir vorschlagen, dass wir eine Sklaven zu beschäftigen, die Eimer mit Wasser auf die Spitze eines Staudamms, der in einer flachen Ebene gebaut wurde, zu tragen. Wir müssen die Sklaven immer noch Sklaven füttern, damit sie die Energie für die Arbeit aufbringen können.

In ähnlicher Weise können wir nicht erwarten, dass wir irgendwelche Mikrostrukturen herstellen können, die eine Nullpunktenergiegewinnung ermöglichen. Sie müssten bereits in der Natur existieren, von natürlichen Kräften aufgebaut und für unsere Nutzung vorbereitet sein. Und welche Art von Objekten könnten wir uns vorstellen zu finden? Mit den gleichen Formeln können wir uns zwei flache Platten aus reiner

Kernmaterie vorstellen, wie das Innere eines Neutronensterns, getrennt durch einen Kerndurchmesser. Um unsere 100-Watt-Glühbirne ein Jahr lang leuchten zu lassen, bräuchten wir eine solche Struktur, die etwa ein Mikrometer mal ein Mikrometer groß ist.

Wenn diese oder andere Mikrostrukturen, die praktische Energie liefern können, in der Natur Energie liefern könnten, hätten wir sie sicher schon gefunden. Ich empfehle Ihnen nicht, Ihre Ruhestandsgelder in Unternehmen zu investieren, die die versprechen, diese Technologie zu entwickeln.

Wie man Quantenunsinn erkennt

Der nachfolgende Abschnitt beruht aus Ideen der folgenden beiden Artikel: ([Link](#)) ([Link](#))

Terminologie : In der pseudowissenschaftlichen Literatur wird die physikalische Terminologie verwendet um falsche Behauptungen zu kaschieren. Die falsch angewandte Terminologie soll explizit dazu verwendet werden dem Laien das kritische Hinterfragen zu erschweren. Das Problem ist, dass auch die echte Wissenschaft viele Fachbegriffe verwendet, und wenn man kein Experte auf diesem Gebiet ist, ist der Unterschied vielleicht nur schwer zu erkennen.

Als Faustregel hierzu kann man sich fragen, an wen sich die Aussagen richten:

- Wenn Wissenschaftler mit anderen Wissenschaftlern sprechen, brauchen sie eine bestimmte Terminologie, um präzise kommunizieren zu können.
- Im Gegensatz dazu sprechen Pseudowissenschaftler fast immer in der Öffentlichkeit und verwenden absichtlich wissenschaftliche Terminologie. Es ist nicht so, dass sie keine klareren Formulierungen kennen, sie wollen nur nicht von Laien kritisch hinterfragt werden.

Maßstäbe ignorieren : Häufig wird versäumt zu erklären, dass die Quantenmechanik nur auf sehr kleinen Skalen geschieht. Der geeignete Maßstab hierfür ist der atomare Maßstab. Wenn man Elektronen in einem Atom hat, weiß man nicht, wo sich das Elektron befindet, aber es besteht eine extrem hohe Wahrscheinlichkeit, dass es nicht sehr weit vom Kern entfernt ist. Diese Unbestimmtheit auf makroskopische Objekte, wie z. B. einen Fußball zu übertragen ist grundsätzlich falsch. Weiterhin ist zu berücksichtigen, dass die quantenmechanische Beschreibung von Systemen, die aus mehr als nur ein paar Teilchen bestehen, sehr kompliziert.

Beobachter : Häufig wird in der pseudowissenschaftlichen Literatur behauptet, dass die Quantenmechanik bewusste Beobachter benötigt. Dies wird häufig mit Begriffen wie *Quantenbewusstsein* umschrieben.

Fakt ist, dass es in der Quantenmechanik nichts gibt, was bewusste Beobachter erfordert.

Interpretationen der Quantenmechanik : Die verschiedenen Interpretationen der Quantenmechanik werden in ?? ausführlich beschrieben. Im pseudowissenschaftlichen Kontext werden diese durcheinander gewürfelt und einzelne Aspekte aus diesem Zusammenhang gerissen.

Diese verschiedenen Interpretationen die in Abschnitt ?? beschrieben werden sind, zumindest experimentell, gleichwertig, da sie alle auf der Schrödinger-Gleichung beruhen.

Pseudowissenschaftliche Interpretationen, die den experimentellen Ergebnissen widersprechen, können als falsifiziert und damit als widerlegt angesehen werden.

20.1 Schrödinger Katze

*When I hear of Schrödinger's cat, I reach for my pistol.
(Stephen Hawking)*

Anmerkung 35 (Lebt Schrödingers Katze noch?):Keine Ahnung, schau halt nach!

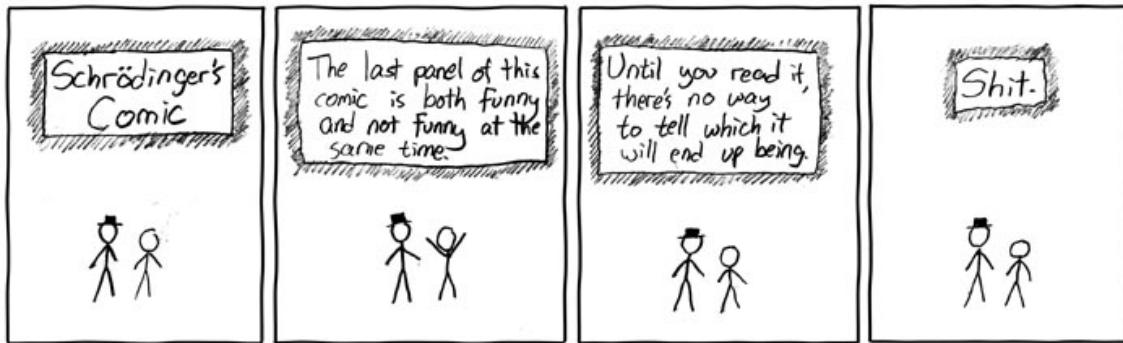
In einer statistischen Gesamtheit von Schrödingerkatzen leben nach der Zeit t noch

$$100 * \exp\left(-t \frac{\ln 2}{T_{1/2}}\right)$$

Prozent, wobei $T_{1/2}$ die Halbwertszeit des Radioisotops ist. ^a

^aDies ist nur eine grobe Näherung, da Katzen 7 Leben (im englischsprachigen Raum 9 Leben) haben.

Das Gedankenexperiment mit Schrödingers Katze ist eines der bekanntesten Beispiele in der Quantenphysik und wirft wichtige Fragen zur Interpretation der Quantenmechanik auf. In diesem Abschnitt wird eine kritische Perspektive auf Schrödingers Katze einnehmen und die zugrunde liegenden Probleme sowie die kontroversen Diskussionen um das Experiment beleuchten.



Der obligatorische xkcd [\(link\)](#).

Die Frage ob Schrödingers Katze lebendig oder tot ist, wurde eigentlich schon endgültig geklärt:

Allerdings führt CERN hierzu aktuelle Forschungen durch: → [\(Link\)](#) ←

ERWIN SCHRÖDINGER führte das Gedankenexperiment 1935 ein, um die Schwierigkeiten der Kopenhagener Deutung der Quantenmechanik zu verdeutlichen [190]. Das Experiment stellt eine Katze in einen verschlossenen Raum mit einem radioaktiven Material, das eine 50/50-Chance

hat, zu zerfallen und ein tödliches Gift freizusetzen. Gemäß der Kopenhagener Deutung existiert die Katze in einer Überlagerungszustand, in dem sie gleichzeitig lebendig und tot ist.

Schrödinger selbst kritisierte die Missinterpretation der Quantenmechanik und die Verharmlosung ihrer Konsequenzen. Er argumentierte, dass die Bewegungsgleichungen der Quantenmechanik dieselbe Klarheit und Bestimmtheit wie klassische Modelle besitzen. Die Idee, dass ein makroskopisches Objekt wie eine Katze in einem Superpositionszustand sein könnte, erschien ihm unplausibel und absurd.

Es muss hier sehr deutlich angeführt werden, dass das Gedankenexperiment mit Schrödingers Katze nicht angemessen ist, um die Quantenmechanik zu erklären, da es sich um ein vereinfachtes und unrealistisches Szenario handelt. Die Vermengung von makroskopischen und mikroskopischen Phänomene führt zu keinem tieferen Verständnis der Quantenmechanik.

Anmerkung 36 (Hat Schrödinger selber behauptet, dass die Katze gleichzeitig lebendig und tot ist?):

Diese Aussage wurde von Schrödinger niemals getätigt. Hier kann nur auf die Originalarbeit verwiesen werden [?], in der er selber diesen Zustand als „burlesk“ bezeichnete. Beim Studium dieses Artikels kommt man zu Schluss, dass das Experiment allesfalls als eine Metapher für den Unterschied zwischen der Klassischen Physik und der Quantenmechanik zu betrachten ist.

20.2 Vakuumenergiemaschinen

Die Existenz der Nullpunktenergie nachzuweisen ist eine Sache, nützliche Mengen zu extrahieren eine andere. Bisher wurden keine derartigen Geräte gebaut, die funktional sind.

21 Literatur

21.0.1 Weiterführende Literatur

Es gibt bereits umfangreiche Literatur über Versuche die nichtrelativistische Quantenmechanik aus einem Konzept der dissipationsfreien stochastischen Punktmechanik abzuleiten. Ein Vorgänger der Idee, den probabilistischen Charakter der Quantenmechanik mit der Wirkung eines stochastischen Hintergrundfeldes zu korrelieren, findet sich in der Arbeit von Bohm und Vigier [200].

Die in diesem Kompendium hauptsächlich zur Herleitung der Stochastischen Mechanik referenzierten Arbeiten beziehen überwiegend auf spätere Arbeiten zu diesem Thema und ermeiden bestimmte Implikationen, die in den letzten 30 Jahren häufig kritisiert wurden. Man vergleiche hierzu zu die Arbeiten von Weizel [194], E. Nelson [4], [6], Guerra und Morato [405], M. Baublitz [406], L. de la Pena und A. H. Cetto [?], Petroni und Morato [86], T. C. Wallstrom [278] und zahlreiche Verweise darin. Eine ausführliche Übersicht findet sich bei R. F. Streater [277].

Eine frühere Übersicht über die Arbeiten bis 1986 ist in einem Buch von Namsrai [61] enthalten). Neuere Beiträge stammen von Fritzsche und Haugk [132] und Xiao-Song Wang [408].

Ein anderer Ansatz, der sich ebenfalls auf Vakuumfluktuationen bezieht, sich aber auf die Nicht-Gleichgewichtsthermodynamik stützt, wurde von Grössing vorgeschlagen [409], [410].

Bücherschrank

Tabelle 21.1: Spezielle Literatur nach Themen

Thema	Literatur	Kommentar
Allgemeines:		
Links / noch nicht bearbeitet:		
Noether	(0) (Link)	
Noether	(0) (Link)	
Noether	(0) (Link)	
Noether	(0) (Link)	
Noether	(0) (Link)	

Tabelle 21.1: (Fortsetzung) Spezielle Literatur nach Themen

Thema	Literatur	Kommentar
Noether	(0) (Link)	
Random Walk	(0) (Link)	(für Abbildungen)
Random Walk	(0) (Link)	(für Simulationen)
Random Walk	(0) (Link)	
Random Walk	(0) (Link)	
Literatur	(0) (Link)	
<hr/> Skripte / Quantenmechanik:		
	(0) [98]	
	(0) [99]	(Tabelle 4.1)
	(0) [107]	
	(0) [108]	
	(0) [112]	(Zeichnungen)
	(0) [129]	
	(0) [146]	
	(0) [147]	
<hr/> Skripte / Stochastik:		
	(0) [118]	
	(0) [119]	
	(0) [148]	
<hr/> Lehrbuch / Allgemein:		
	(0) [68]	gutes Lehrbuch
	(0) [79]	gutes Lehrbuch
<hr/> Lehrbuch / Stochastik:		
	(0) [138]	
	(0) [116]	
<hr/> Thema / Lokalität:		
<hr/> Thema / Zitterbewegung:		

Videos

Tabelle 21.2: Videos zur Stochastischen Mechanik und Quantenmechanik

Edward Nelson	Stochastic Mechanics Applied to Relativistic Fields	(Video)
Jacob Barandes	A New Formulation of Quantum Theory	(Video)
Guido Bacciagaluppi	On Multi-Time Correlations in Stochastic Mechanics	(Video)
Ana Maria Cetto	Origin and nature of the wave element in quantum mechanics	(Video)
N.N.	3 Different Interpretations of Quantum Mechanics	(Video)
Yuval Dagan	A Hydrodynamically-inspired relativistic pilot-wave theory	(Video)
Augusto Garuccio	John Bell's unpublished notes about de Broglie's Pilot Wave	(Video)
Olavo Leopoldino da Silva Filho	Foundations of Quantum Mechanics: the stochastic derivation	(Video)
Florian Marquardt	Foundations of Quantum Mechanics (12): Bohm's theory is nonlocal. Nelson's Stochastic Quantization.	(Video)
T. Mikami	Schrödinger's and Nelson's problems and stochastic optimal transport	(Video)
Andrea Carosso	Simulating Ontologies in QFT: Bohm and Nelson	(Video)

Literaturverzeichnis

- [1] NELSON, Edward: *The Mystery of Stochastic Mechanics*. Princeton Univeristy, Department of Mathematics. – ([Local](#))
- [2] NELSON, Edward: *Stochastic Mechanics of Particles and Fields*. Princeton Univeristy, Department of Mathematics. – ([Local](#))
- [3] E., Nelson: In: *J. Math. Phys.* 5 (1964), 332–343 S. [3-24](#)
- [4] E., Nelson: In: *Phys. Rev.* 150 (1966), 1079–1085 S. [3-2](#), [3-24](#), [21-1](#)
- [5] NELSON, Edward: *Dynamical Theories of Brownian Motion*. NY : Princeton Univeristy Press, 1967. – ([Local](#))
- [6] NELSON, Edward: *Quantum Fluctuation*. Princeton, New Jersey : Princeton Univeristy Press, 1985. – ([Local](#)) [21-1](#)
- [7] NELSON, Edward: Review of stochastic mechanics. In: *Journal of Physics: Conference Series* 361 (2012), S. 1–4. <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/361/1/012011>. – DOI 10.1088/1742-6596/361/1/012011. – ([Local](#)) [18-1](#)
- [8] PAVON, Michele: *A stochastic control problem connected to the measurement process in stochastic mechanics*. – ([Local](#))
- [9] PAVON, Michele: Hamilton? s principle in stochastic mechanics. In: *J. Math. Phys.* 36 (1995), S. 6774. – ([Link](#)), ([Local](#))
- [10] PAVON, Michele ; TICOZZI, Francesco: Controlling the desity evolution of classical, thermodynamic and quantum systems. In: *Proceedings of the 44th IEEE Conference on Decision and Control*, 2005, S. 1800–1805. – ([Local](#))
- [11] PAVON, Michele: Derivation of the wave function collapse in the context of Nelson’s stochastic mechanics. In: *Journal of Mathematical Physics* 40 (1999), November, Nr. 11, 5565-5577. <http://dx.doi.org/10.1063/1.533046>. – DOI 10.1063/1.533046. – ISSN 1089–7658
- [12] PAVON, Michele: A footnote to Nelson’s interpretation of the two-slit experiment. In: *Preprint* (2003). – Dedicated to Francesco Guerra on the occasion of his 60th birthday

- [13] PAVON, Michele: *Quantum Schroedinger bridges.* <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0306052>. Version: 2003
- [14] PAVON, M.: Quantum Schrödinger Bridges. In: *Dedicated to Anders Lindquist on the occasion of his 60th birthday* (2011), June. – ([Local](#))
- [15] DAVIDSON, Mark P.: Stochastic Models of Quantum Mechanics - A Perspective. In: *Spectel Research Corp.* – ([Local](#))
- [16] G.N., Ord: *Quantum Mechanics in a Two Dimensional Spacetime - What is a wavefunction?* 2009. – ([Local](#))
- [17] NOTTALE, Laurent: Scale Relativity: First Steps toward a Field Theory. In: ALONSO, J. D. (Hrsg.) ; LORENTE, Paramo M. (Hrsg.): *Proceedings of Spanish Relativity Meetings*. Salas, 1993, S. 121–132. – ([Local](#))
- [18] HAMILTON, L. P.: Quantum-classical correspondence for teh kinetic energy. In: *Lecture Series on Computer and Computational Sciences* Bd. 1. Waterloo, Canada : Brill Academic Publishers, 2006, S. 1–4. – ([Local](#))
- [19] OHBA, Ichiro: Some stochastic aspects of quantization. In: *Prama journal of physics* (2002)
- [20] PETRONI, Nicola C. ; VIGIER, J. P.: Stochastic derivation of the Dirac equation in terms of a fluid spinning tops endowed with random fluctuations at the veleocity of light. In: *Physics Letters* 81 A (1981), Nr. 1, S. 12–14. – ([Local](#))
- [21] PETRONI, Nicola C.: *Asymptotic behaviour of densities for Nelson processes.* – ([Local](#))
- [22] PETRONI, Nicola C. ; GUERRA, Francesco: Quantum Mechanical States as Attractors for Nelson Processes. In: *Foundations of Physics* 25 (1995), Nr. 2, S. 297–315. – ([Local](#))
- [23] PETRONI, N. C. ; MARTINO, S. de ; SIENA, S. de ; F., Illuminati: *Controlled Stochastic Collective Dynamics of Particle Beams.* – ([Local](#))
- [24] W., Petersen ; C., Perret: *Numerical integreation of complex SDEs.* Seminar for Applied Mathematics, March 2012. – ([Local](#))
- [25] BACCIAGALUPPI, Guido: *Nelsonian Mechanics Revisited.* – ([Local](#))
- [26] BACCIAGALUPPI, Guido: *A Conceptual Introduction to Nelson's Mechanics.* 2005. – ([Local](#))
- [27] HARANAS, Ioanis I.: *A Different Derivation of the Calogero Conjecture.* – ([Local](#))
- [28] HARANAS, Ioanis I.: A Different Derivation of the Calogero Conjecture. In: *Journal of Theoretics* 4 (2002), Nr. 1, S. 1–7. – ([Local](#))

-
- [29] SUPPES, Patrick: Probabilistic Causality in Quantum Mechanics. In: *Journal of Statistical Planning and Interference* 258 (1990), S. 293–303. – ([Local](#))
 - [30] KHRENNIKOV, A.: An attempt to go beyond quantum-mechanics: a classical field model of quantum averages and correlations. In: *Quantum Computers and Computing* 9 (2009), S. 65–80. – ([Local](#))
 - [31] GARBARCZEWSKI, Peter: Derivation of the quantum potential from realistic Brownian particle motions. In: *Physics Letters A* 162 (1992), S. 129–136. – ([Local](#))
 - [32] KOBAYASHI, Keita ; YAMANAKA, Yoshiya: *Extension of Nelson's Stochastic Quantization to Thermal Situation in Thermo Field Dynamics*. 2010. – ([Local](#))
 - [33] FLIESS, Michel: *An intrinsic approach to the quantum fluctuations in stochastic mechanics*. 2006. – ([Local](#))
 - [34] FLIESS, Michel: Probabilités et fluctuations quantiques (Probabilities and quantum fluctuations). In: *Mathématique, Série I* 344 (2007), pp.663-668. <http://france.elsevier.com/direct/CRASS1/>. – ([Link](#)), ([Local](#))
 - [35] PUTHOFF, H. E.: Ground state of hydrogen as a zero-point-fluctuation-determined state. In: *Physical Review D* 35 (1987), May, Nr. 10, S. 3266–3269. – ([Local](#))
 - [36] PUTHOFF, H. E.: *Quantum Vacuum Fluctuations: A New Rosetta Stone of Physics?* 2003. – ([Local](#))
 - [37] IMAFUKU, Kentaro ; OHBA, Ichiro: Tunneling time and Nelson's Quantum Mechanics. In: *NN* 982 (1997), S. 30–40. – ([Local](#))
 - [38] NN: *Review of Stochastic Mechanics*. – ([Local](#))
 - [39] WISEMAN, Howard M.: Stochastic Processes in Physics / Centre of Laser Science, The University of Queensland. 1998. – Forschungsbericht. – ([Local](#))
 - [40] DERAKHSHANI, Maaneli: *A Suggested Answer To Wallstrom's Criticism: Zitterbewegung Stochastic Mechanics II*. Institute for History and Foundations of Science, University Utrecht, 2016. – ([Local](#))
 - [41] *A Suggested Answer To Wallstrom's Criticism: Zitterbewegung Stochastic Mechanics I*. Institute for History and Foundations of Science, University Utrecht, 2016. – ([Local](#))
 - [42] DERAKHSHANI, Maaneli: *Stochastic Mechanics Without Ad Hoc Quantization: Theory And Application To Semiclassical Gravity*. Utrecht, University Utrecht, Proefschrift, 2017. – ([Local](#))
 - [43] DERAKHSHANI, Maaneli: *Stochastic Mechanics Without Ad Hoc Quantization: Theory And Applications To Semiclassical Gravity*, Universiteit Utrecht, Proefschrift, 2017. – ([Local](#))

-
- [44] DERAKHSHANI, Maaneli: *Stochastic Mechanics Without Ad Hoc Quantization: Theory And Applications To Semiclassical Gravity*. <https://arxiv.org/abs/1804.01394>. Version: 2018
 - [45] DERAKHSHANI, Maaneli: *A Suggested Answer To Wallstrom's Criticism: Zitterbewegung Stochastic Mechanics I*. Utrecht, The Netherland, April 2019. – ([Local](#))
 - [46] DERAKHSHANI, Maaneli ; BACCIAGALUPPI, Guido: On Multi-Time Correlations in Stochastic Mechanics. (2022), August 31. – ([Local](#)), ([Link](#))
 - [47] ROWLANDS, Peter: *Are there alternatives to our present theories of physical reality* Department of Physics, Univerity of Liverpool, 2006. – ([Local](#))
 - [48] HESTENES, David: The Zitterbewegung Interpretation of Quantum Mechanics. In: *Found. Physics* 20 (1990), Nr. 10, S. 1213–1232. – ([Local](#))
 - [49] KRACKLAUER, A. F.: An Intuitive Paradigm For Quantum Mechanics. In: *Physics Essays* 5 (1992), Nr. 2, S. 226–234. – ([Local](#))
 - [50] GRABERT, Hermann ; HÄNGGI, Peter ; TALKNER, Peter: Is quantum mechanics equivalent to a classical stochastic process In: *Phys. Rev. A* 19 (1979), Nr. 6, S. 2440–2445. – ([Local](#))
 - [51] VATSYA, SR: Current State of Quantum Theory. In: *Physics & Astronomy International Journal* 1 (2017), Nr. 4. – ([Local](#))
 - [52] WANG, Xiao-Song: *Derivation of the Schrödinger equation from Newton's Second Law Based on a Fluidic Continuum Model of Vacuum and a Sink Model of Particles*. Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100080, China, 10 2006. – ([Local](#))
 - [53] WANG, Xiao-Song ; XIONG, Cai-Dong: *Zitterbewegung at the level of quantum field theory*. Chengdu 610054, China, . – ([Local](#))
 - [54] GRÖSSING, Gerhard: *Quantum Cybernetics: A New Perspective for Nelson's Stochastic Theory, Nonlocality and the Klein-Gordon Equation*. – ([Local](#))
 - [55] GRÖSSING, Gerhard: *Kontinuum – Die Geschichte einer Verdrängung mit besonderem Augenmerk auf die Quantentheorie*. 2005. – ([Local](#))
 - [56] GRÖSSING, Gerhard ; MESA PASCASIO, Johannes ; SCHWABL, Herbert: A classical explanation of quantization. In: *arXiv preprint arXiv:0812.3561* (2011). – ([Link](#)) ([Local](#))
 - [57] FLAMM, D.: *Neueres zum Weltbild der Quantenmechanik*. Universität Wien, . – ([Local](#))
 - [58] DRAGON, Norbert: *Anmerkungen zur Quantenmechanik*. Skript, 2017. – ([Link](#)), ([Local](#))

-
- [59] PAVLIOTIS, Grigoris A.: Stochastic Processes and Applications — Diffusion Processes, the Fokker-Planck and Langevin Equations. In: *Texts in Applied Mathematics* Bd. 60. Springer, 2014. – ([Local](#))
 - [60] BAEZ, John C. ; BIAMONTE, Jacob D.: *Quantum Techniques for Stochastic Mechanics*. University of California, Riverside, CA 92521, USA. . – ([Local](#))
 - [61] NAMSRAI, Khavtgain: Nonlocal Quantum Field Theory and Stochastic Quantum Mechanics. In: MERWE, Alwyn van d. (Hrsg.): *Fundamental Theories of Physics*. Dordrecht : D. Reidel Publishing Company, 1986. – ([Local](#)) 21-1
 - [62] PRUGOVECKI, Eduard: Stochastic Quantum Mechanics and Quantum Spacetime — A Consistent Unification of Relativity and Quantum Theory Based on Stochastic Spaces. In: MERWE, Alwyn van d. (Hrsg.): *Fundamental Theories of Physics*. Dordrecht : D. Reidel Publishing Company, 1986. – ([Local](#))
 - [63] GARBACZEWSKI, Piotr: Relativistic problem of random flights and Nelson's stochastic mechanics. In: *PhysicsLetters A* 164 (1991), S. 6–16. – ([Local](#))
 - [64] HÜMMLER, Holm G.: *Relativer Quantenquark — Kann die moderne Physik die Esoterik belegen?* Springer, 2017. – ([Local](#))
 - [65] WILLIAMS, Angharad: *On Nelson's stochastic mechanics for a semiclassical parabolic state.*, Swansea University, Diss., 2012. – ([Link](#)), ([Local](#))
 - [66] BACCIAGALUPPI, Guido: Non-equilibrium in Stochastic Mechanics. In: *Journal of Physics: Conference Series* 361 (2012), S. 1–12. – ([Link](#)), ([Local](#))
 - [67] MITCHELL, John: *Exploring Stochastic Quantum Mechanics and Emergent Gravity*, Undergraduate Honors Theses – Paper 1338, 2019. – ([Link](#)), ([Local](#))
 - [68] GRIFFITH, David ; SCHROETER, Darrell F.: *Introduction to Quantum Mechanics*. 3rd. edition. Reed College, Oregon : Cambridge University Press, 2017. – ([Local](#)) 21-2
 - [69] HUAN, Alfred: Statistical Mechanics. – Forschungsbericht. – ([Local](#))
 - [70] STOHRER, Wolf-Dieter ; KOCH, O.: Die Phänomene der Quantenmechanik / Universität Bremen. 1999. – Forschungsbericht. – ([Local](#))
 - [71] GLODDE, Martin ; PLIKAT, Martin ; STOHRER, wolf-Dieter: Das qualitative Orbitalmodell in der Chemie / Universität Bremen. 2001. – Forschungsbericht. – ([Local](#))
 - [72] CVITANOVIC, Predrag ; ARTUSO, Roberto ; DAHLQVIST, Per ; MAINIERI, Ronnie ; TANNER, Gabor Gregor and V. Gregor and Vattay ; WHELAN, Niall ; WIRZBA, Andreas: Classical and Quantum Chaos / nbi. 2001. – Forschungsbericht. – ([Local](#))

- [73] KEYL, Michael: Algebraische Methoden der Quantentheorie / Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Berlin,. Berlin, 1997. – Forschungsbericht. – ([Local](#))
- [74] DEGENHART, Christof: Quantenmechanik-Formelsammlung. 1994. – Forschungsbericht. – ([Local](#))
- [75] KRAJEWSKI, Florian: *New path integral simulation algorithms and their application to creep in the quantum sine-Gordon chain.* Mainz, Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Diss., August 2003. – ([Local](#))
- [76] MARSHALL, Trevor W. ; SANTOS, Emilio: *The myth of the photon.* 1997. – ([Local](#))
- [77] MARSHALL, Trevor W.: *The zeropoint field – no longer a ghost.* 2001. – ([Local](#))
- [78] MILTON, Kimball A.: *The Casimir Effect: Physical Manifestations of Zero-Point Energy.* 2001. – ([Local](#))
- [79] RÖTH, Ernst-Peter: *Einführung in die statistische Thermodynamik und Quantenmechanik.* – ([Local](#)) 21-2
- [80] GARRET, Ron: *Quantum Mysteries Disentangled.* 2008. – ([Local](#))
- [81] JAIN, Khyati: Quantum Tecgniques for Stochastic Mechanics / Birla Institute of Technology and Science. 2019. – Forschungsbericht. – ([Local](#))
- [82] CRESSON, Jacky ; DARSES, Sebastian: Stochastic embedding of dynamical systems. In: *Journal of Mathematical Physics* 48 (2007), S. 072703–1 – 072703–54. – ([Local](#))
- [83] BUSH, W. M. John ; OZA, Anand U.: Hydrodynamic quantum analogs. In: *Rep. Prog. Phys* 84 (2020), Nr. 017001, S. 41 pp.. – ([Local](#))
- [84] GUERRA, Francesco: Stochastic variational principles and quantum mechanics. In: *Ann. Inst. Henri Poincare* 49 (1988), Nr. 3, S. 315–324. – ([Local](#))
- [85] ARULDHAS, G.: *Quantum Mechanics 500 Problems with Solutions.* PHI Learning. – ([Local](#))
- [86] PETRONI, Nicola C. ; MORATO, Laura M.: Entangled states in stochastic mechanics. In: *J. Phys. A: Math. Gen.* 33 (2000), S. 5833–5848. – ([Local](#)) 21-1
- [87] LINDGREN, J. ; LIUKKONEN, J.: Quantum Mechanics can be understood through stochastic optimization on spacetimes. In: *Scientific Reports* 9 (2019), Nr. 1. – ([Link](#)), ([Local](#))
- [88] BHATTACHARYA, Samyadeb ; SUMAN, Dutta ; ROY, Sisir: Schrödinger-Langevin Equation and Ion Transport at Nano Scale. In: *Journal of Modern Physics* 2 (2011), S. 231–235. – ([Local](#))
- [89] AGRAWAL, Shiv: *A Stochastic View of Quantum Mechanics.* 2020. – ([Local](#))

-
- [90] TUMULKA, Roderich: *Lecture Notes on Foundations of Quantum Mechanics – Winter semester 2017/18.* Lecture Notes, . – ([Local](#))
 - [91] TUMULKA, Roderich: *Lecture Notes on Foundations of Quantum Mechanics – Winter semester 2019/20.* Lecture Notes, . – ([Local](#))
 - [92] LOMONACO, Samuel J.: *A Rosetta stone for quantum mechanics with an introduction to quantum computation.* Lecture Notes, 2000. – ([Local](#))
 - [93] MUNKHAMMAR, Joakim: *Quantum mechanics from a stochastic least action principle.* Foundational Questions Institute Essay, 2019. – ([Local](#))
 - [94] EBERHARD, P. H.: Bell's Theorem without Hidden Variables. In: *Il Nuovo Cimento* (1977), Nr. B1
 - [95] CARLEN, Eric A.: Conservative Diffusions. In: *Communications in Mathematical Physics* (1984), S. 293–315. – ([Local](#))
 - [96] SMITH, Jim: *Modern Quantum Mechanics.* 2. Boston : Addison-Wesley, 2011. – ([Local](#))
 - [97] DIRAC, P. A. M.: *The principles of quantum mechanics.* 3. Oxford : Clarendon Press, 2011. – ([Local](#))
 - [98] NATTERMANN, Thomas: *Quantenmechanik.* Skript, 2001. – ([Local](#)) 21-2
 - [99] MANTEL, Karl-Heinz: *Einführung in die Quantenmechanik.* München : Skript, 2011. – ([Local](#)) 21-2
 - [100] VAN BELLE, Jean L.: *The Zitterbewegung Interpretation of Quantum Mechanics.* March 2019. – ([Local](#))
 - [101] BEYER, M. ; PAUL, W.: On the Stochastic Mechanics Foundation of Quantum Mechanics. In: *Universe* 7 (2021), S. 166. <http://dx.doi.org/10.3390/universe7060166>. – DOI 10.3390/universe7060166. – ([Link](#)), ([Local](#))
 - [102] MARROCCO, Michele: *Simple derivation of Schrödinger equation from Newtonian dynamics.* Rome, Italy, . – ([Local](#))
 - [103] GRÖSSING, G. ; FUSSY, S. ; PASCASIO, J. M. ; SCHWABL, H.: *Elements of sub-quantum thermodynamics: quantum motion as ballistic diffusion.* Vienna, Austria, . – ([Local](#))
 - [104] BOHM, D.: Non-Locality in the Stochastic Interpretation of the Quantum Theory. In: *Ann. Inst. Henri Poincaré* 49 (1988), Nr. 3, S. 287–296. – ([Link](#)), ([Local](#))
 - [105] STEINSIEK, Annette ; SCHNEIDER, Ursula A.: *Die perfekte Welle. Erwin Schrödinger On Zitterbewegung.* Innsbruck, Austria : Begleittext zu Faksimiles aus dem Brenner-Archiv, 2019. – ([Local](#))

- [106] BRODY, Dorje C. ; HUGHSTON, Lane P.: Stochastic reduction in nonlinear quantum mechanics. In: *Proc. R. Soc. Lond. A* 458 (2002), S. 1117–1127. – ([Local](#))
- [107] BRANDES, T.: *Quantenmechanik II*. Skript, 2012. – ([Local](#)) 21-2
- [108] G., Blatter: *Quantenmechanik*. Skript, 2015. – ([Local](#)) 21-2
- [109] BOYER, Timothy H.: Stochastic Electrodynamics: The Closest Classical Approximation to Quantum Theory. In: *Atoms* 7 (2019), Nr. 29. – ([Local](#))
- [110] SCHMELZER, I.: *Nelsonsche Stochastik - FAQ*. 2. Version. November 2008. – ([Local](#))
- [111] ALBEVERIO, Sergio ; HOGH-KROHN, Raphael: *A remark on the connection between stochastic mechanics and the heat equation*. – ([Local](#))
- [112] DIEZEMANN, Gregor: *PC II-Quantenmechanik*. Skript, 2015. – ([Local](#)) 21-2
- [113] HÖRHAMMER, Christian: *Nicht-Markovsche Dynamik, Dekohärenz und Verschränkung in dissipativen Quantensystemen mit Anwendung in der Quanteninformationstheorie von Systemen kontinuierlicher Variablen*, Universität Bayreuth, Diss., 2007. – ([Local](#))
- [114] NOTTALE, Laurent: *New Formulation of Stochastic Mechanics – Application to Chaos*. – ([Local](#))
- [115] GODART, Maurice: *Stochastic Theory of Quantum Mechanics*. – ([Local](#))
- [116] KLYATSKIN, V. I.: *Stochastic equations through the eye of the physicist basic concepts, exact results and asymptotic approximations*. Elsevier Science, 2005. – ([Link](#)), ([Local](#)) 21-2
- [117] MESSER, August: *Das Realismus-Problem der Quantenmechanik angesichts der Dekohärenz-Interpretation*, Justus-Liebig-Universität Gießen, Diss., 2007. – ([Local](#))
- [118] KREE, Reiner: *Stochastische Beschreibung physikalischer Systeme*. Skript, 2015. – ([Local](#)) 21-2
- [119] SANTEN, Ludger ; RIEGER, Heiko: *Stochastische Prozesse in der statistischen Physik*. Skript, 2015. – ([Local](#)) 21-2
- [120] HAISCH, Bernhard ; RUEDA, Alfonso ; PUTHOFF, H. E.: Physics of the Zero-Point Field - Implications for Interia, Gravitation and Mass. In: *Speculations in Science and Technology* 20 (1997), S. 99–114. – ([Local](#))
- [121] MYRVOLD, Wayne C.: On some early objections to Bohm's theory. In: *International Studies in the Philosophy of Science* 17 (2003), Nr. 1, S. 7–24. – ([Local](#))
- [122] SIMON, Barry: *Ed Nelson's Work in Quantum Theory*. 2004. – ([Local](#))

-
- [123] ILLUMINATI, Fabrizio ; VIOLAS, Lorenza: Stochastic variational approach to minimum uncertainty states. In: *J. Phys. A Math. Gen.* 28 (1995), S. 2953–2961. – ([Local](#))
 - [124] MITTER, Sanjoy K.: Markov Random Field, Stochastic Quantization and Image Analysis. In: SPIGLER, R. (Hrsg.): *Applied and Industrial Mathematics*. Kluwer Academic Press, 1991, S. 101–109. – ([Local](#))
 - [125] GUIDA, Francesco: On the relation between the Nelson stochastic derivative and the Feynman-Kac theorem. In: *International Journal of Pure and Applied Mathematics* 112 (2017), Nr. 3, S. 445–455. – ([Local](#))
 - [126] GARBACZEWSKI, Piotr: Relativistic problem of random flights and Nelson’s stochastic mechanics. In: *Physics Letters A* 164 (1992), S. 6–16. – ([Local](#))
 - [127] SIEDSCHLAG, Christian: *Mechanismen der Ionisation atomarer Systeme in intensiven Laserpulsen*, Universität Dresden, Diss., 2002. – ([Local](#))
 - [128] WERNER, Patrick: *Quanteneffekte in nanomechanischen Systemen*, Ludwig Maximilians Universität, München, Diss., 2002. – ([Local](#))
 - [129] BURKARD, G.: *Höhere Quantenmechanik und Elektrodynamik*. Skript, 2012. – ([Local](#)) 21-2
 - [130] MAGYAR, Rudolph J.: *A Glance at the Fractional Quantum Hall Effect*. 2001. – ([Local](#))
 - [131] WITTICH, Olaf: *Eine Invarianzeigenschaft Brownscher Bewegung und Transformationen der Feynman-Kac-Formel*, Universität Göttingen, Diss., 1997. – ([Local](#))
 - [132] FRITSCH, Lothar ; HAUGK, Michael: A new look at the derivation of the Schrödinger equation from Newtonian mechanics. In: *Annalen der Physik* 12 (2003), Nr. 6, S. 371–403. <http://dx.doi.org/10.1002/andp.200310017>. – DOI 10.1002/andp.200310017. – ([Link](#)), ([Local](#)) 17-35, 21-1
 - [133] FRITSCH, Lothar ; HAUGK, Michael: Reexamining the Einstein-Podolsky-Rosen experiment, photon correlation and Bell’s inequality. In: *ResearchGate* (2007), August. – ([Link](#)), ([Local](#)) 17-34
 - [134] FRITSCH, Lothar ; HAUGK, Michael: Stochastic Foundation of Quantum Mechanics and the Origin of Particle Spin. In: *ResearchGate* (2009), Dezember, 1-47. <https://vixra.org/abs/002ceD71>. – ([Link](#)), ([Local](#)) 17-22
 - [135] FRITSCH, Lothar ; HAUGK, Michael: *Quantenmechanik für Ahnungslose*. Stuttgart : S. Hirzel Verlag, 2012. – ISBN 978–3777621364. – ([Local](#)) 17-22, 17-30, 17-35, 19-10
 - [136] FRITSCH, L. ; HAUGK, M.: Stochastic Foundation of Quantum Mechanics and the Origin of Particle Spin. In: LICATA, I. (Hrsg.): *Space-Time Geometry and Quantum Events*. Nova Science Publishers, Inc., 2014, S. 45–154 17-22

-
- [137] FRITSCHE, Lothar ; HAUGK, Michael: *Quantum Mechanics without Observers*. 2019. – ([Local](#)) **3-21, 17-29**
 - [138] MAHNKE, Reinhard ; KAUPUZS, Jevgenijs ; LUBASHEVSKY, Ihor: *Physics of Stochastic Processes – How Randomness Acts in Time*. Wiley-VCH, 2009. – ([Local](#)) **21-2**
 - [139] FRIEBE, Cord ; KUHLMANN, Meinard ; LYRE, Holger ; NÄGER, Paul ; PASSON, Oliver ; STÖCKLER, Manfred: *Philosophie der Quantenphysik – Einführung und Diskussion der zentralen Begriffe und Problemstellungen der Quantentheorie für Physiker und Philosophen*. Springer, 2015. – ([Local](#))
 - [140] BARROW, John D.: *The Book of Nothing*. Vintage Books, New York. – ([Local](#))
 - [141] CLOSE, Frank: *Nothing – A Very Short Introduction*. Oxford University Press. – ([Local](#))
 - [142] *Light and Vacuum*. 2. Edition. World Scientific, 2017. – ([Local](#))
 - [143] NISSEN-MEYER, Johannes: *Zur Begründung des Bornschen statistischen Gesetzes*. München, Ludwig-Maximilians-Universität, Bachelorarbeit, 2009. – ([Local](#))
 - [144] BOPP, Fritz: Quantenmechanische und stochastische Prozesse. In: *Zeitschrift für Naturforschung* 10a (1955), S. 789–793. – ([Local](#))
 - [145] BOPP, Fritz: Elementarvorgänge der Quantenmechanik in stochastischer Sicht. In: *Annalen der Physik* 17 (1966), Nr. 7-8, S. 407–414. – ([Local](#))
 - [146] HORNER, Heinz: *Stochastische Dynamik klassischer und quantenmechanischer Systeme, WS 1994/95*. Skript, 2002. – ([Local](#)) **21-2**
 - [147] H., Fichtner: *Manuskript zur Vorlesung Grundlagen der Quantenmechanik und Statistik*. Skript, 2013. – ([Local](#)) **21-2**
 - [148] PIVATO, Marcus: *Stochastic Processes and Stochastic Integration*. 1999. – ([Local](#)) **21-2**
 - [149] REICHL, Linda E.: *A Modern Course in Statistical Physics*. Wiley-VCH, 2016. – ([Local](#))
 - [150] MILONNI, Peter W.: *An Introduction to quantum optics and quantum fluctuations*. Oxford Graduate Texts, 2019. – ([Local](#))
 - [151] JONA-LASINIO, G.: Stochastic processes and quantum mechanics. In: *Astérisque, tome 132* (1985), S. 203–216. – ([Local](#)), ([Link](#))
 - [152] MEIS, Constantin: *Light and Vacuum. The Wave-Particle Nature of the Light and the Quantum Vacuum through the Coupling of Electromagnetic Theory and Quantum Electrodynamics*. World Scientific, 2015. – ([Local](#))
 - [153] FLEMING, Ray: *The 100 Greatest Lies in Physics*. 2017. – ([Local](#))

-
- [154] MACDONALD, D. K. C.: *Noise and Fluctuations*. John Wiley & Sons, 1962. – ([Local](#))
 - [155] SIDHARTH, B.G.: *The Universe of Fluctuations*. Springer, 2005. – ([Local](#))
 - [156] PAPOULIS, Athanasios ; PILLAI, S. U.: *Probability, Random Variables and Stochastic Processes*. McGraw-Hill, 2002. – ([Local](#))
 - [157] KNILL, Oliver: *Probability Theory and Stochastic Processes with Applications*. Overseas Press, 2009. – ([Local](#))
 - [158] MICHEAS, Athanasios C.: *Theory of stochastic objects probability, stochastic processes, and inference*. CRC Press, 2018. – ([Local](#))
 - [159] ARULDHAS, G.: *Quantum Mechanics 500 Problems with Solutions*. PHI Learning, 2011. – ([Local](#))
 - [160] HUANG, Kerson: *Introduction to Statistical Physics, Second Edition*. CRC Press, 2010. – ([Local](#))
 - [161] JAMMER, Max: *The Philosophy Of Quantum Mechanics The Interpretations Of Quantum Mechanics In Historical Perspective*. John Wiley & Sons, 1974. – ([Local](#))
 - [162] LONGAIR, Malcolm: *Quantum Concepts in Physics An Alternative Approach to the Understanding of Quantum Mechanics*. Cambridge Books, 2013. – ([Local](#))
 - [163] PHILLIPS, A. C.: *Introduction to Quantum Mechanics*. Wiley, 2003. – ([Local](#))
 - [164] SHANKAR, R.: *Principles of Quantum Mechanics*. Plenum Press, 1994. – ([Local](#))
 - [165] FANO, Guido ; M., Blinder S.: *Twenty-First Century Quantum Mechanics Hilbert Space to Quantum Computers Mathematical Methods and Conceptual Foundations*. Springer, 2017. – ([Local](#))
 - [166] MILLER, David A. B.: *Quantum Mechanics for Scientists and Engineers*. Cambridge University Press, 2008. – ([Local](#))
 - [167] SUESKIND, Leonard ; FRIEDMANN, Art: *Quantum mechanics. The theoretical minimum*. Basic Books, 2014. – ([Local](#))
 - [168] BES, Daniel R.: *Quantum Mechanics A Modern and Concise Introductory Course*. Springer, 2012. – ([Local](#))
 - [169] NASSAR, Antonio ; MIRET-ARTÉS, Salvador: *Bohmian Mechanics, Open Quantum Systems and Continuous Measurements*. Springer, 2017. – ([Local](#))
 - [170] MASUJIMA, Michio: *Path Integral Quantization and Stochastic Quantization*. Springer, 2009. – ([Local](#))

-
- [171] KLIEMANN, Wolfgang ; NAMACHCHIVAYA, N. S.: *Nonlinear dynamics and stochastic mechanics*. CRC Press, 2018. – ([Local](#))
 - [172] CHAICHIAN, M. ; A., Demichev: *Path Integrals in Physics. Stochastic Process & Quantum Mechanics*. Bristol and Philadelphia : Institut of Physics Publishing, 2001. – ([Local](#))
 - [173] PAUL, Wolfgang ; BASCHNAGEL, Jörg: *Stochastic Processes – From Physics to Finance*. Springer, 2013. – ([Local](#))
 - [174] DÜRR, Detlef ; FROEMEL, Anne ; KOLB, Martin: *Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie als Theorie der Typizität Mit einer Analyse des Zufalls in Thermodynamik und Quantenmechanik*. Springer Spektrum, 2017. – ([Local](#))
 - [175] BRANDT, Siegmund ; DAHMEN, Hans D.: *Quantenmechanik in Bildern: Eine Einführung mit vielen Computergrafiken*. Springer Spektrum, 2015. – ([Local](#))
 - [176] DÜRR, Detlef ; LAZAROVICI, Dustin: *Verständliche Quantenmechanik: Drei mögliche Weltbilder der Quantenphysik*. Springer Spektrum, 2008. – ([Local](#))
 - [177] GYTHIEL, Anthony: *An Introduction to Stochastic Processes in Physics*. The Johns Hopkins University Press, 2002. – ([Local](#))
 - [178] HEILBRON, John L. ; OSEEN, W. ; ALLY ; FRANK, Philipp: The Earliest Missionaries of the Copenhagen Spirit. In: ULLMANN-MARGALIT, E. (Hrsg.): *Science in Reflection*, S. 201–233,. – He understood Bohr to mean that complementarity characterized measuring procedures, not the things measured. Bohr acknowledged that that was indeed what he had had in mind. [3-15](#)
 - [179] HEISENBERG, W. ; PAULI, W. (Hrsg.): *The Development of the Interpretation of the Quantum Theory*
 - [180] BOHR, Niels: *Quantum Physics and Philosophy—Causality and Complementarity, Essays 1958-1962 on Atomic Physics and Human Knowledge* [3-15](#)
 - [181] ELITZUR, Avshalom C. ; COHEN, Eliah ; OKAMOTO, Ryo ; TAKEUCHI, Shigeki: Non-local Position Changes of a Photon Revealed by Quantum Routers. In: *Scientific Reports* 8, Nr. 1, 7730. <http://dx.doi.org/10.1038/s41598-018-26018-y..> – DOI 10.1038/s41598-018-26018-y.. – arXiv:1707.09483.
 - [182] MARTIN-DUSSAUD, P. ; ROVELLI, C. ; ZALAMEA, F.: The Notion of Locality in Relational Quantum Mechanics. In: *Foundations of Physics* 49, Nr. 2, S. 96–106. <http://dx.doi.org/arXiv:1806.08150..> – DOI arXiv:1806.08150.
 - [183] SMERLAK, Matteo ; ROVELLI, Carlo: Relational EPR. In: *ISSN 0015-9018* 37, Nr. 3, S. 427–445. <http://dx.doi.org/10.1007/s10701-007-9105-0..> – DOI 10.1007/s10701-007-9105-0.

- [184] ASCHENBACH, Jutta: *Korpuskularstatistische Begründung der Quantenmechanik*, TU Clausthal, Staatsexamenarbeit, 1978. – (Local) 2-4, 3-21, 17-1
- [185] LUDWIG, G.: *Einführung in die Grundlagen der Theoretischen Physik*. Bd. Band 3: Quantentheorie. Vieweg, Braunschweig, 1976. – 82 S.
- [186] DIRAC, P. A.: *The Principles of Quantum Mechanics*. Bd. 36. 4. Aufl. Oxford Press 1958, 1958
- [187] WEIZSÄCKER, C. von: *Zum Weltbild der Physik*. 2. Aufl. Hirzel, Leipzig, 1944. – 30–31 S.
- [188] FRANZ, W.: *Quantentheorie*. Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1970
- [189] SCHRÖDINGER, E.: In: *Sitzungsber. Preuß. Akad. Wissensch., Phys.-Mathem. Abt. 24* 24 (1930), Nr. 418-431 3-22
- [190] SCHRODINGER, E.: Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik. In: *Naturwissenschaften*. 23 : pp. 807-812; 823-823, 844-849. (1935). English translation: John D. Trimmer, *Proceedings of the American Philosophical Society* 23 (1935), Nr. 124, S. 807–812; 20-7
- [191] MESSIAH, A.: *Quantum Mechanics*. Bd. II. North Holland, Amsterdam, 1962. – 950 ff. S. 3-22
- [192] FÜRTH, R.: In: *Z. für Physik* 81 (1933), 143 S. – (link), (Local), (Local) 3-22
- [193] FEYNMAN, R. P.: In: *Rev. Mod. Phys.* 20 (1948), 367–387 S. – (abstract) 3-22
- [194] WEIZEL, W.: In: *Z. für Physik* 134 (1953), 264–285 S. 3-22, 21-1
- [195] WEIZEL, W.: In: *Z. für Physik* 135 (1954), Nr. 3, 270–273 S. 3-22
- [196] WEIZEL, Walter: Ableitung der quantenmechanischen Wellengleichung des Mehrteilchensystems aus einem klassischen Modell. In: *Zeitschrift für Physik* 136 (1953), Oct, Nr. 5, 582–604. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01338947>. – DOI 10.1007/BF01338947. – ISSN 0044-3328 3-22
- [197] FÊNYES, I.: In: *Z. für Physik* 132 (1952), 81 S. 3-22
- [198] BOHM, D.: In: *Phys. Rev.* 85 (1952), 166 –180 S. 3-24
- [199] BOHM, D.: In: *Phys. Rev.* 85 (1952), Nr. 2, 180–193 S.
- [200] BOHM, D. ; VIGIER, J. P.: In: *Phys. Rev.* 96 (1954), 208–216 S. 3-24, 21-1
- [201] BROGLIE, L. de: *The Current Interpretation of Wave Mechanics: a Critical Study*. Elsevier, 1964 3-24

-
- [202] LANDÈ, A.: *New Foundations of Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 1965
3-24
- [203] COMISAR, G. G.: In: *Phys. Rev. B* 138 (1965), 1332 S. 3-24
- [204] SANTOS, E.: In: *Nuovo Cimento* 59b (1969), 65 S. 3-24
- [205] PEÑA-AUERBACH, L. de l.: In: *J. Math. Phys.* 10 (1969), 1620 S. 3-24
- [206] PEÑA-AUERBACH, L. de l.: *J. Math. Phys.* 12, 453 (1971). (1971)
- [207] BOPP, F.: In: *Z. Naturforschung* 9a (1954), 479 S. 3-24
- [208] H., Gebelein.: *Turbulenz*. Berlin : Springer, 1935. – 75 S. 5-23
- [209] SOMMERFELD, A.: *Vorlesungen über Theoretische Physik, Bd. II: Mechanik der deformierbaren Medien*. 6. Leipzig : Akadem. Verlagsges., 1970. – 115 ff. S. 5-31
- [210] RAHMAN, A.: In: *Phys. Rev. A* 136 (1969), 405 S.
- [211] LANGEVIN, P.: In: *Compt. Rend.* 146 (1908), 530 S.
- [212] EINSTEIN, Albert: In: *Ann. Phys.* 17 (1905), 549 S. 5-10
- [213] FOKKER, A. ; PLANCK, M.: In: *Ann. d. Physik* 104 (1914), 312 S. 5-14
- [214] FOKKER, A. ; PLANCK, M.: In: *Sitz. der Preuss. Akad.* (1917), 324 S.
- [215] KOLMOGOROFF, A. N.: *Math. Ann.* 125, 415 (1931). (1931) 5-14
- [216] KRAMERS, H. A.: North Holland, Amsterdam, 1957
- [217] NEUMANN, J. von: Springer, Berlin, 1932 17-1
- [218] GOLDSTEIN, Sheldon: Stochastic Mechanics and Quantum Theory. In: *Journal of Statistical Physics* 47 (1987), Nr. 5/6, S. 645 ff.. – ([Local](#)) 2-2, 3-11, 3-18, 3-19, 5-1
- [219] BATANOV-GAUKHMAN, Mikhail: Development of the Stochastic Interpretation of Quantum Mechanics by E. Nelson. Derivation of the Schrödinger-Euler-Poisson Equations. In: *Recent Progress in Materials* 06 (2024), Juni, Nr. 02, 1–61. <http://dx.doi.org/10.21926/rpm.2402014>. – DOI 10.21926/rpm.2402014. – ISSN 2689–5846. – ([Link](#)), ([Local](#)) 17-22
- [220] NOACK, C.: Bemerkungen zur Quantentheorie des Bahndrehimpulses. In: *Physikalische Blätter* 41 (1985), S. 283 6-38
- [221] AERTS, Diederik (Hrsg.) ; RONDE, Christian de (Hrsg.) ; FREYTES, Hector (Hrsg.) ; AERTS, Sven (Hrsg.): *Probing the Meaning of Quantum Mechanics: Superpositions, Dynamics, Semantics and Identity*. New Jersey : World Scientific, 2016. – ([Local](#))

-
- [222] WILLIAMS, Angharad: *On Nelson's stochastic mechanics for a semiclassical parabolic state*, Swansea University, Diss., 2012. <http://cronfa.swan.ac.uk/Record/cronfa42359>. – (Local)
- [223] BAEZ, John C. ; BIAMONTE, Jacob D.: *Quantum Techniques in Stochastic Mechanics*. Singapore : World Scientific, 2018. <http://dx.doi.org/10.1142/10615>. <http://dx.doi.org/10.1142/10615>. – ISBN 9789813226937. – (Local)
- [224] BARONI, Stefano ; MORONI, Saverio: Reptation Quantum Monte Carlo: A round-trip tour from classical diffusion to quantum mechanics. In: *Physical Review E* 60 (1999), Nr. 1, 1–10. <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.60.1>. – (Local)
- [225] BECK, Christian ; MACKEY, Michael C.: Measurability of Vacuum Fluctuations and Dark Energy. In: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 379 (2007), 101–110. <http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2006.12.019>. – DOI 10.1016/j.physa.2006.12.019. – (Local)
- [226] BERCHE, B. ; CHATELAIN, C. ; DUFOUR, C. ; GOURIEUX, T. ; KAREVSKI, D.: Historical and interpretative aspects of quantum mechanics: a physicists' naive approach. In: *Condensed Matter Physics* 9 (2006), Nr. 2(46), S. 319–341. – (Local)
- [227] BURNS, Jean E.: Vacuum Radiation, Entropy and the Arrow of Time. In: AMOROSO, R. L. (Hrsg.) u. a.: *Gravitation and Cosmology: From the Hubble Radius to the Planck Scale*. Netherlands : Kluwer Academic Publishers, 2001, S. 491–498. – (Local)
- [228] CASATI, G. ; CHIRIKOV, B. V. ; IZRAELEV, F. M. ; FORD, Joseph: Stochastic Behavior of a Quantum Pendulum Under a Periodic Perturbation. In: *Physics Letters* (1978). – (Local)
- [229] COLE, Daniel C. ; RUEDA, Alfonso ; DANLEY, Konn: Stochastic Nonrelativistic Approach to Gravity as Originating from Vacuum Zero-Point Field Van der Waals Forces. In: *Physical Review A* 63 (2001), S. 054101. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.63.054101>. – DOI 10.1103/PhysRevA.63.054101. – (Local)
- [230] COLE, Daniel C.: Simulation Results Related to Stochastic Electrodynamics. In: *Journal of Applied Physics* (2006)
- [231] DAVIS, E. W. ; TEOFILIO, V. L. ; HAISCH, B. ; PUTHOFF, H. E. ; NICKISCH, L. J. ; RUEDA, A. ; COLE, D. C.: Review of Experimental Concepts for Studying the Quantum Vacuum Field. In: *Quantum Electrodynamics Journal* (2004). – (Local)
- [232] DEMELE, Fabian: *Analogie-Experimente zum Thema Quantenphysik in der Schule*. Stuttgart, Germany, Universität Stuttgart, Diss., 2016. – (Local)
- [233] DILLARD, Jackson: *Nonlocality in a Stochastic Approach to Quantum Mechanics and Quantum Field Theory*. Williamsburg, Virginia, USA, 2021. – (Local)

-
- [234] EVERTZ, H. G.: *Fortgeschrittene Quantenmechanik*. 2004. – (Local)
- [235] FILK, Thomas: *Grundlagen und Probleme der Quantenmechanik*. 1999-2008. – (Local)
- [236] GRANZOW, Claus M.: *Quantenstochastik: Ein Modellvergleich*. 1996 (Local)
- [237] GRÖSSING, Gerhard ; FUSSY, Siegfried ; PASCASIO, Johannes M. ; SCHWABL, Herbert: Vacuum Landscaping: Cause of Nonlocal Influences without Signaling. In: *Austrian Institute for Nonlinear Studies* (2018). – (Local)
- [238] HINTERHAUSER, Christopher: *Delta Phi B: Quantenphysik und Esoterik*. 2018. – (Local)
- [239] IBISON, Michael ; HAISCH, Bernhard: Quantum and classical statistics of the electromagnetic zero-point field. In: *Physical Review A* 54 (1996), October, Nr. 4. – (Local)
- [240] KLUS, Stefan ; NÜSKE, Feliks ; PEITZ, Sebastian: Koopman analysis of quantum systems. In: *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 55 (2022), Nr. 31, S. 314002. <http://dx.doi.org/10.1088/1751-8121/ac7d22>. – DOI 10.1088/1751-8121/ac7d22. – ISSN 1751-8121
- [241] KNILL, Oliver: *Probability and Stochastic Processes with Applications*. 2008. – (Local)
- [242] KUHN, Wilfried ; STRNAD, Janez: *Quantenfeldtheorie: Photonen und ihre Deutung*. Braunschweig/Wiesbaden : Friedr. Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft mbH, 1995. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-322-90949-7>. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-322-90949-7>. – ISBN 978-3-528-07275-9. – (Local)
- [243] KUIPERS, Folkert: Stochastic quantization of relativistic theories. In: *Journal of Mathematical Physics* 62 (2021), S. 122301. <http://dx.doi.org/10.1063/5.0057720>. – DOI 10.1063/5.0057720. – (Local)
- [244] KUIPERS, Folkert: *Spacetime Stochasticity and Second Order Geometry*. <https://arxiv.org/abs/2203.16399>. Version: 2022
- [245] KUIPERS, Folkert: Analytic continuation of stochastic mechanics. In: *Journal of Mathematical Physics* 63 (2022), April, Nr. 4. <http://dx.doi.org/10.1063/5.0073096>. – DOI 10.1063/5.0073096. – ISSN 1089-7658
- [246] KUIPERS, Folkert: Quantum Mechanics from Stochastic Processes. In: *The European Physical Journal Plus* 138 (2023), Juni, Nr. 6. <http://dx.doi.org/10.1140/epjp/s13360-023-04184-x>. – DOI 10.1140/epjp/s13360-023-04184-x. – ISSN 2190-5444. – (Local)
- [247] KUIPERS, Folkert: Stochastic Mechanics and the Unification of Quantum Mechanics with Brownian Motion. In: *SpringerBriefs in Physics* (2023), June 6. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-031-31448-3>. – DOI 10.1007/978-3-031-31448-3. – ISBN 9783031314483. – (Local)

-
- [248] MANSUY, Roger ; YOR, Marc: *Aspects of Brownian Motion*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008. – ISBN 978-3-540-22347-4. – ([Local](#))
- [249] MCCLENDON, Marvin ; RABITZ, Herschel: Numerical Simulations in Stochastic Mechanics. In: *Physical Review A* 37 (1988), Nr. 9, S. May 1. – ([Local](#))
- [250] N.N.: Deep Stochastic Mechanics, 2024. – Under review as a conference paper at ICLR 2024
- [251] OHL, Thorsten: Feynman Diagrams for Beginners. In: *40th Herbstschule Maria Laach*. Maria Laach, Germany, 2008. – University of Würzburg
- [252] PAVON, Michele: A Footnote to Nelson's Interpretation of the Two-Slit Experiment. In: *Dedicated to Francesco Guerra's 60th birthday* (2008). – ([Local](#))
- [253] PAVON, Michele: Stochastic Mechanics and the Feynman Integral. In: *Nelson's stochastic mechanics framework* (2018). – ([Local](#))
- [254] PEÑA-AUERBACH, Luis de l.: Comparison between two formulations of stochastic quantum mechanics. In: *Revista Mexicana de Física* XVIII (1969). – ([Local](#))
- [255] PEÑA-AUERBACH, Luis de l.: New formulation of stochastic theory and quantum mechanics: The relativistic spinless particle. In: *Revista Mexicana de Física* 19 (1970), S. 133–145. – ([Local](#))
- [256] PEÑA, L. de l. ; CETTO, A. M.: The stochastic road to quantum mechanics: An experience. In: *Revista Mexicana de Física* 31 (1985), Nr. 4, S. 551–574. – ([Local](#))
- [257] PEÑA, L. de l. ; CETTO, A. M.: Contribution from stochastic electrodynamics to the understanding of quantum mechanics. In: *Revista Mexicana de Física* 37 (1991), Nr. Suplemento 1, S. 526–537. – ([Local](#))
- [258] PEÑA, L. de l. ; CETTO, A. M.: Contribution from stochastic electrodynamics to the understanding of quantum mechanics. In: *arXiv preprint quant-ph/0501011* (2005). <https://arxiv.org/pdf/quant-ph/0501011.pdf>. – ([Local](#))
- [259] PEÑA, Luis de l. ; CETTO, Ana M. ; VALDÉS HERNÁNDEZ, Andrea: *The Emerging Quantum: The Physics Behind Quantum Mechanics*. Cham, Heidelberg, New York, Dordrecht, London : Springer, 2015. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-07893-9>. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-07893-9>. – ISBN 978-3-319-07892-2. – Library of Congress Control Number: 2014941916
- [260] PEÑA, Luis de l. ; CETTO, Ana M. ; VALDÉS-HERNÁNDEZ, Andrea: Connecting Two Stochastic Theories That Lead to Quantum Mechanics. In: *Frontiers in Physics* 8 (2020), S. 162. <http://dx.doi.org/10.3389/fphy.2020.00162>. – DOI 10.3389/fphy.2020.00162. – ([Local](#))

-
- [261] SUZUKI, Yasuyuki ; VARGA, Kalman: *Lecture Notes in Physics*. Bd. 94: *Stochastic Variational Approach to Quantum Mechanical Few-Body Problems*. Berlin Heidelberg New York : Springer, 1998. – ISBN 3–540–65152–7. – ([Local](#))
 - [262] VIGIER, Jean-Pierre ; JEFFERS, Stanley (Hrsg.) ; LEHNERT, Bo (Hrsg.) ; ABRAMSON, Nils (Hrsg.) ; CHEBOTAREV, Lev (Hrsg.): *Jean-Pierre Vigier and the Stochastic Interpretation of Quantum Mechanics*. Montreal, Canada : Apeiron, 2000. – ISBN 0–9683689–5–6. – ([Local](#))
 - [263] MENDES, R. V.: Stochastic Mechanics, Non-Local Potentials and Jump Processes. In: *Physics Letters* 113A (1985), Nr. 4. – ([Local](#))
 - [264] ZINKERNAGEL, Henrik: Niels Bohr on the wave function and the classical/quantum divide. In: *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 53 (2016), S. 9–19. <http://dx.doi.org/10.1016/j.shpsb.2015.11.001>. – DOI 10.1016/j.shpsb.2015.11.001. – ([Local](#)) 3-15
 - [265] GAMBETTA, Jay M.: *Non-Markovian Stochastic Schrödinger Equations and Interpretations of Quantum Mechanics*, Griffith University, School of Science, PhD Thesis, September 2003. – ([Local](#))
 - [266] ALBEVERIO, S. ; BLANCHARD, Ph. ; COMBE, Ph. ; RODRIGUEZ, R. ; SIRUGOE, M. ; SIRUGUE-COLLIN, M.: Trapping in Stochastic Mechanics and Applications to Covers of Clouds and Radiation Belts Centre de Physique Théorique CNRS - Luminy - Case 907, F-13288 MARSEILLE CEDEX 9 (France). – Invited Talk at the 2nd Workshop on Quantum Probability Applications, 1-5 October 1984, Heidelberg (R.F.A.)
 - [267] BASS, Robert W.: Evidence of an Electrostatic Mach's Principle? . – ([Local](#))
 - [268] BATANOV-GAUKHMAN, Mikhail: Stochastic interpretation of QM: Development of a Stochastic Interpretation of Quantum Mechanics. In: *Schrödinger-Euler-Poisson Equations* (2020). – ([Local](#))
 - [269] DUNKEL, Jörn ; HILBERT, Stefan ; HÄNGGI, Peter: Langevin-Gleichungen mit nichtlinearer Reibung. . – ([Local](#))
 - [270] GOKLER, Can: Quantum behavior of a classical particle subject to a random force. (2020). – ([Local](#))
 - [271] KISHI, Yoshio ; UMEHARA, SeiIchiro: Alternative method to solve the Schrödinger equation and its solution. . – ([Local](#))
 - [272] KOBRYN, A. E. ; HAYASHI, T. ; ARIMITSU, T.: Quantum stochastic processes: boson and fermion Brownian motion. In: *Condensed Matter Physics* 6 (2003), Nr. 4(36), S. 637–646. – ([Local](#))

-
- [273] NAWA, Hayato: Nelson Diffusions and Nonlinear Schrödinger equations (Nelson Schrödinger). (2013). – ([Local](#))
 - [274] NELSON, Edward: *Stochastic Mechanics of Particles and Fields*. Department of Mathematics, Princeton University. – ([Local](#))
 - [275] KIUKAS, J. ; WERNER, R. F.: Maximal Violation of Bell Inequalities by Position Measurements. In: *Journal of Mathematical Physics* 51 (2010), Nr. 072105. <http://dx.doi.org/10.1063/1.3447736>. – DOI 10.1063/1.3447736. – ([Local](#))
 - [276] POPE, D. T. ; DRUMMOND, P. D. ; MUNRO, W. J.: Disagreement Between Correlations of Quantum Mechanics and Stochastic Electrodynamics in the Damped Parametric Oscillator. In: *Physical Review A* 62 (2000), Nr. 042108. – ([Local](#)), ([Local](#))
 - [277] STREATER, Ray: *Lost Causes in and Beyond Physics*. King's College London : Springer, 2007. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-36582-2>. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-36582-2>. – ([Local](#)) 21-1
 - [278] WALLSTROM, Timothy C.: Inequivalence Between the Schrödinger Equation and the Madelung Hydrodynamic Equations. In: *Physical Review A* 49 (1994), Nr. 1613-1617. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.49.1613>. – DOI 10.1103/PhysRevA.49.1613. – ([Local](#)) 21-1
 - [279] EXNER, P. ; TRUMAN, A.: Models of K-Capture Decay: Stochastic vs. Quantum Mechanics. In: *Theory Division, Nuclear Physics Institute, CSAS*. – ([Local](#))
 - [280] SCHULZ, Benjamin: A New Look at Bell's Inequalities and Nelson's Theorem. In: *arXiv* (2009), September 6. – ([Local](#))
 - [281] BEYER, Michael ; PAUL, Wolfgang: Stern–Gerlach, EPRB and Bell Inequalities: An Analysis Using the Quantum Hamilton Equations of Stochastic Mechanics. In: *Foundations of Physics* 54 (2024), Nr. 20. <http://dx.doi.org/10.1007/s10701-024-00752-y>. – DOI 10.1007/s10701-024-00752-y. – ([Local](#))
 - [282] CHATURVEDI, S. ; DRUMMOND, Peter D.: Macroscopic Test of Quantum Mechanics Versus Stochastic Electrodynamics. In: *Physical Review A* 55 (1997), Nr. 2, S. n/a. – ([Local](#))
 - [283] KRACKLAUER, A. F.: Second Entanglement and (Re)Born Wave Functions in Stochastic Electrodynamics. In: *Quantum Theory: Reconsideration of Foundations-3, Proceedings* Bd. AIP Conference Proceedings 810. Växjö, Sweden : American Institute of Physics, January 15 2006, S. 343–352. – ([Local](#))
 - [284] WIESNER, Hartmut ; MÜLLER, Rainer: Stabilität und Spektrum der Atome. . – ([Local](#))

-
- [285] GENOVESE, Marco: Research on hidden variable theories: A review of recent progresses. In: *Physics Reports* 413 (2005), 319–396. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0370157305000823>. – (Local)
 - [286] DE MUYNCK, Willem M.: Interpretations of quantum mechanics, and interpretations of violation of Bell's inequality. In: *Preprint on arXiv* (2001). <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0102066>. – (Local)
 - [287] MURALIDHAR, K.: Classical Origin of Quantum Spin. In: *Apeiron* 18 (2011), April, Nr. 2, 146. <https://www.apeiron-journal.org>. – (Local)
 - [288] BLASONE, M. ; SRIVASTAVA, Y. N. ; VITIELLO, G. ; WIDOM, A.: Phase Coherence in Quantum Brownian Motion. In: *Annals of Physics* 267 (1998), S. 61–74. – Article No. PH985811, Received August 4, 1997
 - [289] BRODY, T. A.: The double slit revisited. In: *Revista Mexicana de Física* 35 (1989), Nr. Suplemento, S. 51–518. – (Local)
 - [290] GRÖSSING, Gerhard ; FUSSY, Siegfried ; MESA PASCASIO, Johannes ; SCHWABL, Herbert: Vacuum Landscaping: Cause of Nonlocal Influences without Signaling. In: *Entropy* 20 (2018), Nr. 6, S. 458. <http://dx.doi.org/10.3390/e20060458>. – DOI 10.3390/e20060458. – (Local)
 - [291] JIN, Fengping ; YUAN, Shengjun ; DE RAEDT, Hans ; MICHELSSEN, Kristel ; MIYASHITA, Seiji: Corpuscular Model of Two-Beam Interference and Double-Slit Experiments with Single Photons. In: *Journal of the Physical Society of Japan* 79 (2010), Nr. 7, S. 074401. – (Local)
 - [292] NITTA, Hideo ; KUDO, Tomoshige: The Time of Arrival of Electrons in the Double-Slit Experiment. In: *Physical Review A* 77 (2008), Nr. 1, 014102-1–014102-4. <http://hdl.handle.net/2309/90487>. – (Local)
 - [293] RAFSANJANI, Ali A. ; KAZEMI, MohammadJavad ; BAHRAMPOUR, Alireza ; GOLSHANI, Mehdi: Can the double-slit experiment distinguish between quantum interpretations? In: *Communications Physics* 6 (2023), S. 195. <http://dx.doi.org/10.1038/s42005-023-01315-9>. – DOI 10.1038/s42005-023-01315-9. – (Local)
 - [294] ZECCA, Antonio: Double Slit Diffraction Pattern of Gaussian Wave Packet Interacting with the Wall. In: *Advances in Studies in Theoretical Physics* 1 (2007), Nr. 11, S. 539–547. – (Local)
 - [295] ZECCA, Antonio: Contribution of Particle-Wall Interaction to Double Slit Diffraction Pattern. In: *Advances in Studies in Theoretical Physics* 2 (2008), Nr. 8, S. 385–392. – (Local)
 - [296] DANENHOWER, Peter: There a connection between Planck's constant, Boltzmann's constant and the speed of light? In: *B.Sc. (Hons. First Class)* (1977). – (Local)

- [297] COLE, Daniel C.: Simulation Results Related to Stochastic Electrodynamics. In: *AIP Conference Proceedings* Bd. 810. Brookline, MA, USA : American Institute of Physics, 2005, 99–105. – ([Local](#))
- [298] CAROSSO, Andrea: Simulating Nelsonian Quantum Field Theory. In: *Foundations of Physics* 54 (2024), Nr. 3, 30. <http://dx.doi.org/10.1007/s10701-024-00612-3>. – DOI 10.1007/s10701-024-00612-3. – ISSN 1572-9516. – ([Local](#)) , ([Link](#))
- [299] CAVALLERI, G. ; BARBERO, F. ; BERTAZZI, G. ; CESARONI, E. ; TONNI, E. ; BOSI, L. ; SPAVIERI, G. ; GILLIES, G. T.: A quantitative assessment of stochastic electrodynamics with spin (SEDS): Physical principles and novel applications. In: *Frontiers of Physics in China* 5 (2010), Nr. 1, S. 107–122. – ([Local](#))
- [300] CAMPARO, J. C.: Semiclassical random electrodynamics: Spontaneous emission and the Lamb shift / The Aerospace Corporation. 1999 (SMC-TR-99-12). – Forschungsbericht. – ([Local](#))
- [301] RODRÍGUEZ, David: Orbital stability and the quantum atomic spectrum from stochastic electrodynamics. In: *arXiv preprint arXiv:1105.3182* (2011). – ([Local](#))
- [302] FRANÇA, H. M. ; GOMES, G. G. ; PARRA, R. L.: Stochastische Elektrodynamik. In: *Brazilian Journal of Physics* 37 (2007), March, Nr. 1, 13. <https://journals.scholarsportal.info/browse/01039733/v41i4-6?lang=en>. – ISSN 0103-9733. – ([Local](#))
- [303] HARA, Koh'ichiro ; OHBA, Ichiro: Tunneling Time Distribution by means of Nelson's Quantum Mechanics and Wave-Particle Duality. In: *arXiv preprint arXiv:quant-ph/0210119v3* (2003), February. – ([Link](#)) ([Local](#))
- [304] OHBA, Ichiro ; YAMANAKA, Yoshiya: Tunneling time and Nelson's Quantum Mechanics. In: *ResearchGate* (1997). – ([Link](#)) ([Local](#))
- [305] WICK, D.: *The Infamous Boundary*. Boston : Birkhäuser, 1995
- [306] BOHM, D.: *Wholeness and the Implicate Order*. London : Routledge Kegan Paul, 1980. – 84 S.
- [307] GOLDSTEIN, S.: In: *Phys. Today* 51 (1998), Nr. March, 42 S.
- [308] BROGLIE, L. de: In: *Comptes Rendus* 177 (1923), 507, 548, 630 S.
- [309] SCHRÖDINGER, E.: In: *Ann. d. Phys.* 79 (1926), 361–376 S.
- [310] BELL, J. S.: in Sixty-Two Years of Uncertainty. New York : Plenum, 1989, S. 17
- [311] HEISENBERG, W.: *Physics and Beyond*. New York : Harper and Row, 1971. – 62 S.

- [312] HEISENBERG, W.: *Physics and Philosophy*. New York : Harper and Row, 1958. – 129 S.
- [313] HEISENBERG, W.: *The Physicist's Conception of Nature*. New York : Harcourt Brace, 1958. – 15 S.
- [314] BESS, L.: In: *Prog. Theor. Phys.* 49 (1973), Nr. 6, 1889–1910 S.
- [315] PUTHOFF, H. E.: In: *Phys. Rev. A* 40 (1989), 4857–4862 S.
- [316] BOYER, H. E.: In: *Scientific American* 253 (1985), August, Nr. 2, 70–78 S.
- [317] CALOGERO, F.: In: *Phys. Lett. A* 228 (1997), 335–346 S.
- [318] CARATI, A. ; GALGANI, L.: In: *Nuovo Cimento B* 114 (1999), 489–500 S.
- [319] EIBENBERGER, S. ; GERLICH, S. ; ARNDT, M. ; MAYOR, M. ; TÜXEN, T.: In: *Phys. Chem. Chem. Phys.* 15 (2013), 14696 S.
- [320] BALLENTINE, L. E.: In: *Rev. Mod. Phys.* 42 (1970), 358–381 S.
- [321] GEBELEIN, H.: *Turbulenz*. Berlin : Springer, 1935. – 75 S.
- [322] BORN, M. ; JORDAN, P.: *Elementare Quantenmechanik*. Berlin : Springer, 1930. – 32 S.
- [323] MULLIKEN, R. S.: In: *Nature* 114 (1924), 349 S.
- [324] CLUSIUS, K.: In: *Die Chemie* 56 (1942), 241–247 S. **17-18**
- [325] HEISENBERG, W.: In: *Z. Physik* 43 (1927), 172 S.
- [326] FOWLER, R. H. ; NORDHEIM, L.: In: *Proc. Roy. Soc. Series A* 119 (1928), Nr. 781, 173 S.
- [327] EINSTEIN, A.: In: *Ann. d. Physik* 17 (1905), 132 S.
- [328] EINSTEIN, A.: In: *Ann. d. Physik* 17 (1905), 549–560 S.
- [329] EINSTEIN, A.: In: *Ann. Phys.* 19 (1906), 371–381 S.
- [330] BROGLIE, L. de: *Une Tentative d'Interprétation Causale et Non-Linéaire de la Mécanique Ondulatoire*. Paris : Gauthier-Villars, 1956
- [331] MIELNIK, B. ; TENGSTRAND, G.: In: *Intern. J. Theor. Phys.* 19 (1980), 239–250 S.
- [332] BADUREK, G. ; RAUCH, H. ; TUPPINGER, D.: In: *Phys. Rev. A* 34 (1986), 2600–2608 S.
- [333] THOMSON, W.: In: *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh* VI (1867), 94–105 S.
- [334] MADELUNG, E.: In: *Z. Physik* 40 (1926), Nr. 3-4, 322–326 S.

-
- [335] HEISENBERG, W.: In: *Z. Physik* 43 (1927), Nr. 3-4, 172–198 S.
 - [336] BELL, J.: In: *Physics World* 3 (1990), August, 33–40 S.
 - [337] WIGNER, E. P.: Quantum Theory of Measurement. Princeton, New Jersey : Princeton University Press, 1983, S. 267 17-36
 - [338] WIGNER, E. P.: Quantum Theory of Measurement. Princeton, New Jersey : Princeton University Press, 1983, S. 313
 - [339] WIGNER, E. P. ; WHEELER, J. A. (Hrsg.) ; ZUREK, W. H. (Hrsg.): *Quantum Theory of Measurement*. Princeton, New Jersey : Princeton University Press, 1983. – 292 S.
 - [340] EHRENFEST, P.: In: *Z. Physik* 45 (1927), Nr. 7-8, 455–457 S.
 - [341] GARBACZEWSKI, P.: *arXiv: cond-mat/0703147*. 2007
 - [342] SMOLUCHOWSKI, M. V.: In: *Ann. d. Physik* 21 (1906), 756–780 S.
 - [343] SMOLUCHOWSKI, M. V.: In: *Ann. d. Physik* 48 (1915), 1103–1112 S.
 - [344] SMOLUCHOWSKI, M. V.: *Abhandlungen über die Brownische Bewegung und verwandte Erscheinungen*. Leipzig : Akademische Verlagsgesellschaft, 1923
 - [345] NEUMANN, J. v.: *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. New York : Dover Publications, 1943
 - [346] BOHR, N.: In: *Phil. Mag.* 26 (1913), 1–25, 476–502, 857–875 S.
 - [347] NAGOURNEY, W. ; SANDBERG, J. ; DEHMELT, H.: In: *Phys. Rev. Lett.* 56 (1986), 2797–2799 S.
 - [348] MERMIN, N. D.: In: *Rev. Mod. Phys.* 65 (1993), 803–815 S.
 - [349] JAYNES, E. T. ; CUMMINGS, F.: In: *Proc. IEEE* 51 (1963), 89 S.
 - [350] CRISPY, M. D. ; JAYNES, E. T.: In: *Phys. Rev.* 179 (1969), 1253–1261 S.
 - [351] JAYNES, E. T.: In: *Phys. Rev. A* 2 (1970), 260–262 S.
 - [352] WEISSKOPF, V. ; WIGNER, E.: In: *Z. Physik* 63 (1930), 54–73 S.
 - [353] FERMI, E.: In: *Atti della Reale Accademia nazionale dei Lincei Rendiconti*. Classe di scienze fisiche, matematiche e naturali (1927), 795 S.
 - [354] EINSTEIN, A.: In: *Ann. Phys. (Germany)* 17 (1905), 132 S.
 - [355] LEWIS, G. N.: In: *Nature* (1926), December 18

-
- [356] EINSTEIN, A. ; PODOLSKY, B. ; ROSEN, N.: In: *Phys. Rev.* 47 (1935), 777–780 S.
 - [357] BOHM, D.: *Quantum Theory*. Englewood Cliffs, N.J. : Prentice Hall, 1951
 - [358] HARTLE, J. B. ; GELL-MANN, M.: in Complexity, Entropy and the Physics of Information. Redwood City, CA : Addison-Wesley, 1990
 - [359] KAMPEN, N. G.: In: *Physica A* 153 (1988), Nr. 1, 97–113 S.
 - [360] EISENSCHITZ, E. ; LONDON, F.: In: *Z. Physik* 60 (1930), 491–527 S.
 - [361] DZYALOSHINSKII, I. E. ; LIFSHITZ, E. M. ; PITAEVSKII, L. P.: In: *Soviet Physics, Usp* 4 (1961), Nr. 2, 153–176 S.
 - [362] FEIBELMAN, Peter J.: *Progr. Surf. Sci.*. Bd. 12. Pergamon Press Ltd., 1982. – 287–408 S.
 - [363] HULT, E. ; RYDBERG, H. ; LUNDQVIST, B. I. ; LANGRETH, D. C.: In: *Phys. Rev. B* 59 (1999), 4708–4713 S.
 - [364] KOHN, W. ; MEIR, Y. ; MAKAROV, D. E.: In: *Phys. Rev. Lett.* 80 (1998), 4153–4156 S.
 - [365] SMITHSONIAN: *Smithsonian Physical Tables*. 9th. unknown
 - [366] SCHRÖDINGER, E.: The present situation in quantum mechanics. In: WHEELER, J. A. (Hrsg.) ; ZUREK, W. H. (Hrsg.): *Quantum Theory and Measurement*. Princeton, N. J. : Princeton University Press, 1983, S. 152–167
 - [367] UHLENBECK, G. E. ; GOUDSMIT, S.: In: *Die Naturwissenschaften* 13 (1925), Nr. 47, 953–954 S.
 - [368] UHLENBECK, G. E. ; GOUDSMIT, S.: In: *Nature* 127 (1926), 264–265 S.
 - [369] PAULI, W.: Über ein Kriterium für Ein- oder Zweiwertigkeit der Eigenfunktionen in der Wellenmechanik. In: *Helv. Phys. Acta* 12 (1939), S. 147 **6-38**
 - [370] PAULI, W.: *Handbuch der Physik*. Bd. XXIV/1. 2. Aufl. Berlin : Springer, 1933. – 126 S.
 - [371] PAULI, W.: Zur Quantenmechanik des magnetischen Elektrons. In: *Z. Physik* 43 (1927), S. 601 **17-24**
 - [372] PAULI, W.: In: *Z. Physik* 31 (1925), 373–385 S.
 - [373] WAERDEN, B. L. d.: in *Theoretical Physics in the Twentieth Century. A Memorial Volume to Wolfgang Pauli*. New York : Interscience Publishers, 1960, S. 214
 - [374] LANDAU, L. D. ; LIFSHITZ, E. M.: *Quantum Mechanics (Non-relativistic Theory)*, Third Edition. New York : Pergamon, 1977. – 198 S.

-
- [375] OHANIAN, H. C.: In: *Am. J. Phys.* 54 (1986), Nr. 6, 500–505 S.
- [376] GORDON, W.: In: *Z. Phys.* 50 (1928), 630 S.
- [377] HESTENES, D.: In: *Am. J. Phys.* 47 (1979), 399 S.
- [378] HESTENES, D.: In: *Foundation of Physics* 20 (1980), 1213–1232 S.
- [379] WEIZSÄCKER, C. F.: *Zum Weltbild der Physik*. Leipzig : S. Hirzel, 1945. – 32 S.
- [380] DANKEL, T.: In: *Archiv. Rational Mech. Anal.* 37 (1971), 192–221 S.
- [381] DOHRN, D. ; GUERRA, F. ; RUGGIERO, P.: Feynman Path Integrals. In: ALBEVERIO, S. (Hrsg.): *Lecture Notes in Physics 106*. Heidelberg : Springer, 1979
- [382] GOLDSTEIN, H.: *Classical Mechanics*. 2nd. Reading, MA : Addison-Wesley, 1980. – 148–158 S.
- [383] SLICHTER, C. P.: *Principles of Magnetic Resonance*. 3rd. Berlin, Heidelberg : Springer, 1990
- [384] BLOCH, F.: In: *Phys. Rev.* 70 (1946), Nr. 7-8, 460–474 S.
- [385] RAUCH, H.: In: *Found. Phys.* 23 (1993), Nr. 1, 7–36 S.
- [386] WERNER, S. A. ; COLELLA, R. ; OVERHAUSER, A. W. ; EAGEN, C. F.: In: *Phys. Rev. Lett.* 35 (1975), Nr. 16, 1053–1055 S.
- [387] BELL, J.: In: *J. Phys. Colloques* 42 (1981), C2–41–C2–62 S.
- [388] STERN, Otto ; GERLACH, Walther: Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld. In: *Zeitschrift für Physik* 9 (1922), S. 349–352. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01326983>. – DOI 10.1007/BF01326983 17-34, 17-35, 17-46
- [389] GERLACH, W. ; STERN, O.: In: *Ann. d. Physik* 74 (1924), 673–699 S.
- [390] HOME, D. ; PAN, A. K. ; ALI, M. ; MAJUMDAR, A. S.: In: *Phys. Rev. A* 75 (2007), Nr. 4, 042110 S.
- [391] WREDE, E.: In: *Z. Physik* 41 (1927), 569–575 S.
- [392] MOTT, N. V. ; MASSEY, H. S. W.: Quantum theory and Measurement. In: WHEELER, J. A. (Hrsg.) ; ZUREK, W. H. (Hrsg.): *Quantum theory and Measurement*. Princeton, New Jersey : Princeton University Press, 1983, S. 703
- [393] LEU, A.: In: *Z. Physik* 41 (1927), 551–562 S.
- [394] PHIPPS, T. E. ; STERN, O.: In: *Z. Physik* 73 (1932), 185–191 S.

- [395] ROSEN, N. ; ZENER, C.: In: *Phys. Rev.* 40 (1932), Nr. 4, 502–507 S.
- [396] ENGLERT, B.-G. ; SCHWINGER, J. ; SCULLY, M. O.: In: *Found. Phys.* 18 (1988), Nr. 10, 1045–1056 S.
- [397] WHEELER, J. A. ; ZUREK, W. H.: *Quantum theory and measurement*. Princeton, New Jersey : Princeton University Press, 1983. – 699 S.
- [398] DIRAC, P. A. M.: Proc. Roy. Soc. (A). In: *Proc. Roy. Soc. (A)* 117 (1928), S. 610–624
- [399] LAMEHI-RACHTI, M. ; MITTIG, W.: Phys. Rev. D. In: *Phys. Rev. D* 14 (1976), S. 2543–2555
- [400] ASPECT, A. ; GRANGIER, Ph. ; ROGER, G.: Phys. Rev. Lett. In: *Phys. Rev. Lett.* 49 (1982), Nr. 1, S. 91
- [401] BELL, J. S.: Physics (N.Y.). In: *Physics (N.Y.)* 1 (1965), Nr. 3, S. 195–200
- [402] KOCHEN, S. ; SPECKER, E. P.: In: *J. Math. Mech.* 17 (1967), 59–87 S.
- [403] PLANCK, M.: In: *Sitz. der preuß. Akademie* (1917), 324 S.
- [404] KOLMOGOROV, A. N.: In: *Math. Ann.* 104 (1931), 415 S.
- [405] GUERRA, F. ; MORATO, L. M.: In: *Phys. Rev. D* 27 (1983), 1774–1786 S. **21-1**
- [406] BAUBLITZ, M.: In: *Prog. Theor. Phys.* 80 (1988), Nr. 2, 232–244 S. **21-1**
- [407] PEÑA, L. de l. ; CETTO, A. H.: *The quantum dice - An introduction to stochastic electrodynamics*. Dordrecht : Kluwer, 1996
- [408] WANG, Xiao-Song: *arXiv:physics/0610224v3*. Apr. 2014 **21-1**
- [409] GRÖSSING, G.: In: *Phys. Lett. A* 372 (2008), 4556–4563 S. **21-1**
- [410] GRÖSSING, G.: In: *Physica A* 388 (2009), 811–823 S. **21-1**
- [411] ANTONAKOS, Charalampos: *The Quantum Wave Function as a Complex Probability Distribution*. <https://arxiv.org/abs/2502.10523>. Version: 2025
- [412] MACKAY, Noah M.: *The Statistical Mechanics of Hawking Radiation*. <https://arxiv.org/abs/2502.08816>. Version: 2025
- [413] CAI, Yifan ; WANG, Tao ; ZHAO, Liu: Fluctuation theorems in general relativistic stochastic thermodynamics. In: *Physical Review E* 111 (2025), Februar, Nr. 2. <http://dx.doi.org/10.1103/physreve.111.024102>. – DOI 10.1103/physreve.111.024102. – ISSN 2470-0053

-
- [414] CAI, Yifan ; WANG, Tao ; ZHAO, Liu: *General Relativistic Fluctuation Theorems*. <https://arxiv.org/abs/2407.09912>. Version: 2024
 - [415] BEUMEE, Johan ; RABITZ, Herschel: *Classical Elastic Two-Particle Collision Energy Conservation using Edward Nelson's Energy, Double Diffusion and Special Relativity*. <https://arxiv.org/abs/2212.02637>. Version: 2022
 - [416] ORLOVA, Elena ; USTIMENKO, Aleksei ; JIANG, Ruoxi ; LU, Peter Y. ; WILLETT, Rebecca: *Deep Stochastic Mechanics*. <https://arxiv.org/abs/2305.19685>. Version: 2024
 - [417] REDDINGER, Maik ; POIRIER, Bill: Towards a mathematical theory of the Madelung equations: Takabayasi's quantization condition, quantum quasi-irrotationality, weak formulations, and the Wallstrom phenomenon. In: *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 56 (2023), April, Nr. 19, 193001. <http://dx.doi.org/10.1088/1751-8121/acc7db>. – DOI 10.1088/1751-8121/acc7db. – ISSN 1751-8121
 - [418] VASTOLA, John J. ; HOLMES, William R.: *Stochastic path integrals can be derived like quantum mechanical path integrals*. <https://arxiv.org/abs/1909.12990>. Version: 2019
 - [419] CARRARA, Nicholas: *Quantum Trajectories in Entropic Dynamics*. <https://arxiv.org/abs/1907.00361>. Version: 2019
 - [420] GOLUBJEVA, O. N. ; SIDOROV, S. V.: *Quantum-thermal self-diffusion as a hydrodynamic mechanism for the fluctuation relaxation*. <https://arxiv.org/abs/1404.3071>. Version: 2014
 - [421] BAEZ, Jacob John C.and B. John C.and Biamonte: *Quantum Techniques for Stochastic Mechanics*. <https://arxiv.org/abs/1209.3632>. Version: 2019
 - [422] ANDRISANI, Andrea ; PETRONI, Nicola C.: Markov processes and generalized Schrödinger equations. In: *Journal of Mathematical Physics* 52 (2011), November, Nr. 11. <http://dx.doi.org/10.1063/1.3663205>. – DOI 10.1063/1.3663205. – ISSN 1089-7658
 - [423] RIGATOS, Gerasimos G.: *Spin-Orbit Interaction in particles' motion as a model of quantum computation*. <https://arxiv.org/abs/1102.2069>. Version: 2011
 - [424] TRIFONOV, D. A. ; NIKOLOV, B. A. ; MLADEV, I. M.: *On the Uncertainty Relations in Stochastic Mechanics*. <https://arxiv.org/abs/0902.3880>. Version: 2009
 - [425] *Annalen der Physik* 521 (2009), April, Nr. 4, 187–188 S. <http://dx.doi.org/10.1002/andp.20095210402>. – DOI 10.1002/andp.20095210402. – ISSN 1521-3889. – WITHDRAWN
 - [426] SCHULZ, Benjamin: *Reply to a comment of I. Schmelzer*. <https://arxiv.org/abs/0910.5660>. Version: 2013

-
- [427] SCHULZ, Benjamin: *Review of Nelson's analysis of Bell's theorem.* <https://arxiv.org/abs/1302.4180>. Version: 2014
- [428] DURRAN, Richard ; NEATE, Andrew ; TRUMAN, Aubrey: The divine clockwork: Bohr's correspondence principle and Nelson's stochastic mechanics for the atomic elliptic state. In: *Journal of Mathematical Physics* 49 (2008), März, Nr. 3. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2837434>. – DOI 10.1063/1.2837434. – ISSN 1089–7658
- [429] VOLCHENKOV, D. ; LIMA, R.: *Magnetohydrodynamics In The Context Of Nelson's Stochastic Mechanics.* <https://arxiv.org/abs/0710.4744>. Version: 2007
- [430] BEUMEE, Johan: *Energy and Momentum Conservation for Diffusion - A Stochastic Mechanics Approximation - Part I.* <https://arxiv.org/abs/math-ph/0610042>. Version: 2006
- [431] SMOLIN, Lee: *Could quantum mechanics be an approximation to another theory?* <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0609109>. Version: 2006
- [432] GALVAN, Bruno: *A Newtonian Hidden Variable Theory.* <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0406134>. Version: 2004
- [433] SHEMI-ZADEH, V. E.: *Does classical mechanics always adequately describe classical physical reality?* <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0206194>. Version: 2002
- [434] CORREGGI, M. ; MORCHIO, G.: Quantum Mechanics and Stochastic Mechanics for Compatible Observables at Different Times. In: *Annals of Physics* 296 (2002), März, Nr. 2, 371-389. <http://dx.doi.org/10.1006/aphy.2002.6236>. – DOI 10.1006/aphy.2002.6236. – ISSN 0003–4916
- [435] PAVON, Michele: Stochastic mechanics and the Feynman integral. In: *Journal of Mathematical Physics* 41 (2000), September, Nr. 9, 6060-6078. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1286880>. – DOI 10.1063/1.1286880. – ISSN 1089–7658
- [436] PELITI, Luca ; MURATORE-GINANNESCHI, Paolo: R. Fürth's 1933 paper "On certain relations between classical statistics and quantum mechanics" ["Über einige Beziehungen zwischen klassischer Statistik und Quantenmechanik", Zeitschrift für Physik, 81 143-162]. In: *The European Physical Journal H* 48 (2023), Mai, Nr. 1. <http://dx.doi.org/10.1140/epjh/s13129-023-00052-5>. – DOI 10.1140/epjh/s13129-023-00052-5. – ISSN 2102–6467
- [437] CHOW, Shui-Nee ; LI, Wuchen ; ZHOU, Haomin: *A discrete Schrodinger equation via optimal transport on graphs.* <https://arxiv.org/abs/1705.07583>. Version: 2017
- [438] AMMARI, Zied ; FALCONI, Marco: Bohr's Correspondence Principle for the Renormalized Nelson Model. In: *SIAM Journal on Mathematical Analysis* 49 (2017), Januar, Nr. 6, 5031–5095. <http://dx.doi.org/10.1137/17m1117598>. – DOI 10.1137/17m1117598. – ISSN 1095–7154

Stichwortverzeichnis

- Algorithmus, 19-2
- Analogrechner, 19-12
- Arithmetisches Mittel, 5-30
- Aufenthaltswahrscheinlichkeit, 3-3, 6-57
- Auswahlregel, 6-78, 6-92
- Bahnen
 - klassische, 6-55
- Balmer Serie, 6-81
- Balmer-Serie, 6-83
- Bohrscher Radius, 6-13, 17-12
- Bohrsches Magneton, 6-38, 7-2, 17-31
- Boltzmann-Konstante, 5-3
- Bornsche Reihe, 12-1
- Brackett-Serie, 6-83
- Brownsche Bewegung, 5-26
- Brownsche Schar, 5-26
- Casimir-Effekt, 14-4
- Cauchy-Verteilung, 15-25
- Delbrück-Streuung, 14-4
- Determinismus, 17-2
- Dipolübergänge, 6-78
- Dipolmoment, 6-63, 6-65, 6-66
- Dirac-Gleichung, 7-11
- Dirac-Gleichung, 7-15, 17-23, 17-25
- Dopplerverbreiterung, 6-78
- Drehimpuls, 6-39
- Drehimpulsoperator, 6-39
- Dubletts, 13-1
- Duhamel-Integral, 5-7
- Ehrenfest-Theorem, 5-36, 5-41, 5-42
- Eigenwert, 3-24
- Eigenzustand, 6-55
- Einstein-Podolsky-Rosen-Paradoxon, 17-34
- Einteilchenenergie, 8-2
- Einteilchensystem, 6-83
- Elektron, 17-25
- Elektronen
 - polarisierte, 7-15
- Elektronenspinresonanz, 17-33
- Elementarladung, 6-58
- Entartung, 6-33, 6-37, örpotential 9-1, 9-1
- Entartung (Quantenmechanik), 6-38
- Erwartungswert, 6-37
- Erwartungswert, 6-63, 15-16, 15-43
- Eulersche Winkel, 7-5
- Eulersche Zahl, 6-58
- Faxen-Holtsmark-Formel, 12-1
- Fokker-Planck-Gleichung, 5-11, 5-20
- Fourier-Transformation, 6-6
- Freier Wille, 17-2
- Gaußscher Integralsatz, 5-15, 5-39, 6-39
- Gesamtenergie, 8-2
- GHZ-Experiment, 17-1
- Greensche Formel, 5-39, 5-40
- Greensche-Funktion, 11-1
- Grover-Algorithmus, 19-2
- Grundzustand, 6-62
- Häufungspunkt, 15-15
- Hamiltonoperator, 6-61, 6-64
- Hartree-Fock-Verfahren, 8-2
- Hawking-Strahlung, 14-4
- Hermitescher Operator, 5-39, 5-41, 7-22
- Hertzscher Dipol, 6-68
- Impulsstromdichte, 6-38
- Indertimismus, 17-1
- Interpretation
 - Interpretation

- Bayessche Quantenwahrscheinlichkeit, 3-20
- Interpretation
 - Consistent histories, 3-19
 - Interpretation
 - de Broglie-Bohm-Theorie, 3-18
 - Interpretation
 - Ensemble, 3-17
 - Interpretation
 - Kopenhagener Deutung, 3-17
 - Interpretation
 - Many-minds, 3-19
 - Interpretation
 - Objective-collapse theory, 3-20
 - Interpretation
 - Quantenlogik, 3-18
 - Interpretation
 - Relational quantum mechanics, 3-20
 - Interpretation
 - Sonstige, 3-21
 - Interpretation
 - Sonstige, 3-21
 - Interpretation
 - Transactional, 3-20
 - Interpretation
 - Viele-Welten-, 3-18
- Ising-Modell, 19-7
- Keplerbahn, 6-58
- Kolmogoroffsche Differentialgleichung, 5-14
- Kommutator (Mathematik), 5-1
- Konvektions-Diffusions-Gleichung, 5-23
- Kugelflächenfunktionen, 6-28, 6-30, 6-32
- Kugelwellen, 12-1
- Lamb-Verschiebung, 14-4
- Landé-Faktor, 17-31
- Landé-Formel, 17-32
- Landau-Symbole, 19-2
- Langevin-Gleichung, 5-6
- Langevin-Gleichungen, 5-26
- Laplace-Operator, 5-14, 5-19
- Larmorpräzession, 17-33
- Legendre-Polynom, 6-22
- Linearkombination, 6-4, 6-64
- Linienbreite
 - natürliche, 6-78
- Linienbreite, 6-75, 6-78
- Lokalität, 19-3
- Lyman-Serie, 6-83
- Magnetfeld, 6-83
- Markow-Kette, 15-18
- Maxwell-Gleichungen, 6-68
- Mehrteilchensysteme, 8-1, 8-1, 8-1
- Messfehler, 15-3
- Messunsicherheit, 15-3
- Mittelwert, 15-16, 15-17
- mittlere quadratische Abweichung, 15-17
- Monte-Carlo-Simulation, 19-2
- Multiplizität, 17-24
- Näherungsverfahren, -Verfahren 8-1
- Nachwirkungsintegral, 5-8
- Natrium-D-Linie, 17-24
- Navier-Stokes-Gleichungen, 5-14, 5-18, 5-23, 5-29
- Newtonsche Gesetze, 5-23
- No-Cloning-Theorem, 19-11
- Normalverteilung, 15-8, 15-23, 15-24
- Nullpunktsenergie, 14-4
- Ontologie, 19-1, 19-3
- Ortsraum, 6-6
- Paschen-Back-Effekt, 13-1
- Paschen-Serie, 6-83
- Pauli-Gleichung
 - nichtrelativistisch, 7-9
- Pauli-Gleichung, 17-23
- Pauli-Matrizen, 7-9
- Pauli-Prinzip, 8-1
- Periodensystem, 11-1
- Periodensystem, 11-1
- Pfund-Serie, 6-83
- Phänomenologie (Methodik), 18-1
- Photoelektrischer Effekt, 7-15
- Pickery-Serie, 6-83
- Planck-Konstante, 5-32
- Poisson-Klammer, 5-1
- Poisson-Transformation, 6-69
- Poisson-Verteilung, 15-25
- Polarkoordinaten, 6-40
- Poyntingvektor, 6-70
- Quantenalgirthmus, 19-2
- Quantencomputing, 19-1

- Quantenelektrodynamik, 17-31
Quantenmechanik
 Geschichte, 4-1
 Quantenmechanik
 Interpretationen, 3-1
 Quantenmechanik
 Interpretationen, 3-6
 Korpuskularstatistische Deutung, 6-1
 Postulate, 6-1
 systematischer Aufbau, 6-1
Quantenmechanik, 3-5
Quantenverschränkung, 17-2, 19-3
Quantisierungsachse, 6-93
Qubit, 19-3

Rauschen, 5-15
Rayleigh-Streuung, 6-91
Ritz-Serie, 6-83
Rodrigues-Formel, 6-22
Rutherford-Formel, 12-2
Rydberg-Formel, 6-93

Satz von Bolzano-Weierstraß, 15-15
Satz von Stokes, 6-86
Scharmittel, 5-9
Scharnhorst-Effekt, 14-4
Schrödinger-Gleichung, 6-3, 6-12–6-14, 6-59, 6-92
Schrödingergleichung, 6-48, 6-64
Schrödingergleichung
 Impulsdarstellung, 6-10
 zeitabhängige, 5-26
Schwinger-Effekt, 14-4
Selbstadjungierter Operator, 5-41
Shor-Algorithmus, 19-2
Simulated Annealing, 19-6
Slater-Determinante, 8-1
Smoluchowski-Gleichung, 5-11
Spektrallinie, 6-75
Spektrallinien
 Klassifikation, 6-81
Spektren, 13-1
Spin, 17-23–17-25, 17-33
Spin-Bahnkopplung, 13-1
Spinmatrizen, 7-9
Spinor, 7-21
Spontane Emission, 6-74, 14-4
Störungstheorie, 9-1, Regel 9-1, ängig 9-1, 9-1
Stern-Gerlach-Versuch, 17-33

Stochastik, 15-13
Stochastik, 5-1, 15-18
Streuphasen, 12-1
Streupotential, 12-1
Streuung, 12-1
Superposition, 19-3

Taylor-Formel, 6-57
Taylor-Polynom, 5-19
thermodynamische Temperatur, 5-3
Thomas-Fermi-Dirac-Methode, 10-1
Tunneleffekt, 17-19
Turing-Vollständigkeit, 19-12

Unbestimmtheit, 3-3
Unruh-Effekt, 14-4

Vakuum, 6-62
Vakuumfluktuation, 6-1, 17-25
Vektorpotential, 6-68
Verborgene Variablen, 17-1
Victor J. Stenger, 20-2
Volumenkraft, 5-19

Wahrscheinlichkeit, 15-16
Wahrscheinlichkeitsdichte, 5-2, 15-17
Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, 3-4
Wahrscheinlichkeitsrechnung, 15-13
Wasserstoffatom, 6-13
 Energieniveaus, 6-30
 Entartung, 6-33
 gebundene Zustände, 6-13
 homogenes Magnetfeld, 6-91
 Linien, 6-81
Wasserstoffatom, 6-13, 6-62–6-65
Welle-Teilchen-Dualismus, 3-2–3-4
Wellenfunktion, 3-3, 3-4
Weyl-Gleichung, 7-21
Wiener-Chintschin-Theorem, 15-27
WKB-Näherung, 6-48

Yukawa-Potential, 12-2

Zeeman-Effekt, 13-1
 normaler, 6-91
Zeeman-Effekt, 17-24, 17-31
Zentralkraft, 6-40, 6-46
Zufall, 17-2

Zugeordnete Legendrepolynome, 6-23

Zustandsfunktion, 3-4

Zweikörperproblem, 6-29, 6-33

Offene Punkte

1	To Do (Link fehlt.)	3-2
2	To Do (Link fehlt.)	3-2
3	To Do (Link fehlt.)	3-2
4	To Do (Link fehlt.)	3-3
5	To Do (Abriss ist noch unvollständig.)	4-1
6	To Do (Fehler)	5-4
7	To Do (nächste Formel falsch)	5-7
8	To Do (Link überprüfen.)	5-14
9	To Do (Achtung mit e 3 16 vergleichen.)	5-21
10	To Do	5-25
11	To Do (Falsche Formel.)	5-29
12	To Do (Falsche Formel.)	5-29
13	To Do (Abbildung einfügen)	6-2
14	To Do (Abbildung einfügen)	6-6
15	To Do (Abbildung einfügen)	6-6
16	To Do (Abbildung einfügen)	6-27
17	To Do (Abbildung einfügen)	6-30
18	To Do (Abbildung einfügen)	6-41
19	To Do (Abbildung einfügen)	6-41
20	To Do (Abbildung einfügen)	6-45
21	To Do (Formel überprüfen)	6-50
22	To Do (Abbildung einfügen)	6-53
23	To Do (Abbildung einfügen)	6-54
24	To Do (Hier Abbildung einfügen.)	6-57
25	To Do (Formel einrahmen.)	6-60
26	To Do (Formel einrahmen.)	6-61
27	To Do (Text überprüfen.)	6-61
28	To Do (Formel falsch.)	6-63
29	To Do (Abbildung einfügen.)	6-64
30	To Do (Formel unvollständig.)	6-65
31	To Do (Formel überprüfen.)	6-66

32	To Do (Abbildung einfügen.)	6-66
33	To Do (Formel falsch.)	6-66
34	To Do (Anmerkung einfügen.)	6-67
35	To Do (Bearbeiten.)	6-68
36	To Do (Doppelungen korrigieren.)	6-71
37	To Do (Doppelungen korrigieren.)	6-72
38	To Do (Hier fehlt noch was.)	6-73
39	To Do (Hier fehlt noch was.)	6-75
40	To Do (Formel überprüfen)	6-77
41	To Do (Abbildung fehlt.)	6-77
42	To Do (Hier fehlt noch etwas.)	6-78
43	To Do (Abschnitt überarbeiten)	6-78
44	To Do (Formel falsch)	6-90
45	To Do (Formel falsch)	6-90
46	To Do (Abbildung fehlt)	6-92
47	To Do (Fehlender Text)	6-93
48	To Do (Abbildungen fehlen.)	6-94
49	To Do (Abbildung fehlt)	6-95
50	To Do (Abbildung fehlt)	7-3
51	To Do (Formel falsch)	7-7
52	To Do (Formel falsch)	7-11
53	To Do (Formel falsch)	7-12
54	To Do (Abbildung fehlt)	7-15
55	To Do (Text überprüfen)	7-15
56	To Do (Formel falsch)	7-22
57	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	8-1
58	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	8-1
59	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	8-1
60	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	8-1
61	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	8-1
62	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	8-1
63	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	8-2
64	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	8-2
65	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	8-2
66	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	9-1
67	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	9-1
68	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	9-1
69	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	9-1
70	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	9-1

71	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	9-1
72	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	10-1
73	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	10-1
74	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	11-1
75	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	11-1
76	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	11-1
77	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	12-1
78	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	12-1
79	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	12-1
80	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	12-1
81	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	12-1
82	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	12-1
83	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	12-2
84	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	13-1
85	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	13-1
86	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	13-1
87	To Do (Kapitel / Section fehlt noch.)	13-1
88	To Do (In seperates Kapitel im Anhang schieben.)	15-13
89	To Do (Formel falsch)	15-14
90	To Do (Hier fehlt noch etwas)	15-26
91	To Do (Formel überprüfen)	15-28
92	To Do (Formel überprüfen)	15-29
93	To Do (Formel überprüfen)	15-29
94	To Do (Abbildung fehlt)	15-31
95	To Do (Formel überprüfen)	15-33
96	To Do (Formel überprüfen)	15-34

