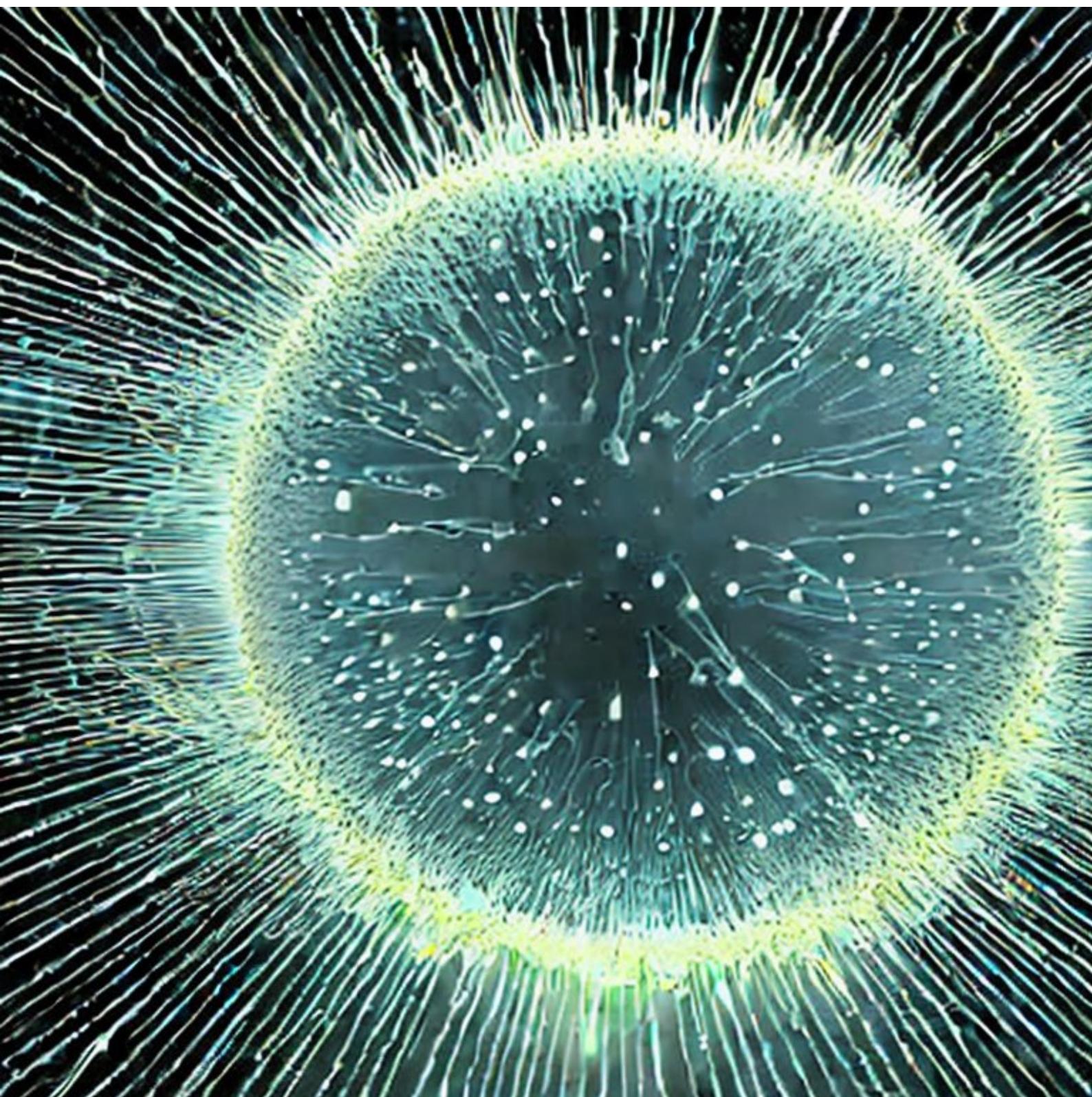


Stochastische Mechanik und Quantenmechanik

Kompendium der stochastischen Interpretation der Quantenmechanik



Michael Rudschuck

michael.rudschuck@vde.com / Version: 12. August 2024, Rev. 0.1

STOCHASTISCHE MECHANIK UND QUANTENMECHANIK 0.1

Dr. Michael Rudschuck
michael.rudschuck@vde.com

Copyright © Michael Rudschuck 2010 – 2024

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 | 5-1 |
| 5.1.2. Einsteins Gesetz für das mittlere Verschiebungskreisquadrat einer Punktmasse unter Wirkung stochastischer Kräfte eines Einbettungs-Mediums endlicher Zähigkeit | 5-1 |
| 5.1.3. Die Fokker-Planck-Gleichung | 5-10 |
| 5.1.4. Die Navier-Stokes-Gleichung | 5-17 |
| 5.2. Übergang zur Quantenmechanik — Herleitung der zeitabhängigen Schrödingergleichung | 5-25 |
| 5.2.1. Die Ehrenfestschen Sätze | 5-34 |
| 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 | 6-80 |
| 6.5.1. Das Wasserstoffatom im homogenen Magnetfeld | 6-88 |
| 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 Additivonstheorem 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. Phänoeologische 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. Einige Begriffe und Definitionen aus der Wahrscheinlichkeitsrechnung | 15-1 |
| 15.2. Brownsche Molekularbewegung | 15-6 |
| 15.2.1. Beschreibung der Diffusion nach Einstein | 15-6 |

| | |
|--|-------------|
| 15.2.2. Beschreibung der Diffusion nach Langevin | 15-10 |
| 15.3. Grundlagen der Wahrscheinlichkeitsrechnung | 15-12 |
| 15.3.1. Axiome der wahrscheinlichkeitsrechnung | 15-12 |
| 15.3.2. Zufallsvariablen | 15-12 |
| 15.3.3. Multivariante und bedingte Wahrscheinlichkeitenabilities | 15-13 |
| 15.3.4. Momente und momente-erzeugende Funktionen | 15-14 |
| 15.4. Einige wichtige Verteilungsfunktionen | 15-16 |
| 15.4.1. Die Gauksche Verteilung | 15-16 |
| 15.5. Noch nicht einsortiert | 15-17 |
| 15.6. Ergodische Prozesse | 15-22 |
| 15.7. Markow-Prozesse | 15-24 |
| 15.8. Homogenität und Stationarität | 15-28 |
| 15.9. Autokorrelationsfunktionen | 15-28 |
| 15.9.1. Lineares Regressionstheorem | 15-29 |
| 15.10 Beispiele für differenzielle Chapman-Kolmogorow-Gleichungen | 15-30 |
| 15.10.1 Sprungprozesse | 15-30 |
| 16. Antworten zu ausgewählten Themen | 16-1 |
| 16.0.1. Determinismus und Indeterminismus | 16-1 |
| 16.0.2. Stabilität von Atomen | 16-2 |
| 16.0.3. Zusammenhang zwischen den statistischen Vakuumkräften und den Schwankungen der Energie um ihren klassischen Erhaltungswert | 16-5 |
| 16.0.4. Wellenförmige Struktur der Wahrscheinlichkeitsdichten für Teilchen in Potentialen | 16-9 |
| 16.0.5. Teilchen in der Quantenmechanik | 16-10 |
| 16.0.6. Identische Teilchen in der Quantenmechanik | 16-11 |
| 16.0.7. Hydrodynamische Analoga der Quantenmechanik | 16-12 |
| 17. Giftschrank der Quantenmechanik | 17-1 |
| 17.1. Schrödinger Katze | 17-5 |
| 17.2. Vakuumenergiemaschinen | 17-6 |
| A. Java-Applet | A-1 |
| B. Periodensystem | B-1 |
| B.1. Atomare Einheiten | B-4 |
| C. Literatur | C-1 |
| Stichwortverzeichnis | C-14 |

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.

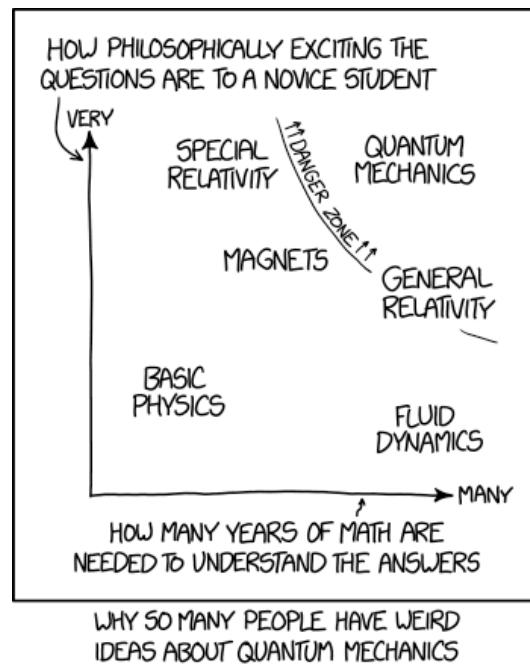
Dieses Skript zeigt wertfrei die Herleitung der Quantenmechanik aus der klassischen Mechanik als eine von vielen Ansätzen.

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, 2024
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 [210] 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 | ✓ | 16.0.4 |
| Doppelspaltexperiment | ✓ | |
| Tunneleffekt | ✓ | 16.0.3 |
| Nullpunktenergie | ✓ | 16.0.3,16.0.4 |
| Zeitabhängige Dirac-Gleichung | ✓ | |
| Herleitung des Spins | | |
| Spin | ✓ | 7 |
| Stern-Gerlach-Experiment | ✓ | |
| Das Bohrsche Magneton | ✓ | |
| Spinpräzession in einem magnetischen Feld | ✓ | |
| Magnetische Spinresonanz | ✓ | |
| Strahlungsemision | | |
| Wasserstoffatom | ✓ | |
| Spontane Emission | ✓ | |
| Plancksches Gesetz | ✓ | |
| Stabilität von Atomen | ✓ | 16.0.2 |
| Anwendungen Quantenmechanik | | |
| van der Waals-Wechselwirkung | ✓ | |
| Sonstiges und offene Punkte | | |
| Determinismus | (-) ¹ | |
| Schrödingers Katze | (-) ² | Abschnitt 17.1 |
| Geisterhafte Fernwirkung | — | |
| Quantumcomputing | — | |
| Makroskopische Analogien | | |
| Hydrodynamische Analoga der Quantenmechanik | ✓ | 16.0.7 |

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 17.1

Die Interpretationen der Quantenmechanik gehen dabei sehr weit auseinander und sind keineswegs kompatibel. Aus diesem Grund gibt 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 Jutta Aschenbach
Wirkung dieser Überschrift unbeabsichtigt war. [176]

Das hohe Ansehen der Gründer der Quantenmechanik und Schöpfer der *Kopenhagener Interpretation*, Jutta Aschenbach
allen voran Heisenberg, Born, Jordan, Dirac und [176]
Bohr, hat bis heute eine grundlegende Diskussion
über die Grundlagen auf breiter Basis verhindert.

Shut up an calculate. N. David Mermin

[The theory] makes absolutely no sense. Roger Penrose

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

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

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

Wenn diese Quantenspringerei nicht aufhört tut es Ernst Schrödinger
mir leid, mich jemals damit befasst zu haben.

In quantum mechanics, when the wave function is Edward Nelson
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 N. David Mermin:
disappear.

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 oder die Bornsche Interpretation.

In diesem Kompendium liegt der Schwerpunkt auf der Stochastischen Mechanik nach Edward Nelson, die die Quantenmechanik als Ursache von Fluktuationen des Vakuums erklärt [178].

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.

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).

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.

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.

| 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 wie¹

- 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 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:

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

... 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 definiert 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 Spezielle 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 Alltagsverständ 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 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

²Teaser zur Stochastischen Mechanik

³Shut up an calculate!

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 erkläbar macht, beispielsweise durch die Einführung durch 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

⁴Teaser: Stochastische Mechanik

⁵Wird hier im weiteren nicht betrachtet.

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.

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 sogenannten „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 [210] 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 | 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 | Verborgene Variablen | Eindeutige Vergangenheit | Lokalität | Universelle Wellenfunktion |
|---|------------------|----------------------------|---------------|----------------|----------------------|--------------------------|---------------------------|---------------------------------------|
| Many-worlds interpretation (S. 3.2) | 1957 | Everett | ja | ja | nein | nein | nein | ja ./. ¹² |
| Von Neumann-Wigner- Interpretation (S. ??) | 1961 – 1993 | von Neumann, Wigner, Stapp | nein | ja | ja | nein | ja ja ¹³ | nein nein ja |
| Stochastische Mechanik | 1966 | Nelson | nein | nein | ja | ja ⁵ | nein | nein ja nein |
| Many-minds interpretation (S. 3.2) | 1970 | Zeh | ja | ja | nein | nein | ./. ¹⁴ | ja ./. ¹⁵ |
| Consistent histories (S. 3.2) | 1984 | Griffiths | nein | nein | nein | nein | nein [?] | ja nein ja nein ja |
| Transactional interpretation (S. 3.2) | 1986 | Cramer | nein | ja | ja | nein | ja ¹⁶ | nein nein ¹⁷ ja nein |

12 Unzureichend.

¹³Kausaler Zusammenhang.

¹⁴Interpretativ: 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.

¹⁷ Die 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oefentlichung | | | | | | | | | | | |

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. [169] 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. [170] 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. [172] 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)

[\(Wiki\)](#)

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 Nichtlokalität der Pilotwelle nicht direkt beobachtet werden können.

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. [210] 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. [210]

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 [127], [176] 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.

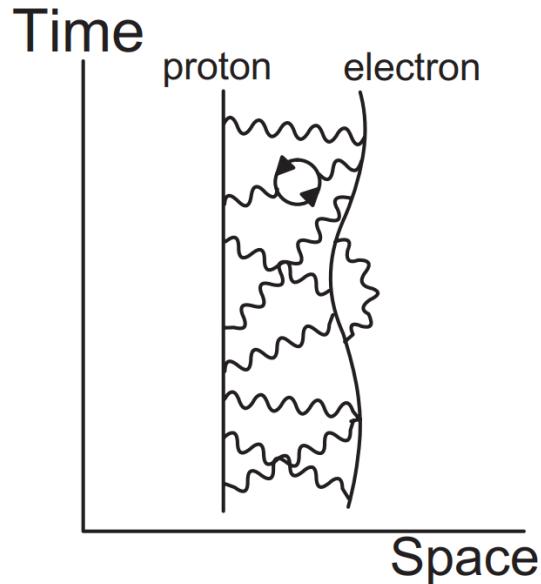


Abbildung 3.1.: H-Atom: Proton und Elektron tauschen Photonen aus. Das schwere Proton ist praktisch stationär und hält das Elektron auf einer „zitterigen“ Bahn fest. Vakuumpolarisation: Wenn das Austauschquant ein Elektron-Positron Paar bildet ist der Effekt eine Reduktion der effektiven Ladung. Das 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 [183] 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. [184]). 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 [185] im Jahr 1933 ausführlich erörtert. Nach dem Krieg erfuhr diese Diskussion durch eine Reihe von Arbeiten erneut reges Interesse (vgl. Feynman [186]).

Eine konkretere Form erhielten die Bemühungen um eine stochastisch-mechanische Begründung der Quantenmechanik erst durch die Arbeiten von Weizel [187], [188], [189] und Fényes [190]. 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

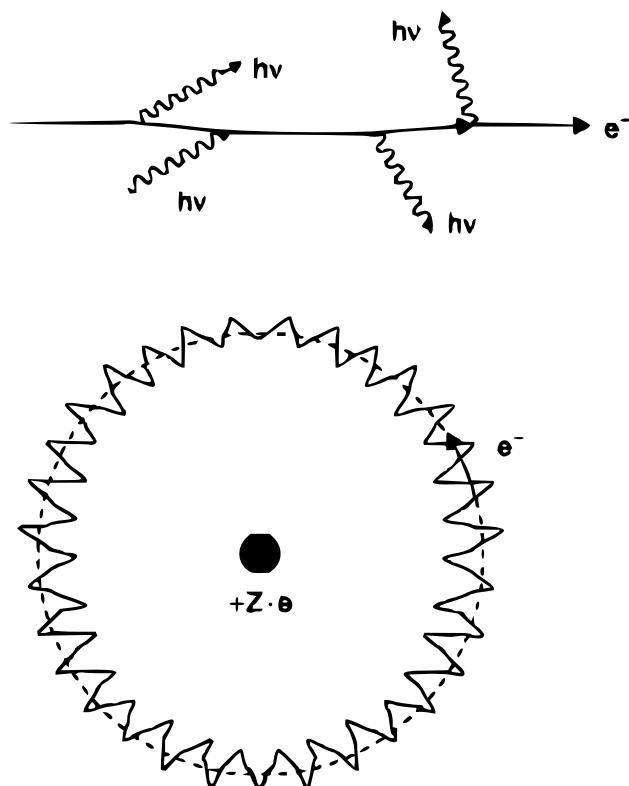


Abbildung 3.2.: Illustration der Zitterbewegung eines Elektrons aufgrund der Emission und Absorption virtueller Photonen.

Bewegung ausführt. Erst durch die Veröffentlichung von Nelson [177], [178] erhielt dieses Konzept eine transparentere Gestalt. Daneben gab es zahlreiche weitere Beiträge zu diesem Thema, von denen hier nur die bedeutendsten von Bohm [191], [192], de Broglie [193], Landé [194], Comisar [195], Santos [196] und de la Persa Auerbach [197] genannt werden.

Die Arbeit von Bopp [199] 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 1 (Abriss ist noch unvollständig.):

5. Herleitung der Quantenmechanik aus der Theorie statistischer Systeme

5.1. Beschreibung stochastischer klassischer Systeme von Punktmassen

Stochastik

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.

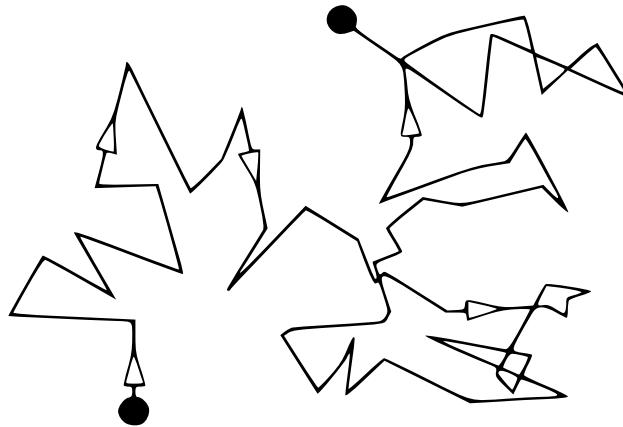


Abbildung 5.1.: Bewegung eines Teilchens unter Wirkung einer stochastischen Kraft (Brownsche Bewegung).

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

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

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

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

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

Der mittlere Impulsübertrag pro Stoß ergibt sich als

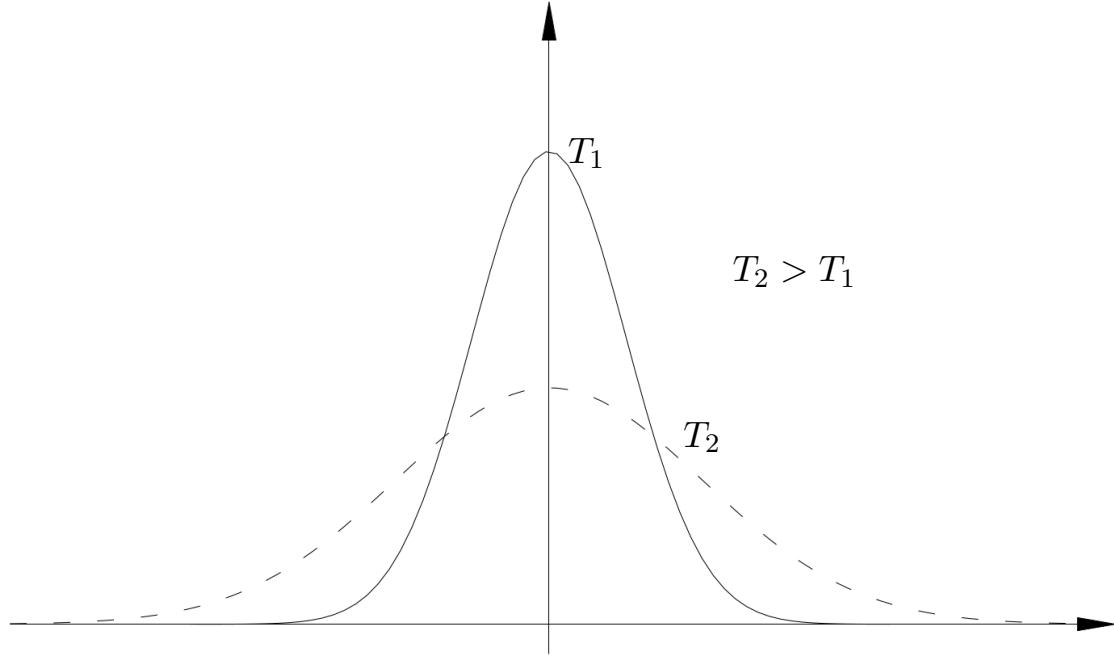


Abbildung 5.2.: Wahrscheinlichkeitsdichte für verschiedene Temperaturen

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

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

$$\frac{1}{2m_0} \langle P_i \rangle^2 = \frac{1}{2m_0} \int P_1^2 \tilde{w}_{(P_i)} dP_i \quad (i = 1, 2, 3) \quad (5.9)$$

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

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

To Do 2 (Fehler): $P_i \tilde{w}_{(P_i)}$ ist eine ungerade Funktion von P_i

mit einer ungeraden Funktion von P_i folgt:

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

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

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 Gesamtvolumentes V . Man definiere:

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

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

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

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

$$(5.17)$$

es gilt

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

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

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

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

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

Sei $\vec{\sigma}_{s\nu}$ der Teil der Teilchenverrückung $\vec{\sigma}_{\nu}$, der durch die Anwesenheit der statistischen Kraft zusätzlich auftritt und $\vec{\sigma}_{\nu c}$ 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:

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

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

und bilde $\sigma_{sj\nu}$

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

Nun ist

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

Als Lösung von 5.26 (partikuläre Lösung) ergibt sich:

To Do 3 (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:

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

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

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

(Bildung des Scharmittels) ist¹

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

Der Teil in der eckigen Klammer ist dabei Null:

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

weil $f_{si(t'')}$ ² und $f_{is(t)}$ 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:

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

Anmerkung 1:

Die Geschwindigkeitskomponenten für unterschiedliche Raumrichtungen sind statistisch unabhängig.

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

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

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

²da: $t''' = t'' - t'$

Anmerkung 2:

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:

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

mit $g_{(r)}$: 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:

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

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} -Abhängigkeit 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

$$\nu = \frac{\tau}{m_0} k_b T \quad (\text{kinematische Zähigkeit/Viskosität}) \quad (5.42)$$

Die Gleichungen 5.41, 5.42 heißen EINSTEINsche Relation [204]. Die übliche 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 lässt sich noch in einer anderen Form schreiben:

Sei $\rho_{\Delta t}(\vec{r}, \vec{\sigma}, t) d^3\sigma$ die Wahrscheinlichkeit dafür, daß 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)

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

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

über 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 3:

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^3r 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^3r um die Stelle $\vec{r} - \vec{\sigma}$ herum Teilchen aus dem *Aufvolumen* d^3r 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.

Man approximiere im folgenden den Integranden

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

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

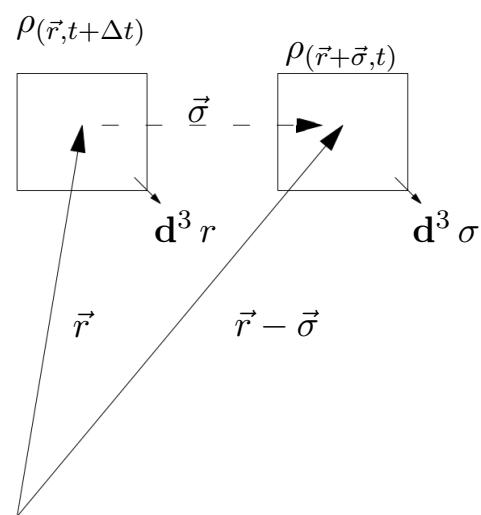


Abbildung 5.3.: Skizze zur Smoluchowski-Gleichung

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

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

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

$$(5.53)$$

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:

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

($\underline{\Delta}$ 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 4 (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:

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

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

d.h.

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

Diese Gleichung wurde von Fokker und Planck [205] herleitet. Sie stellt einen Spezialfall der zweiten Kolmogoroffschen Differentialgleichung dar, die von Kolmogoroff [207] 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.

Anmerkung 5:

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:

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

Grundsätzlich gilt immer:

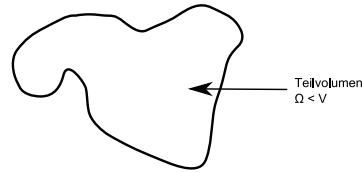


Abbildung 5.4.: Abbildung mit Teilvolumen $\Omega < V$

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

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

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

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

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

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

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

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

$$(5.72)$$

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 6:

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 $\vec{v}_{(\vec{r},t)}$ ein durch die Festsetzung:

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

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

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

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

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

und weiter mit 5.83:

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

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



Abbildung 5.5.: Erklärung der Integration

5.1.4. Die Navier-Stokes-Gleichung

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

Man kann nun als nächstes den Ausdruck $\rho_{(\vec{r})}$ 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 $\vec{F}_{(\vec{r})}$ kann analog zu $\rho_{(\vec{r}, t + \Delta t)}$ aus $\rho_{(\vec{r}, \vec{\sigma}, t)}$ 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 vorausgegangenen 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:

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

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

³Hinweis: Differenzen sind mit Δ gekennzeichnet; der [Laplace-Operator](#) mit $\underline{\Delta}$.

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:

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

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:

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

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:

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

und erhält:

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

d.h.

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

Man beachte Gleichung 5.87

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

⁴

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

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

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

⁴Vertauschbarkeit von Zeit- und Ortdifferentiation.

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:

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

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:

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

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 [200] 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 inkompressible Medien.

Man beachte:

$$dv_i = \frac{\partial v_i}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial v_i}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial v_i}{\partial x_3} dx_3 + \frac{\partial v_i}{\partial t} dt$$

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*:

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

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 $\ddot{\vec{u}} = 0$.

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 $\ddot{\vec{\sigma}}_\nu$, bewirkt, ist definiert durch

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

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

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

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

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

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:

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

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 :

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

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

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

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

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 :

⁵Siehe auch: Brownsche Bewegung

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

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

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

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

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

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

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-Brown'sche*-Untersystem analog herleiten wie für das *Brown'sche*-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 entstehen, 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 kann aber die Zustandsänderungen im *Anti-Brown'schen*-Untersystem stets für das Zeitintervall $(t - |\Delta t|, t]$ berechnen, wenn man die im *Brown'schen*-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. $\vec{v}_{B\nu}$

zwischen ΔV_A und ΔV_B auszutauschen, bis \vec{r}_A mit \vec{r}_B übereinstimmt.

Bei diesem Austausch bleiben ϱ_A und ϱ_B unverändert.

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

Man berechne jetzt für jede der beiden Halbsachalen 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 $\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} = \frac{d \vec{v}}{dt}$ 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 7:

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 ?? 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 $\rho_{(\vec{r},t)}$ und $\vec{v}_{(\vec{r},t)}$ 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:

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

mit

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

und

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

Anmerkung 8:

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

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

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

mit Ausnahme von abzählbar, unendlich vielen Wirbellinien (siehe auch [201]).

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

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

Anmerkung 9:

Wegen $\text{rot } \vec{v} = 0$ 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:

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

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 10:

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

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

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:

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

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, empfieilt 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

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

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

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

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

Zunächst einige Vorbemerkungen, Definitionen und Hilfssätze:

- Der *Kommutator* zweier Operatoren \mathbb{A} , \mathbb{B} ist: $[\mathbb{A}, \mathbb{B}] = \mathbb{A}\mathbb{B} - \mathbb{B}\mathbb{A}$
- 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 $\mathbb{1} = \text{Eins-Operator}$

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)

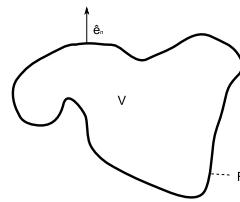


Abbildung 5.6.: Abbildung zur Greenschen Formel

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 GREEBSche 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}):

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

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

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

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

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

und mit

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

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

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

oder

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

q.e.d.

Anmerkung 11:

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

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

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 4 (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 12:

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

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 14 (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 15 (Beachte):

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

To Do 5 (Abbildung einfügen): Abbildung: 21.11.95

Abbildung 6.2.: Abbildungen zur Gleichung

To Do 6 (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 $E \approx E_{n0}$.

6.2. Das Prinzip extremer Gesamtenergie und die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

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

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

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

$c_{(\vec{k})}$ 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:

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

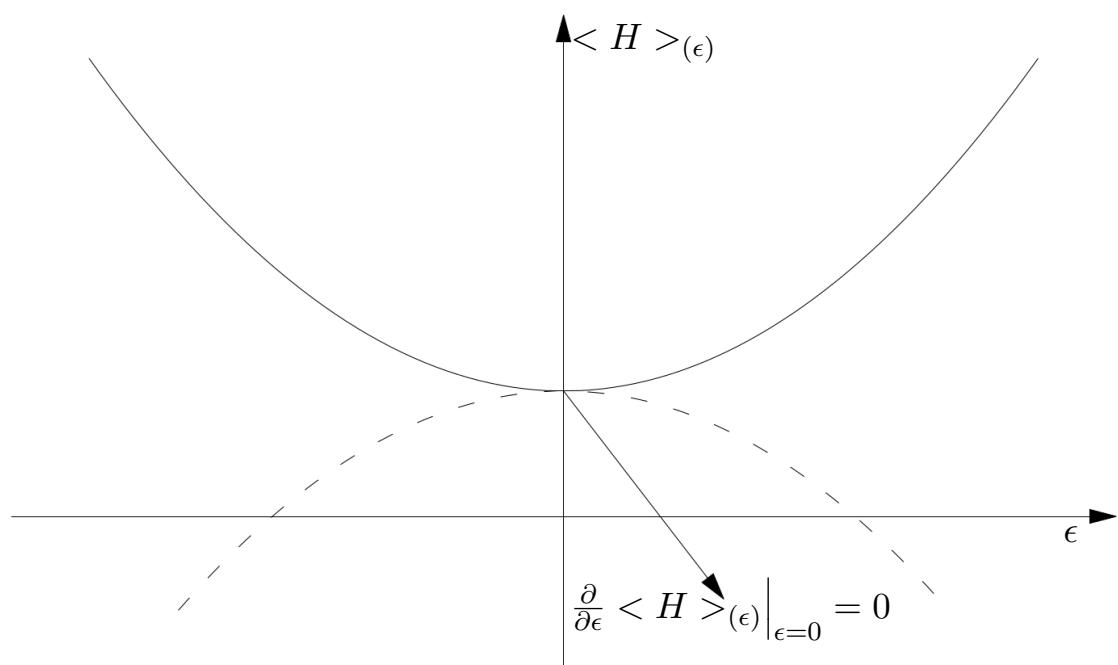


Abbildung 6.4.: Extremum, diese beiden Möglichkeiten können nur sein.

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 16 (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:

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

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

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

(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 Impusldarstellung 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 Ortsdarsetzung 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:

$$\mathbb{H} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \vec{\nabla}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}|} \quad (6.20)$$

$r = 0$ 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

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0} \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} = 0,5291 \cdot 10^{-8} \text{ cm} \quad (6.21)$$

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

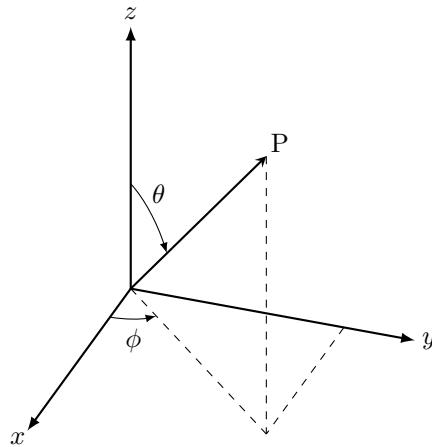


Abbildung 6.5.: Graphische Darstellung der Polarkoordinaten.

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

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

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:

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

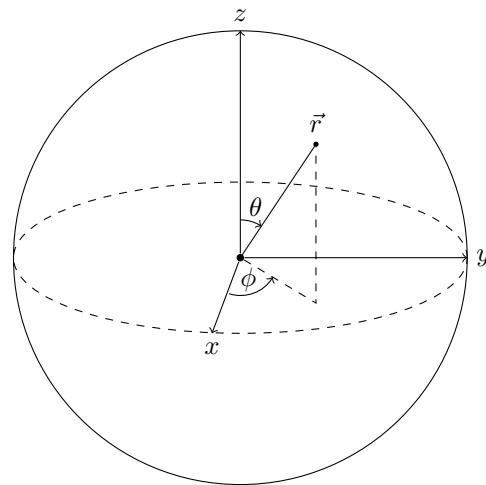


Abbildung 6.6.: Graphische Darstellung der Polarkoordinaten.

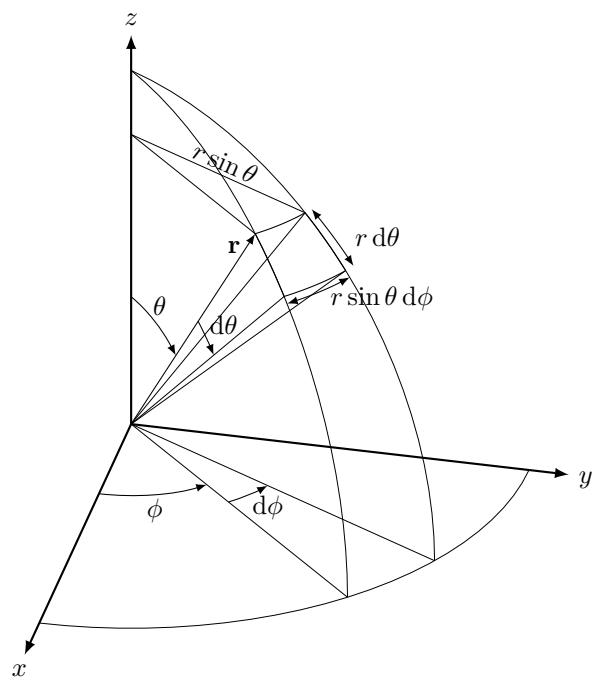


Abbildung 6.7.: Graphische Darstellung der differentiellen Polarkoordinaten.

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:

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

$$F_{(r,\varphi)} = G_{(\varphi)}$$

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

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

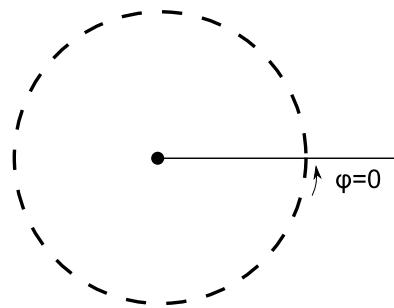


Abbildung 6.8.: Abbildung zur Gleichung

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

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

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

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

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:

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

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

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 7 (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 8 (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

$$1. \quad P_{l'}^{|m|} \text{ bzw.}$$

$$2. \quad P_l^{|m|}$$

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.

6.4.2. Zur Entartung der Wasserstoff-Eigenzusände

Die l-Entartung

Die l -Entartung oder „zufällige“ Entartung (nur bei H-Atomen \rightarrow 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.

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:

$$\beta(\beta + 1) = (l + \epsilon)^2 + (\beta + \epsilon) = l^2 + l + \delta$$

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:

⁴ Achtung: Überprüfen ob $\alpha^2 = -\mathcal{E}$ ist.

$$\mathcal{E}_{l,n} = \frac{1}{2 \cdot (n + \epsilon_{(l)})^2} \quad (6.69)$$

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 zentalsymmetrischem Zusatzpotential zum Potential $-\lambda/r$ die l -Entartung aufhebt.

Die $|m|$ -Entartung

In jedem zentalsymmetrischen Potential, d.h. in jedem Potential, das nur von $|\vec{r}| = r$ abhängt, liegt die sog. „ m -Entartung“ vor. In jedem zentalsymmetrischen 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 $U_{(r)}$ nur von r abhängt und nicht von θ bzw. φ wird $\langle U \rangle$:

$$\langle U \rangle = \int_0^\infty R_{nl(r)}^2 U_{(r)} r^2 \, dr \cdot \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \underbrace{Y_{lm}^* Y_{lm} \sin \theta \, d\theta \, d\varphi}_{=1} \quad (6.72)$$

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:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\mathbb{P}^2}{2m_0} \right\rangle &= - \int_0^\infty R_{nl(r)} \left[\frac{1}{r} \frac{d^2}{r^2} \right] \\ &\cdot \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm}^* Y_{lm} \sin \theta \, d\theta \, d\varphi \end{aligned}$$

⁵ Achtung: Hier die 2 korrigieren.

Auch dieser Erwartungswert hängt nicht von m ab. Also gilt für ein zentralesymmetrisches Potential:

$$\langle \mathbb{H} \rangle = \left\langle \frac{\mathbb{P}^2}{2m_0} \right\rangle + \langle U \rangle \quad (6.73)$$

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 .

Zusammenhang zwischen Bahnreimpuls 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

$$\langle \vec{L} \rangle = \int \psi_{(\vec{r})}^* \vec{L} \psi_{(\vec{r})} d^3r \quad (6.76)$$

Mit dem **Drehimpulsoperator**

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{P} = \frac{\hbar}{i} (\vec{r} \times \vec{\nabla}) \quad (6.77)$$

$$\langle \vec{L} \rangle = \int \vec{r} \times \vec{j}_{p(\vec{r})} d^3r$$

$$j_p = \frac{\hbar}{2i} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

$$\langle \vec{L} \rangle = \int \psi_{(\vec{r})}^* \vec{\mathbb{L}} \psi_{(r)} d^3 r \quad (6.78)$$

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:

$$\vec{r} \times \vec{j}_p = 0 \longrightarrow \vec{\mathbb{L}} = \int \vec{r} \times \vec{j}_p d^3 r = 0 \quad (6.83)$$

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:

$$\psi_{(r,\theta,\varphi)} = C_{nl} R_{nl(r)} P_{l(\cos \theta)}^{(m)} e^{im\varphi}$$

$$\vec{\nabla} \tilde{\varphi}_{(\vec{r})} = \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta}$$

Fehler: Formel überprüfen

To Do 9 (Abbildung einfügen):

Abbildung 6.11.: Abbildung zu 4.56

To Do 10 (Abbildung einfügen):

Abbildung 6.12.: zweite Abbildung zu 4.56

$$\vec{r} \times \vec{j}_p = m\hbar |\psi|^2 \frac{1}{\sin \theta} (\vec{e}_r \times \vec{e}_\varphi)$$

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

$$\langle \vec{L} \rangle = \int \vec{r} \times \vec{j}_p d^3r = m\hbar \vec{e}_z \int |\psi|^2 d^3r - \vec{e}_{\perp z} m\hbar \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty |\psi_{(r,\theta,\varphi)}|^2 r^2 dr \cot \theta \sin \theta d\theta dr$$

$$\langle \vec{L} \rangle = \vec{e}_z m\hbar - m\hbar \vec{e}_{\perp z} \int \int \int |\psi|^2 r^2 dr \cos \theta d\theta d\varphi$$

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty |\psi|^2 r^2 dr \cos \theta d\theta d\varphi &= 2\pi \int_0^\infty C_{nl}^2 R_{nl}(r) r^2 dr \cdot \underbrace{\int_0^\pi P_{l(\cos \theta)}^{|m|}{}^2 \cdot \cos \theta d\theta}_{= \int_{-1}^{+1} P_{l(x)}^{|m|}{}^2 \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} dx} \\ &= 0 \quad (\text{Symmetrie}) \end{aligned}$$

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:

$$[\vec{r} \times \vec{\nabla}]_z = \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$[\vec{r} \times \vec{\nabla}]_{\perp z} = -\cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{e}_{\perp z} + \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

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.

$$\begin{aligned} \langle \delta \mathbb{A}^2 \rangle &= \langle [\mathbb{A} - \langle \mathbb{A} \rangle]^2 \rangle \\ &= \langle \mathbb{A}^2 - 2\mathbb{A} \langle \mathbb{A} \rangle + \langle \mathbb{A} \rangle^2 \rangle \\ &= \langle \mathbb{A}^2 - 2\langle \mathbb{A} \rangle + \langle \mathbb{A} \rangle^2 \rangle \\ &= \langle \mathbb{A}^2 \rangle - \langle \mathbb{A} \rangle^2 \end{aligned}$$

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

$$\mathbb{A}^2 \psi_n = a_n \psi$$

und

$$\mathbb{A}^2 \psi_n = a_n^2 \psi$$

und somit:

$$\langle \mathbb{A} \rangle = \int \psi_n^* \mathbb{A} \psi_n d^3r = a_n^2 \cdot \underbrace{\int \psi_n^* \psi_n d^3r}_{=1} \quad (6.93)$$

Andererseits ist

$$\langle A \rangle = \int \psi_n^* A \psi_n d^3r = a_n \cdot \underbrace{\int \psi_n^* \psi_n d^3r}_{=1} \quad (6.94)$$

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

$$J_e = \frac{l}{m_0} \cdot \vec{j}_p$$

To Do 11 (Abbildung einfügen):

Abbildung 6.13.: 13.12.95

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:

$$\begin{aligned} dI &= \vec{e}_\varphi \cdot \vec{j}_p(r, \theta, \varphi) \cdot dF \frac{e}{m_0} \\ dJ &= \frac{e}{m_0} m \hbar \frac{1}{r \cdot \sin \theta} \cdot |\psi_{nlm}|^2 dF \end{aligned} \quad (6.95)$$

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:

$$\vec{M} = \vec{j} \cdot F = e \frac{v}{L} \vec{F} \quad (6.102)$$

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 Schrödingergleichung für den Fall eines zentraalsymmetrischen Potentials

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

⁶WKB-Näherung: Wentzel-Kramer-Brillion-Näherung

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:

$$\frac{i}{\hbar} \cdot (\vec{r} \times \vec{P}) = \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (6.107)$$

Daraus folgt:

$$\frac{i}{\hbar} \cdot (\vec{r} \times \vec{P}) = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (6.108)$$

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:

$$\underbrace{\left[\frac{d^2}{dr^2} + \kappa_{(r)}^2 \right] \cdot \hat{R}_{(r)}}_{= \frac{d^2}{dr^2} + \kappa \cdot \left(1 - \frac{i}{\kappa_{(r)}^2} \cdot \frac{d\kappa_{(r)}}{dr} \right)} \approx \left(\frac{d}{dr} + i\kappa_{(r)} \right) \cdot \left(\frac{d}{dr} - i\kappa_{(r)} \right) \cdot \hat{R}_{(r)} = 0 \quad (6.114)$$

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 12 (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

$$\begin{aligned} \mp i\kappa_{(r)} &= \frac{1}{\hat{R}_{(r)}} \cdot \frac{d\hat{R}_{(r)}}{dr} \\ &= \frac{d}{dr} \ln \hat{R}_{(r)} \end{aligned}$$

$$\ln \left(\frac{\hat{R}_{(r)}}{\hat{R}_{(r_0)}} \right) = \mp \int_{r_0}^r \kappa_{(r')} \cdot dr'$$

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:

$$j = \frac{1}{2i} \left(\hat{R}_{(r)}^* \cdot \frac{d}{dr} \hat{R}_{(r)} - \hat{R}_{(r)} \frac{d}{dr} \hat{R}_{(r)}^* \right) = \mp (\hat{R}_0)^2 \cdot \kappa_{(r)}$$

Da

$$\hat{R}_0 \approx \frac{1}{\sqrt{\kappa_{(r)}}}$$

wird die Ableitung Null, wie zu erwarten ist → darf hier konstant sein.

$$\tilde{U}_{(r)} = 0 \rightarrow \kappa = \sqrt{e}$$

$$\epsilon = \kappa^2$$

$$E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_0}$$

⁷Hier benannte Einheiten.

$$\hat{\mathbf{R}}_{(r)} = \hat{\mathbf{R}}_0 \cdot e^{\pm i \kappa r} \int_{r_0}^r \kappa_{(r')} dr'$$

oder als Stromdichte

$$j = \frac{1}{2i} \left(\hat{R}^* \frac{d}{dr} \hat{R} - \hat{R} \frac{d}{dr} \hat{R}^* \right) \stackrel{6.116}{=} \mp (\hat{R}_o)^2 \kappa_{(r)}$$

Danach wäre

$$\frac{dj}{dr} = 0$$

Randbemerkung : Herkömmlich:

$$\langle p \rangle = \int \psi^* \vec{P} \psi dr^3$$

Hier:

$$\langle p \rangle = \int \vec{j}_{p(r)} \cdot dr^3$$

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:

$$\vec{j} = \frac{1}{r} \cdot \hbar \vec{k}$$

$$\psi_{nlm(r,\theta,\phi)} = C_{nl} \cdot \mathbf{R}_{l(\epsilon_{nl}(r))} \cdot \mathbf{Y}_{lm(\theta,\phi)}$$

To Do 13 (Abbildung einfügen): Hier fehlt eine Abbildung.

To Do 14 (Abbildung einfügen): Hier fehlt eine Abbildung.

$$\underbrace{n_{\theta, \phi}}_{\text{Anzahl der Knoten in } \theta \text{ und } \phi} = n_\theta + n_\phi = l$$

$$E_{rot} = \frac{\langle \mathbb{L}^2 \rangle}{2\Theta} = \frac{\hbar^2 \cdot l(l+1)}{2\Theta} \quad (6.117)$$

Hieraus ergeben sich folgende Konsequenzen:

- Wenige Knoten bedeuten geringe Energie.
- Die Energie kann auf θ und ψ verteilt werden.
- $l = 0$ bedeutet keine Rotationsenergie.

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 Oszillatorkoerische Anteil der Radialfunktion wird durch das LAGURRE-Polynom bestimmt. Dies ist ein Polynom $(n - l - 1)$ tem Grades und hat $n - l - 1$ Nullstellen. Diese 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

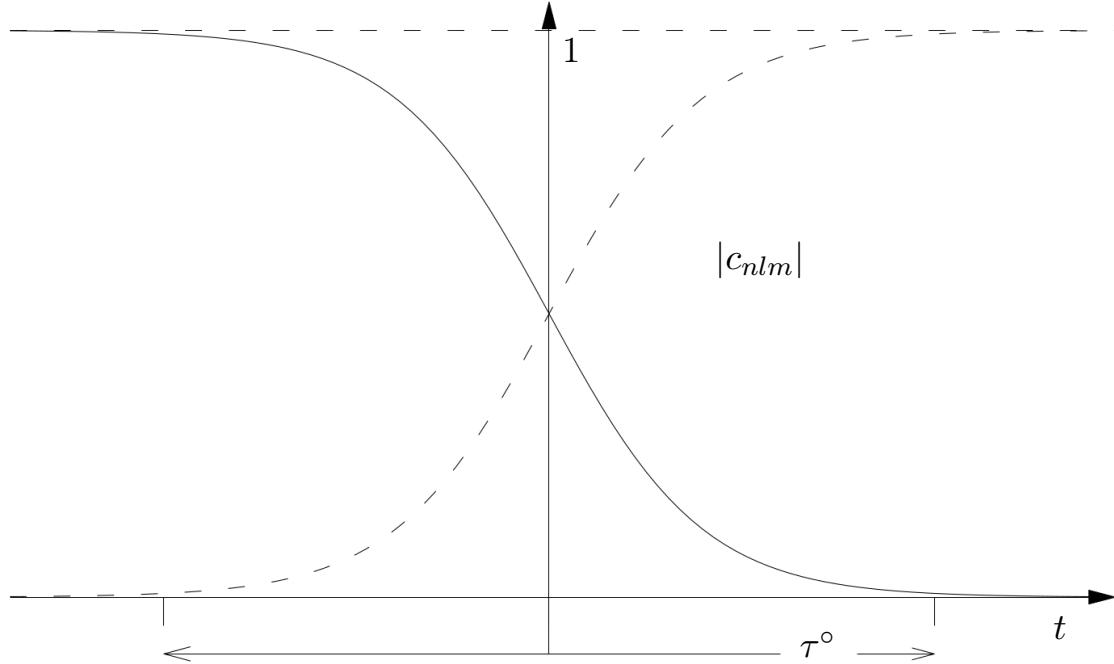
$$\frac{d}{d\xi} \mathbf{R}_{m(\xi)}^2 = \mathbf{B}_m^2 \cdot \left(\frac{2m}{\xi} - 2 \right) \cdot \xi^{2m} e^{-2\xi} = 0$$

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 Halbiersbreite δ_m dieser Kurve ist gegeben durch:

To Do 15 (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 17:

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 18:

Zufällige Entartung bei $1/r$. Die Entartung ist immer mit einer Symmetrie bedingt.

Dann gilt

Dann gilt

$$\begin{aligned}\mathbb{H}\psi_n &= E_n\psi \\ \mathbb{H}\psi_{n'} &= E_{n'}\psi_{n'}\end{aligned}$$

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:

$$\int \psi_{n'(\vec{r})}^* \psi_{n(\vec{r})} d^3r = \delta_{nn'} \quad (6.125)$$

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:

$$\int \left| F(\vec{r}) - \sum_{n=1}^{n_{max}} c_n \cdot \psi_n(\vec{r}) \right|^2 \cdot d^3 r = \epsilon_{n_{max}}$$

mit der Eigenschaft: $\epsilon_{n_{max}} \rightarrow 0$, wenn $n_{max} \rightarrow \infty$ gegen Unendlich strebt.

Es gilt als:

$$F(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(\vec{r})$$

Die Koeffizienten c_n bestimmen sich auf folgende Weise:

$$\begin{aligned} F(\vec{r}) \psi_{n'(\vec{r})} d^3 r &= \sum_{n=1}^{n_{max}} c_n \underbrace{\int \psi_{n'(\vec{r})}^* \psi_n(\vec{r}) d^3 r}_{\delta_{n'n}} \\ &\Rightarrow c_n = \int F(\vec{r}) \psi_{n'(\vec{r})}^* d^3 r \end{aligned}$$

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 parariert 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:

$$\mathbb{H}\hat{\psi}(\vec{r},t) = \sum_{nlm} c_{nlm} \underbrace{[\mathbb{H}\hat{\psi}_{nml}(\vec{r})]}_{E_n \hat{\psi}_{nml}(\vec{r})} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

Andererseit gilt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r},t) = \sum_{nlm} c_{nlm} E_n \hat{\psi}_{nml}(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

⁹Gravitationsstrahlung ist hier ein vernachlässigbares Phänomen.

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:

Achtung Fomel falsch

$$c_{nlm} = \int \hat{\psi}_{n'l'm'(\vec{r})}^* \psi_{nlm(\vec{r})} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} d^3 r$$

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 Strahlungsemision 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

$$\begin{aligned} c_{n'l'm'} &= c_{nlm}(t) \\ c_{nlm} &= c_{nlm}(t) \end{aligned}$$

¹⁰Jede beliebige Energie zwischen $E_{n'}$ und E_n ist beim Übergang realisierbar, die Natur macht keine Sprünge.

Abbildung einfügen.

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 $\varphi_{(\vec{r},t)}$ 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 $\hat{\psi}'_{n'l'm'(\vec{r})} e^{-\frac{i}{m}E_nt}$ und $\hat{\psi}_{nlm(\vec{r})} e^{-\frac{i}{m}E_nt}$ 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:

$$|c_{n'l'm'(t)}|^2 + |c_{nlm(t)}|^2 = 1$$

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:

Formel unvollständig.

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}, t) &= w(\vec{r}, t) \\ &= \psi_{(\vec{r}, t)}^* \psi_{(\vec{r}, t)} \\ &= |c_{n'l'm'(t)}|^2 \cdot |\hat{\psi}_{n'l'm'(\vec{r}, t)}|^2 + |c_{nlm(t)}|^2 \cdot |\hat{\psi}_{nlm(\vec{r}, t)}|^2 \\ &\quad + 2 \cdot |c_{n'l'm'(t)}^* c_{nlm(\vec{r})}| \cdot |\hat{\psi}_{n'l'm'(\vec{r})} \hat{\psi}_{nlm(\vec{r})}^*| \cdot \cos(\varphi \Delta_m + wt) \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} w_{nn'} &= \frac{1}{\hbar} \cdot (E_{n'} - E_n) \\ \Delta m &= m' - m \\ \alpha &= \arg(c_{n'l'm'(t)} c_{nlm(t)}^*) \end{aligned}$$

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 $\psi_{(\vec{r}, t)}$:

$$\vec{P}_0 = \int e \vec{r} \rho_{(\vec{r}, t)} d^3 r \quad (6.129)$$

Hierbei ist

$$\begin{aligned} \vec{P}_0 &= \text{Dipolmoment} \\ \vec{r} &= \text{Verbindungsvektor Elektron-Proton} \end{aligned}$$

Bild einfügen

$$\vec{P}_0 = 2 \cdot \left| c_{n'l'm'(t)}^* c_{nlm(t)} \right| \cdot \vec{P}_{n'n} \cdot \cos(\varphi \Delta m - w_{n'n} t - \alpha)$$

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 zentralesymmetrischen Potential hat ein Dipolmoment.

Der Zeitverlauf von $\left| c_{n'l'm'(t)}^* c_{nlm(t)} \right|$ hat die Form:

$$2 \left| c_{n'l'm'(t)}^* c_{nlm(t)} \right| = \frac{1}{\cosh \frac{2t}{\tau}}$$

Man stellt somit fest, dass während der Übergangszeit τ ein **Dipolmoment** auftritt, das mit der Frequenz

$$\omega_{n'n} = \frac{1}{\hbar} \cdot (E_{n'} - E_n) \quad (6.131)$$

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

$$\int_0^{2\pi} \sin \varphi d\varphi = \int_0^{2\pi} \cos \varphi d\varphi = 0$$

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.

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

$$4\pi \cdot \dot{\Pi} = \frac{1}{r} \vec{J}_{(t - \frac{r}{c})} \quad (6.135)$$

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 $\vec{j} \parallel \vec{e}_z$:

$$4\pi\epsilon E_\theta = -\frac{\sin\theta}{c^2 r} \cdot \dot{j}_{t-\frac{r}{c}}$$

$$E_r \approx 0$$

$$4\pi E_\phi = -\frac{\sin\theta}{cr} \cdot \dot{j}_{t-\frac{r}{c}}$$

$$H_r = H_\theta = H_\phi = 0$$

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:

$$\begin{aligned}
 S_{tot} &= \int_0^\pi S_{r(\theta)} \underbrace{2\pi r^2 \sin \theta d\theta}_{=dF=R^2 d\Omega} \\
 &= \frac{j^2}{8\pi\epsilon_0 c^3} \cdot \underbrace{\int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta}_{=4/3} \\
 S_{tot} &= \frac{1}{6\pi\epsilon_0 c^3} \cdot j^2
 \end{aligned} \tag{6.136}$$

Nun gilt nach Gl. ??

$$(\vec{r}\Delta - \Delta\vec{r})\psi_{(\vec{r},t)} = -2\vec{\nabla}\psi_{(\vec{r},t)} \tag{6.137}$$

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

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\hbar} (\vec{r}\mathbb{H} - \mathbb{H}\vec{r}) \cdot \psi_{(\vec{r},t)} &= \frac{\hbar}{m_0} \vec{\mathbb{P}} \psi_{(\vec{r},t)} \\
 \frac{1}{\hbar} (\vec{r}\mathbb{H} - \mathbb{H}\vec{r}) \cdot \psi_{(\vec{r},t)} &= \frac{\hbar}{m_0} \vec{\mathbb{P}}
 \end{aligned}$$

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.

$$\frac{1}{\hbar} (\vec{r}\mathbb{H} - \mathbb{H}\vec{r}) \psi_{(\vec{r},t)} = i \cdot \frac{-i\hbar}{m_0} \vec{\nabla} \psi_{(\vec{r},t)}$$

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:

$$\vec{J}_{(t)} = -2\omega_{n'n} \cdot |C_{n'l'm'(t)}^* C_{nlm(t)}| \cdot |P_{n'n}| \cdot \cos(\omega_{n'n} \cdot t - \alpha')$$

Man kann hier im folgenden die zeitveränderlichkeit des Vorfaktors:

$$2 \cdot |C_{n'l'm'(t)}^* C_{nlm(t)}| = \frac{1}{\cosh(\frac{2t}{\tau})}$$

gegenüber dem Faktor $\cos(\omega_{n'n} \cdot t - \alpha')$ vernachlässigen.

Man verlangt demnach

$$\omega_{n'n}\tau \gg 1 \quad (6.139)$$

Anmerkung 19:

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

$$\bar{\mathbf{S}}_{tot(\bar{t})} = \frac{\omega_{n'n}^4}{12\pi\epsilon_0 c^3} \cdot \frac{|P_{n'n}|^2}{\cosh(\frac{2\bar{t}}{\tau})}$$

mit $\bar{t} \in (t, t + \tau)$.

Daraus ergibt sich durch Integration bezüglich \bar{t} von $-\infty$ bis $+\infty$ wegen

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\cosh\left(\frac{2\bar{t}}{\tau}\right)} d\bar{t} = \tau$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{S}_{tot(\bar{t})} d\bar{t} = \frac{\omega_{n'n}^4}{12\pi\epsilon_0 c^3} \cdot |P_{n'n}|^2 \cdot \tau \stackrel{!}{=} E_{n'} - E_n \stackrel{6.131}{=} \hbar\omega_{n'n} \quad (6.141)$$

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 Übergangs $E_{n'} \rightarrow E_n$ 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 20 (Klassische Herleitung):

Eine klassische Herleitung erfolgt durch EINSTEIN schon vor der Quantentheorie.

Die natürliche Linienbreite der Spektrallinien

Zur Berechnung der natürlichen *Linienbreite* der *Spektrallinien* wird auf folgende beiden Formel zurückgegriffen:

$$4\pi\epsilon_0 E_\nu = -\frac{\sin\theta}{c^2 r} j_{(t - \frac{|r|}{c})}$$

und

error Abbildung fehlt noch

$$\dot{J}_{(t)} = \frac{\omega_{n'n}^2}{\cosh(\frac{2t}{\tau})} \cdot |P_{n'n}|^2 \cdot \sin(\omega_{n'n} t + \alpha')$$

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 21:

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 mit einer endlichen Breite um den Schwerpunkt $\omega_{n'n}$ erscheinen.

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:

error Abbildung fehlt noch

$$\begin{aligned} A_{(\omega)} &= \mathcal{R}A_{(\omega)} \\ &= \frac{1}{2\pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} E_{(\theta(t',r_0)} \cdot \cos(\omega t') dt' \end{aligned}$$

also ergibt sich mit Kombination von Gl. ??:

$$A_{1(\omega)} = \text{const.} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos((\omega_{n'n} - \omega)t')}{\cosh(\frac{2t}{\tau})} \cdot dt' + \text{const.} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos((\omega_{n'n} - \omega)t')}{\cosh(\frac{2t}{\tau})} \cdot dt'$$

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:

$$\begin{aligned} I_\omega &\approx |A_{1(\omega)}|^2 \\ &\approx \text{const.}^2 \frac{\tau^2}{\cosh^2[(\omega_{n'n} - \omega) \cdot \frac{\pi\tau}{4}]} \end{aligned}$$

Entwickelt man diese Funktion von ω um die Stelle $\omega_{n'n}$ nach TAYLOR bis zum Glied zweiter Ordnung, so ergibt sich:

error Abbildung fehlt noch

$$I(\omega) = 4 \cdot \text{const.} \cdot \frac{1}{\left(\frac{1}{2\tau'} - (\omega - \omega_{n'n})^2\right)^2} \quad (6.144)$$

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:

$$\frac{\Delta\omega_H}{\omega_{n'n}} = \frac{1}{\omega_{n'n}\tau'} \approx 10^{-5} \dots 10^{-6} \quad (6.146)$$

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.

Anmerkung 22:

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:

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = C_{nlm} \mathbf{R}_{nl(r)} \mathbf{P}_{l(\cos\theta)}^{|m|} \cdot e^{im\varphi}$$

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

$$a_1^{(1)} = a_2^{(2)} = 1/2$$

$$a_1^{(2)} = -a_2^{(1)} = 1/2i$$

$$a_1^{(3)} = a_2^{(3)} = 1/2$$

$$b_3 = 0$$

$$c_1 = c_2 = 0$$

$$c_3 = 0$$

$$M_1^{(1)} = -M_2^{(1)} = 1$$

$$M_1^{(2)} = -M_2^{(2)} = 1$$

$$M_1^{(3)} = +M_2^{(3)} = 0$$

und mit

¹¹ $i = 1, 2, 3$ zählt die Koordinantenrichtungen durch.

$$\begin{aligned}x_1 &= r \cdot \sin \theta \cos \varphi \\x_2 &= r \cdot \cos \theta \cos \varphi \\x_3 &= r \cdot \cos \theta\end{aligned}$$

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

¹²Wenn r^2 nicht unbedingt $\neq 0 \rightarrow$ Orthogonalität.

$$\int \mathbf{P}_{l'(\cos\theta)}^{|m|} \mathbf{P}_{l(\cos\theta)}^{|m|} \cos\theta d\cos\theta \neq 0$$

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

$$\mathbf{P}_{l(\cos\theta)}^{|m|} \sin\theta = \frac{1}{2l+1} \cdot \left(\mathbf{P}_{l+1(\cos\theta)}^{|m|+1} - \mathbf{P}_{l-1(\cos\theta)}^{|m|} \right) \quad (6.150)$$

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

$$B = 3645,81 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$$

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.

¹³Schullehrer in Basel.

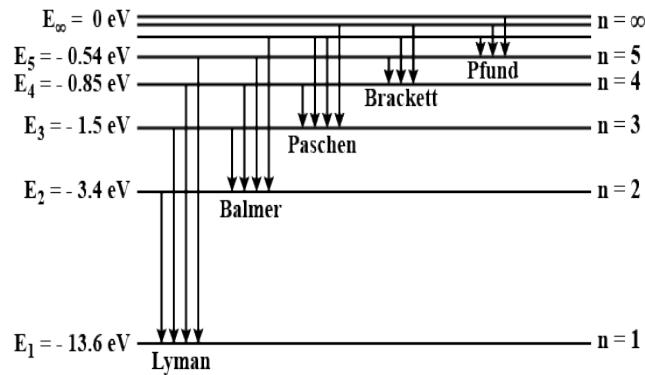


Abbildung 6.14.: Energieschema des Wasserstoffatoms.

$$\begin{aligned} \langle \vec{L}_2 \rangle &= m_2 \hbar \vec{e}_z \\ \langle \vec{L}_1 \rangle &= m_1 \hbar \vec{e}_z \\ \langle \vec{L} \rangle &= \Delta m \hbar \vec{e}_z \end{aligned}$$

Das Photon muss demnach $\pm \hbar$ an Drehimpuls aufnehmen.

Anmerkung 23 (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

$$\vec{F}_e = -\vec{\nabla} \mathbf{U}_{(r,t)}$$

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 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;

$$\vec{E}_{(\vec{r},t)} = -\dot{\vec{A}}_{(\vec{r},t)} - \vec{\nabla} \phi_{(\vec{r},t)} \quad (6.154)$$

Man betrachte ein System mit einem Teilchen der Ladung e in einem elektrostatischen Potential $\phi_{(\vec{r},t)}$. Zur Zeit $t = 0$ werde ein Magentfeld eingeschaltet, das nach der Zeit τ die Stärke $\vec{B}_{(\vec{r},t)}$ angenommen hat.

¹⁴Hier wurde \vec{F} mit dem Index e versehen, um anzudeuten, dass dieses Kraftfeld im allgemeinen nur Teil eines Gesamtkraftfeldes ist.

Bei Anwesenheit des Magnetfeldes $\vec{B}_{(\vec{r},t)}$ gilt für die Gesamtkraft auf ein Teilchen der Ladung e (LORENTZ-Kraft):

$$\vec{F}_{(\vec{r},t)} = e \cdot \vec{E}_{(\vec{r},t)} + e \cdot \vec{v}_{(\vec{r},t)} \times \vec{B}_{(\vec{r},t)} \quad (6.155)$$

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:

¹⁵Früher: $= 1/m_0 \cdot F$.

$$\dot{\vec{P}}_{add} = e\vec{E}$$

bzw.

$$\oint \dot{\vec{P}}_{add}(\vec{r}', t) d\vec{r}' = e \oint \vec{E}_{(\vec{r}', t)} d\vec{r}'$$

6.157

$$\oint \dot{\vec{P}}_{(\vec{r}', t)} d\vec{r}'$$

Dieser Beziehung gibt man mit Hilfe von 6.158 die folgende Form:

$$\frac{\partial}{\partial t} \oint \vec{P}_{(\vec{r}', t)} d\vec{r}' = -\frac{\partial}{\partial t} \oint e\vec{A}_{(\vec{r}', t)} d\vec{r}'$$

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:

$$\oint \vec{P}_{(\vec{r}', t)} d\vec{r}' = - \oint e\vec{A}_{(\vec{r}', t)} d\vec{r}'$$

oder mit $P = m_0 v$

$$\oint \left(\vec{v}_{(\vec{r}', t)} + \frac{e}{m_0} \vec{A}_{(\vec{r}', t)} \right) d\vec{r}' = 0$$

Zieht man diese Ringintegrale auf eine Punkt \vec{r} zusammen, so folgt mit Hilfe des **Stokeschen Satzes**:

$$\text{rot} \left[\vec{v}_{(\vec{r}, t)} + \frac{e}{m_0} \vec{A}_{(\vec{r}, t)} \right] d\vec{r}' = \vec{0}$$

bzw.¹⁶

$$\text{rot} \vec{v}_{(\vec{r}, t)} = -\frac{e}{m_0} \text{rot} \underbrace{\vec{A}_{(\vec{r}, t)}}_{=\vec{B}_{(\vec{r}, t)}} \quad (6.161)$$

¹⁶Mit Ausnahme von Punkten auf Wirbellinien (Quantisierungsachse, aber integrable Unendlichkeit)

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:

$$\vec{v} + \frac{e}{m_0} \vec{A}_{(\vec{r},t)} = 2\nu \vec{\nabla} \varphi \quad (6.162)$$

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:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(v + \frac{e}{m_0} \vec{A} \right) = -\frac{1}{m_0} \vec{\nabla} \underbrace{U}_{U=e\phi} - \frac{1}{2} \vec{\nabla} v^2 + \frac{1}{2} \vec{\nabla} u^2 - \nu \Delta \vec{u} \quad (6.168)$$

Multipliziert man mit ?? und subtrahiert 6.165, so ergibt sich die zu den früheren Ergebnis (ohne Magnetfeld) analoge *komplexe Bewegungsgleichung*:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(-u + i \left(v + \frac{e}{m_0} \vec{A} \right) \right) = \frac{i}{2} \vec{\nabla} (-\vec{u} + i\vec{v})^2 + i\nu \vec{\nabla} (\operatorname{div} (-\vec{u} + i\vec{v})) - \frac{i}{m_0} \vec{\nabla} U \quad (6.169)$$

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 :

¹⁷Dies ist die rechte Seite von 6.169 bis auf den Term $-\frac{i}{m_0} \vec{\nabla} \mathbf{U}$.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{(\vec{r},t)} = \left\{ \frac{(\vec{\mathbb{P}} - e\vec{A}_{(\vec{r},t)})^2}{2m_0} + \mathbf{U}_{(\vec{r},t)} \right\} \psi_{(\vec{r},t)}$$

Dies ist die SCHRÖDINGER-Gleichung bei Anwesenheit eines Magnetfeldes. Sie wird üblicherweise in folgender Form geschrieben:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{(\vec{r},t)} = \mathbb{H} \psi_{(\vec{r},t)} \quad (6.172)$$

mit

$$\mathbb{H} = \frac{1}{2m_0} \vec{\mathbb{P}}'^2 + \mathbf{U}_{(\vec{r},t)} \quad (6.173)$$

und

$$\vec{\mathbb{P}}' = \vec{\mathbb{P}} - e\vec{A}_{(\vec{r},t)} \quad (6.174)$$

Die elektrischen Stromdichte nimmt mit Verwendung von 6.163 und $2\nu = \frac{\hbar}{2m_0}$ die Form an:

$$\vec{j}_e = e\rho_{(\vec{r},t)}\vec{v}_{(\vec{r},t)} = \frac{e}{m_0} \cdot |\psi_{(\vec{r},t)}|^2 \cdot \underbrace{\left(\hbar \vec{\nabla} \varphi_{(\vec{r},t)} - e\vec{A}_{(\vec{r},t)} \right)}_{\substack{\text{6.163=} \\ m_0 v}}$$

Wegen

$$\nabla \psi = \psi i \vec{\nabla} \varphi + \psi \frac{1}{|\psi|} \vec{\nabla} |\psi|$$

mit

$$\psi = |\psi| e^{i\varphi}$$

ist also

$$\psi^* (-i\hbar \vec{\nabla}) \psi = |\psi|^2 \hbar \vec{\nabla} \varphi - i\hbar |\psi| \vec{\nabla} |\psi|$$

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 : $S \propto |\vec{p}| \propto \omega^4$

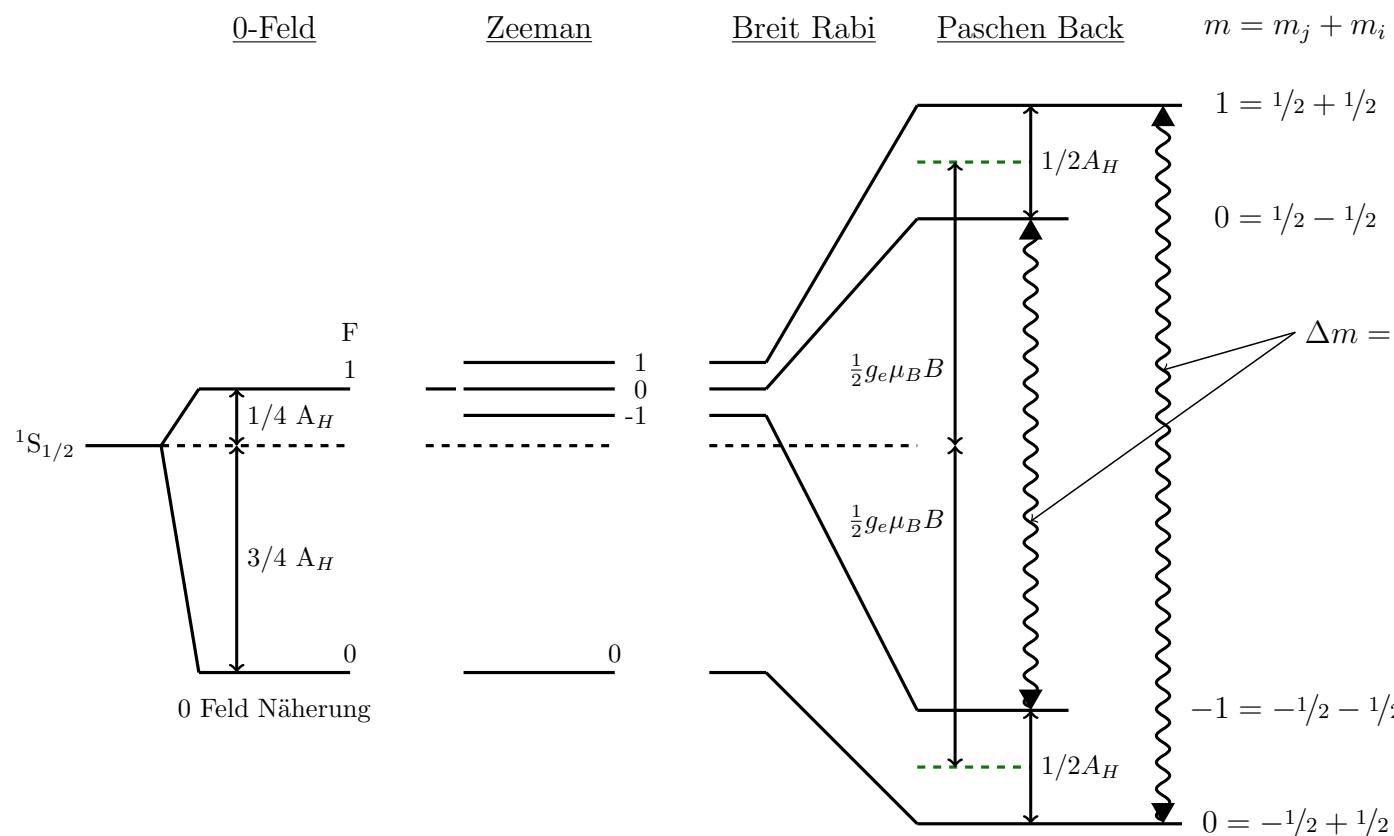


Abbildung 6.15.: Aufspaltung der Wasserstofflinien im magnetischen Feld.

?? Abb. fehlt noch

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.

¹⁹1. Linie der RITZ-PASCHEN-Serie

Anmerkung 24:

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 Zeemannsches Triplett* genannt.

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 Schrödingergleichung solche, die den Entwertungswert 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

Nach den bisher gemachten Näherungen hat man den Term $\frac{e^2}{m_0} \vec{A}^2$, der sich aus $\frac{\mathbb{P}}{e\vec{A}} 2m_0$ als quadratischer Form ergibt, bisher vernachlässigt. Dies gilt für Felder > 10 Tesla nicht mehr. Nach 6.175 gilt:

$$\vec{\alpha}_e = \frac{e\hbar}{2im_0} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) - \frac{e^2}{m_0} \vec{A}_{(r)} \cdot |\psi_{(r)}|^2$$

Im homogenen Magnetfeld ($\vec{B}_0 \parallel \vec{e}_z$) war

$$\begin{aligned} \vec{A}_{(r)} &= \vec{A}_{\vartheta} = 0 \\ \vec{A}_{\varphi} &= \frac{1}{2} B_0 r \sin \varphi \vec{e}_{\varphi} \end{aligned}$$

Betrachtet man einen Zustand mit $m = 0$, so verschwindet der obige Klammerausdruck für $\vec{\alpha}_e$, weil ψ in diesem Fall reellwertig wird.

Man erhält also:

$$\vec{\alpha}_e = -\frac{e}{\hbar} \mu_B B_0 r \sin \theta |\psi_{nl0(\vec{r})}|^2 \vec{e}_{\varphi} = \vec{J}_{\varphi}$$

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:

$$\begin{aligned} E_{nl0} &= E_{nl0}^{\text{ungeb.}} - \langle M \rangle \cdot B_0 \\ &= E_{nl0}^{\text{ungeb.}} + \frac{e}{\hbar} \mu_B B_0^1 G_{nl0} \end{aligned}$$

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.

7. Der Teilchenspin

Man betrachte ein Teilchen der Ruhemasse m_0 in einem zentalsymmetrischen 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

$$\psi_{(\vec{r})}^* \psi_{(\vec{r})} = \underbrace{\psi_{\uparrow(\vec{r})}^* \psi_{\uparrow(\vec{r})}}_{w_{\uparrow(\vec{r})}} + \underbrace{\psi_{\downarrow(\vec{r})}^* \psi_{\downarrow(\vec{r})}}_{w_{\downarrow(\vec{r})}} + \psi_{\uparrow(\vec{r})}^* \psi_{\downarrow(\vec{r})} + \psi_{\downarrow(\vec{r})}^* \psi_{\uparrow(\vec{r})}$$

¹Man hat hier, wie zuvor, ein spezifisches Polarkoordinatensystem mit dem Ursprung im Potentialzentrum und mit der Achse $\varphi = 0$ parallel zur z-Achse eingeführt.

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 $\vec{\psi}_{\uparrow(\downarrow)(\vec{r})}$, der als Eigenzustand realisiert werden kann, wird als *Spin* des Teilchens bezeichnet. Aufgrund des magnetomechanischen Parallelismus ist zu erwarten, dass mit 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*:

$$U_{mag(\vec{r})} = \mu_B B_z (\psi_{\uparrow(\vec{r})}^* \cdots \psi_{\uparrow(\vec{r})} - \psi_{\downarrow(\vec{r})}^* \cdots \psi_{\downarrow(\vec{r})}) \quad (7.3)$$

Dieser Ausdruck lässt sich mit der Matrix

$$\bar{\vec{B}} = \begin{pmatrix} B_z & 0 \\ 0 & -B_z \end{pmatrix} \quad (7.4)$$

in die folgende Form schreiben

$$U_{mag(\vec{r})} = \mu_B B_z (\vec{\psi}_{(\vec{r})}^* \mu_B \bar{\vec{B}} \vec{\psi}_{(\vec{r})}) \quad (7.5)$$

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

$$\int \vec{\psi}_{(\vec{r})} \vec{\psi}_{(\vec{r})} d^3r = \int (|\vec{\psi}_{(\vec{r})}|^2 |\vec{\psi}_{(\vec{r})}|^2) d^3r = 1 \quad (7.6)$$

liefert

$$(\mathbb{H} \bar{1} - \mu_B \bar{B}) \vec{\psi}_{(\vec{r})} = E \vec{\psi}_{(\vec{r})} \quad (7.7)$$

mit

$$\mathbb{H} = \frac{1}{2m_0} (\mathbb{P} - eA_{(\vec{r})})^2 + U_{(\vec{r})}$$

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 verlangt 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

$$\vec{\psi}'^+ = \left[\bar{\bar{Q}} \vec{\psi}_{(r)} \right]^+ = \vec{\psi}^+ \bar{\bar{Q}}^+$$

dann wird

$$\vec{\psi}^+ \bar{\bar{Q}}' \vec{\psi}' = \vec{\psi}^+ \bar{\bar{Q}}' \bar{\bar{B}}' \bar{\bar{Q}} \vec{\psi}$$

Da nun

$$\bar{\bar{B}} = \bar{\bar{Q}}^+ \bar{\bar{B}}' \bar{\bar{Q}}$$

gelten sollte, folgt hieraus:

$$\bar{\bar{Q}} \bar{\bar{B}} \bar{\bar{Q}}^+ = \underbrace{\bar{\bar{Q}} \bar{\bar{Q}}^+}_1 \underbrace{\bar{\bar{B}}'}_1 \underbrace{\bar{\bar{Q}} \bar{\bar{Q}}^+}_1$$

³Die Wechselwirkungsenergie darf sich nicht durch die Koordinatentransformation ändern (Invarianz).

⁴Transponent und kongruent.

Da nun nach den obigen Gleichungen

$$\psi^+ \bar{\overline{B}}' \psi' = \vec{\psi}^+ \bar{\overline{B}} \vec{\psi}$$

zu verlangen ist, muss gelten:

$$\bar{\overline{Q}}^+ \bar{\overline{B}}' \bar{\overline{Q}} = \bar{\overline{B}}$$

bzw.

$$\bar{\overline{Q}} \bar{\overline{Q}}^+ \bar{\overline{B}}' \bar{\overline{Q}} \bar{\overline{Q}}^+ = \bar{\overline{Q}} \bar{\overline{B}} \bar{\overline{Q}}'$$

Wenn sich also $\bar{\overline{B}}$ 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

$$\vec{\psi}_{(r)}^t \bar{\overline{Q}} \vec{\psi}_{(r)} \quad (7.11)$$

transformieren.

Für eine allgemeine Lage des Koordinatensystems hat $\bar{\overline{B}}$ die zu (7.8) analoge Form

$$\bar{\overline{B}} = \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_z \\ B_x + iB_z & -B_z \end{pmatrix}$$

Diese Matrix lässt sich in die entsprechende Summe zerlegen:

$$\bar{\overline{B}} = B_x \bar{\sigma}_x + B_y \bar{\sigma}_y + B_z \bar{\sigma}_z$$

mit

$$\bar{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.12)$$

$$\bar{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (7.13)$$

$$\bar{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.14)$$

$$(7.15)$$

Diese Matrizen werden in der Quantenmechanik als PAULISCHE-Spinmatrizen bezeichnet.

Formal kann man ?? auch in der Form schreiben:

$$\bar{\vec{B}} = \vec{B} \cdot \vec{\sigma}$$

Wobei $\vec{\sigma}$ ein Vector ist, dessen Komponente die **Pauli-Matrizen** sind.

Danach kann man 7.7 in der folgenden Form schreiben:

$$\left(\mathbb{H} \bar{\vec{1}} - \mu_B \vec{B} \vec{\sigma} \right) \vec{\psi}_{(\vec{r})} = E \vec{\psi}_{(\vec{r})} \quad (7.16)$$

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:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbb{A}_{(\vec{r},t)} \rangle &= \frac{\partial}{\partial t} \int \psi_{(\vec{r},t)}^* \mathbb{A}_{(\vec{r},t)} \psi_{(\vec{r},t)} d^3 r \\ &= \left\langle \frac{\partial \mathbb{A}_{(\vec{r},t)}}{\partial t} \right\rangle + \int \dot{\psi}_{(\vec{r},t)}^* \mathbb{A}_{(\vec{r},t)} \psi_{(\vec{r},t)} d^3 r + \int \psi_{(\vec{r},t)}^* \mathbb{A}_{(\vec{r},t)} \dot{\psi}_{(\vec{r},t)} d^3 r \end{aligned}$$

In den letzten beiden Integralen ersetze man die Zeitableitung der Wellenfunktion mit Hilfe der Schrödinger-Gleichung:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbb{A} \rangle = \underbrace{\left(\frac{\partial \mathbb{A}_{(\vec{r},t)}}{\partial t} \right)}_{i\hbar} + \int \psi_{(\vec{r},t)}^* [\mathbb{H}, \mathbb{A}] \psi_{(\vec{r},t)} d^3r$$

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:

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

wegen

$$\mathbb{H} = -\frac{\hbar}{2m_0} \Delta + \mathbf{U}_{(r)}$$

gilt:

$$\begin{aligned} \int \Delta\psi^* \mathbb{A}\psi d^3r &= \int \psi^* \Delta\mathbb{A}\psi d^3r \\ \int (\Delta u) v d^3r &= \int u \Delta v d^3r + \int [u \vec{\nabla} v - v \vec{\nabla} u] d^3r \end{aligned}$$

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.

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

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

$$V \vec{\psi}_{(r)} d^3r = 1$$

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

⁵Wenn $\mathbf{U}_{(r)}$ zentra尔斯ymmetrisch ist.

⁶Anthroposophischer Ansatz!

$$\frac{c\hbar k}{\sqrt{v}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{P}_z \left\{ c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\} e^{ikz} + m_0 c^2 \frac{1}{\sqrt{v}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \left\{ c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\} e^{ikz} = \mathbf{E} \vec{\psi}_{(r)}$$

$(\mathbb{P}_z = e^{ikz} = \hbar k e^{ikz} \text{ wegen } \mathbb{P}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z})$

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:

$$\begin{aligned} c\hbar c_2 + m_0 c^2 c_1 &= \mathbf{E}_{c1} \\ c\hbar c_1 + m_0 c^2 c_2 &= \mathbf{E}_{c2} \end{aligned}$$

Oder anders geschrieben:

$$\begin{aligned} c_1 (\mathbf{E} m_0 c^2) + c_2 (-c\hbar k) &= 0 \\ c_1 (-c\hbar k) + c_2 (\mathbf{E} m_0 c^2) &= 0 \end{aligned}$$

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:

$$\underbrace{c_1^2 \mathbf{E}_{kin}^2}_{=(\mathbf{E}-m_0 c^2)^2} = c_2^2 c_2^2 p^2$$

Aus der Normierungsbedingung folgt:

$$c_1^2 = 1 - c_2^2$$

wenn $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} E_{kin}^2 &= c_2^2 (E^2 - m_0^2 c^4 + E_{kin}^2) \\ &= c_2^2 \left[\underbrace{\left(E - m_0 c^2 \right)}_{=K_{kin}} \cdot (E + m_0 c^2) + E_{kin}^2 \right] \\ &= c_2^2 E_{kin} \left[E + \underbrace{E_{kin} m_0 c^2}_{=E} \right] \\ &= c_2^2 E_{kin} 2E \end{aligned}$$

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.

Abbildung 7.1.: Photoelektrischer Effekt in GaAs mit zirkular-polarisiertem Licht

Andererseits erhält man im nichtrelativistischen Grenzfall

$$\hbar k \ll m_0 c$$

bzw.

$$E \approx m_0 c^2$$

oder

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m_0 v^2$$

wegen

$$c_2 = \sqrt{\frac{E_{kin}}{2E}} = \sqrt{\frac{\frac{m_0 v}{2}}{2m_0 c^2}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{v}{c}$$

Polarisierte Elektronen

Man kann jetzt den Erwartungswert des Gesamtdrehimpulses in diesem Zustand eines freien Teilchens untersuchen. Dazu wird der folgende Ausdruck gebildet:

$$\begin{aligned} \langle \vec{J} \rangle &= \int \vec{\psi}_{(r)}^+ \mathbb{J} \vec{\psi}_{(r)} dr^3 \\ &= \underbrace{\int \vec{\psi}_{(r)}^+ \underbrace{\mathbb{L}}_{\mathbb{L}_z = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}} \underbrace{\vec{\psi}_{(r)}}_{\text{Ortsanteil: } e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta}} dr^3}_{=0} + \int \vec{\psi}_{(r)}^+ \mathbb{S} \vec{\psi}_{(r)} dr^3 \end{aligned}$$

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 $c_2 = \sqrt{\frac{E_k in}{2E}}$, so stellt auch dieser Zustand eine Lösung der **Dirac-Gleichung** zu $\mathbf{U}_{(r)} = 0$ dar, aber es ergibt sich

$$\langle J \rangle = -\frac{\hbar}{2} \vec{e}_z$$

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:

$$(\mathbf{E}' \mathbb{U}_{(r)}) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = c \vec{\sigma} \vec{\mathbb{P}} \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (7.23)$$

$$(2m_0 c^2 + \mathbf{E}' \mathbb{U}_{(r)}) \begin{pmatrix} P si_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = c \vec{\sigma} \vec{\mathbb{P}} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (7.24)$$

$$(7.25)$$

Man kann nun folgendes voraussetzen:

$$2m_0c^2 + \mathbf{E}'\mathbf{U}_{(r)} \approx 2m_0c^2$$

wegen $\mathbf{E}' = \mathbf{E} - m_0c^2$ und $2m_0c^2 \gg E'\mathbf{U}_{(r)}$.

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.

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 $\vec{\mathbb{P}} = \mathbb{P} - e\vec{A}_{(r)}$ 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.

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a}) \cdot (\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{\mathbb{I}}(\vec{a} \cdot \vec{b}) + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$$

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.

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ a_z \end{pmatrix}$$

⁷ r_b : Bohrscher-Radius

und

$$b_y = 0$$

Man erhält dann

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \cdot \vec{a}) \cdot (\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) &= \bar{\sigma}_z a_z (\bar{\sigma}_z b_z + \bar{\sigma}_x b_x) \\ &= \bar{1} \underbrace{(a_z b_z)}_{\text{hier speziell } (\vec{a} \cdot \vec{b})} + i \bar{\sigma}_y \underbrace{a_z b_x}_{= (\vec{a} \times \vec{b})_y} \\ &\quad \text{hier speziell: } = i \vec{\sigma} (\vec{a} \times \vec{b}) \end{aligned}$$

wegen $\bar{\sigma}_z \bar{\sigma}_x = i \bar{\sigma}_y$.

Identifiziert man \vec{a}, \vec{b} mit \mathbb{P} so folgt aus Gl. ??:

$$(\vec{\sigma} \mathbb{P}) (\vec{\sigma} \mathbb{P}) = \bar{1} \vec{\mathbb{P}}^2 + i \vec{\sigma} (\mathbb{P} \times \mathbb{P})$$

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.

$$(\vec{\mathbb{P}} \times \mathbb{P}) \vec{\psi} = (-i\hbar) \cdot (-i\hbar) \underbrace{[\vec{\nabla} \times \vec{\nabla}]}_{= \text{rot} \circ \vec{\psi} = \vec{0}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

wegen $\vec{\nabla}(\vec{a}) = \text{rot} \vec{a}$

Man beachte ferner:

$$\vec{\mathbb{P}} \times \vec{A} \vec{\psi} = \underbrace{(\mathbb{P} \times \vec{A}) \psi}_{=-i\hbar \left(\underbrace{\vec{\nabla} \times \vec{A}}_{=_{\text{rot}} \vec{A} = \vec{B}} \right)} + \underbrace{(\vec{\mathbb{P}} \vec{\psi}) \times \vec{A}}_{=-\vec{A} \times \vec{\mathbb{P}} \vec{\psi}}$$

Also wird

$$\frac{1}{2m_0} (\vec{\sigma} \vec{\mathbb{P}}') \cdot (\vec{\sigma} \mathbb{P}') = \bar{1} \cdot \frac{\mathbb{P}'^2}{2m_0} - \frac{e\hbar}{2m_0} \vec{\sigma} \vec{B}$$

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

$$2m_0 c^2 + \mathbf{E}' - \mathbf{U}_{(r)} \approx 2m_0 c^2$$

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:

$$(\vec{\sigma} \mathbb{P}) \frac{\mathbf{E}' - \mathbf{U}_{(r)}}{2m_0c^2} (\vec{\sigma} \vec{\mathbb{P}}) = \frac{\mathbf{E}'}{2m_0c^2} \underbrace{(\vec{\sigma} \vec{\mathbb{P}}) (\vec{\sigma} \mathbb{P})}_{=\mathbb{P}^2} - \frac{1}{2m_0c^2} (\vec{\sigma} \vec{\mathbb{P}}) \mathbf{U}_{(r)} (\vec{\sigma} \vec{\mathbb{P}})$$

⁸Wegen $\frac{1}{1+q} \approx 1 - q$ für $q \ll 1$.

⁹Wenn das zugehörige Magentfeld ein durch $A_{(r)}$ realisiertes äußeres Feld darstellt.

Nebenrechnung 1 (Nebenrechnung):

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \vec{P}) \mathbf{U}_{(r)} (\vec{\sigma} \vec{P}) &= -i\hbar (\vec{\sigma} \vec{\nabla} \mathbf{U}_{(r)}) (\vec{\sigma} \vec{P}) \\ &= -i\hbar \vec{\nabla} \mathbf{U} \mathbb{P} - i^2 \sigma \hbar (\vec{\nabla} \mathbf{U} \times \mathbb{P}) \end{aligned}$$

Wegen $\vec{\nabla} \mathbf{U} = -e \vec{\mathbf{E}}$ ergibt sich somit

$$(\vec{\sigma} \vec{P}) \mathbf{U}_{(r)} (\vec{\sigma} \vec{P}) = -\vec{\sigma} e \hbar (\vec{\mathbf{E}} \times \vec{P}) - i \hbar (\vec{\nabla} \mathbf{U} \mathbb{P})$$

Die Gleichung 7.28 kann dann auf die folgende Form gebracht werden

$$\mathbf{E}' \left(1 + \frac{\mathbb{P}^2}{4m_0^2 c^2} \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \left[\frac{1}{2m_0} \vec{P}^2 + \mathbf{U}_{(r)} - \mu_b \vec{\sigma} \vec{B} + \frac{(\vec{\sigma} \vec{P}) \mathbf{U}_{(r)} (\vec{\sigma} \vec{P})}{4m_0^2 c^2} \right] \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (7.29)$$

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.

$$\mathbf{E}' \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \left[\left(1 - \frac{\mathbb{P}}{4m_0^2 c^2} \right) \left(\frac{1}{2m_0} \vec{P}^2 + \mathbf{U}_{(r)} - \mu_b \vec{\sigma} \vec{B} + \frac{(\vec{\sigma} \vec{P}) \mathbf{U}_{(r)} (\vec{\sigma} \vec{P})}{4m_0^2 c^2} \right) \right] \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (7.30)$$

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.

$$\sum_{i=1}^4 \int |\psi_{i_{(r)}}|^2 d^3r = 1$$

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**

$$\vec{\psi}_{0_{(r)}} = \begin{pmatrix} \psi_{1_{(r)}}^0 \\ \psi_{2_{(r)}}^0 \end{pmatrix}$$

mit folgender Eigenschaft ein:

$$\int \vec{\psi}_0^+ \vec{\psi} d^3r = 0 = \sum_{i=1}^2 |\psi_{i_{(r)}}^0|^2$$

Man führe $\psi_{(r)}^0$ versuchsweise über folgende Vorschruft 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

$$\begin{aligned} \int \vec{\psi}^+ \vec{\psi} d^3r &= \int (\mathbb{O}^{-1} \vec{\psi}_0^+) \cdot (\mathbb{O}^{-1} \vec{\psi}_0) dr^3 \\ &= \int \vec{\psi}_0^+ \mathbb{O}^{-2} \vec{\psi}_0 dr^3 \\ &\approx \int \vec{\psi}_0^+ \left(1 - \frac{\mathbb{P}}{2m_0 c^2} \right) \vec{\psi}_0 dr^3 \Rightarrow \left(\frac{\mathbb{P}}{2m_0 c^2} \rightarrow \text{vernachlässigt} \right) \end{aligned}$$

$$1 - \frac{\langle \mathbb{P} \rangle}{2m_0c^2} = N \quad (\text{Norm des Spinors})$$

$$= \int (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) dr^3$$

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

$$\int (|\psi_{1(i)}^0|^2 + |\psi_{2(i)}^0|^2) dr^3 = 1$$

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:

$$\vec{\psi}^+ \vec{\psi} = \left(\underbrace{\sqrt{N} \psi_{12}^{+0}}_{= \vec{\psi}_{12}^+}, \underbrace{\sqrt{N} \vec{\mathbb{P}}^* \psi_{12}^{0+} \frac{\bar{\sigma}^+}{2m_0 c}}_{\vec{\psi}_{34}^+} \right) \begin{pmatrix} \sqrt{N} \vec{\psi}_{12}^0 \\ \sqrt{N} \bar{\bar{f}} \vec{\psi}_{12}^0 \end{pmatrix}$$

mit

$$\vec{\psi}^+ \vec{\psi} = (\vec{\psi}_{12}^+, \vec{\psi}_{34}^+) \begin{pmatrix} \vec{\psi}_{12} \\ \vec{\psi}_{34} \end{pmatrix}$$

und

$$\bar{\bar{f}} = \frac{1}{2m_0 c} (\vec{\text{sigma}} \vec{\mathbb{P}})$$

Dabei wurde berücksichtigt: $(\bar{a} \bar{c})^+ = \bar{c})^+ \bar{a}^+$

Also wird

8. Quantenmechanik nichtrelativistischer Mehrteilchensysteme

To Do 16 (Kapitel / Section fehlt noch.):

8.1. Die Schrödinger-Gleichung für N wechselwirkende nichtrelativistische Teilchen

To Do 17 (Kapitel / Section fehlt noch.):

8.2. N nichtwechselwirkende Teilchen

To Do 18 (Kapitel / Section fehlt noch.):

8.3. Das Pauli-Prinzip

To Do 19 (Kapitel / Section fehlt noch.):

8.4. Das Hartreesche Näherungsverfahren zur Bestimmung der N-Teilchen-Wellenfunktion

To Do 20 (Kapitel / Section fehlt noch.):

8.5. Antisymmetrisierung der Wellenfunktion. Slater-Determinante und Entwicklungen nach Slater-Determinanten (CI-Entwicklung)

To Do 21 (Kapitel / Section fehlt noch.):

8.6. Das Näherungsverfahren von Hartree und Fock

To Do 22 (Kapitel / Section fehlt noch.):

8.7. Zusammenhang zwischen der Gesamtenergie und den Einteilchenenergien

To Do 23 (Kapitel / Section fehlt noch.):

8.8. Das Theorem von Koopmans

To Do 24 (Kapitel / Section fehlt noch.):

9. Störungstheorie

To Do 25 (Kapitel / Section fehlt noch.):

9.1. Diracsche Störungstheorie. Fermis „Goldene Regel“ der Quantenmechanik

To Do 26 (Kapitel / Section fehlt noch.):

9.2. Zeitabhängige Störungsrechnung 2. Ordnung

To Do 27 (Kapitel / Section fehlt noch.):

9.3. Schrödingersche (zeitunabhängige) Störungstheorie

To Do 28 (Kapitel / Section fehlt noch.):

9.4. Zeitunabhängige Störungstheorie bei Anwesenheit von Entartungen

To Do 29 (Kapitel / Section fehlt noch.):

9.5. Aufspaltung von zwei miteinander entarteten Zuständen in einem Störpotential

To Do 30 (Kapitel / Section fehlt noch.):

10. Das statistische Atommodell von Thomas und Fermi

To Do 31 (Kapitel / Section fehlt noch.):

10.1. Die Thomas-Fermi-Dirac-Methode

To Do 32 (Kapitel / Section fehlt noch.):

11. Das Periodensystem der Elemente

To Do 33 (Kapitel / Section fehlt noch.):

11.1. Die Greensche-Funktion einer linearen Differentialgleichung 2. Ordnung und das Additionstheorem der Kugelflächenfunktionen

To Do 34 (Kapitel / Section fehlt noch.):

11.2. Der Schalenaufbau der Atome

To Do 35 (Kapitel / Section fehlt noch.):

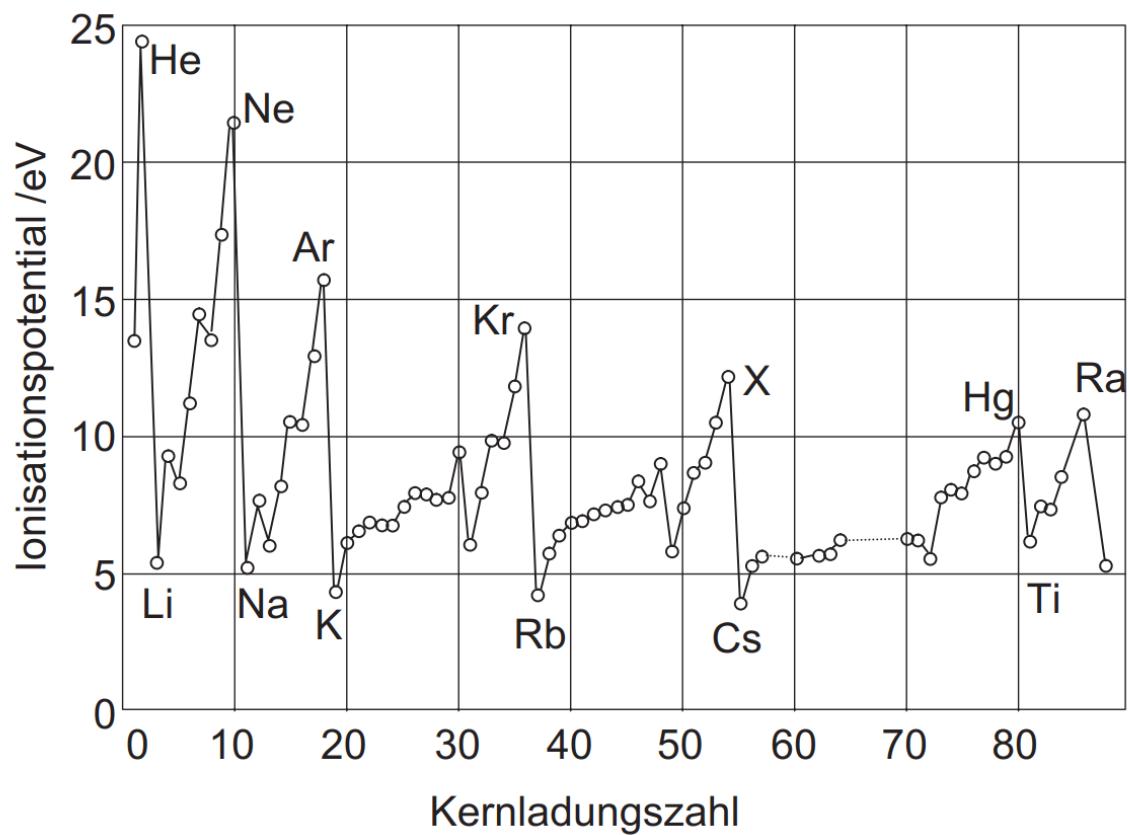


Abbildung 11.1.: Ionisierungsenergien.

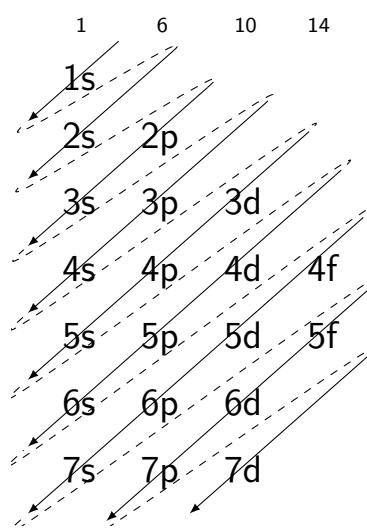


Abbildung 11.2.: Schema zur Bestimmung der Elektronenkonfiguration der Elemente.

12. Elastische Streuung (Potentialstreuung) von Teilchen an Streuzentren

To Do 36 (Kapitel / Section fehlt noch.):

12.1. Die Bornsche Reihe

To Do 37 (Kapitel / Section fehlt noch.):

12.2. Entwicklung einer ebenen Welle nach Kugelwellen steigender Ordnung

To Do 38 (Kapitel / Section fehlt noch.):

12.3. Die Faxen-Holtsmark-Formel für die Streuung eines Teilchens an einem Potential endlicher Reichweite

To Do 39 (Kapitel / Section fehlt noch.):

12.4. Totaler und differentieller Wirkungsquerschnitt eines Streupotentials

To Do 40 (Kapitel / Section fehlt noch.):

12.5. Streuphasen

To Do 41 (Kapitel / Section fehlt noch.):

12.6. Streuung am Yukawa-Potential — Die Rutherford-Formel

| |
|---|
| To Do 42 (Kapitel / Section fehlt noch.): |
|---|

13. Die Feinstruktur der optischen Spektren

To Do 43 (Kapitel / Section fehlt noch.):

13.1. Der Effekt der Spin-Bahnkopplung — Optische Dubletts

To Do 44 (Kapitel / Section fehlt noch.):

13.2. Der anormale Zeeman-Effekt

To Do 45 (Kapitel / Section fehlt noch.):

13.3. Der Paschen-Back-Effekt

To Do 46 (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. 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)

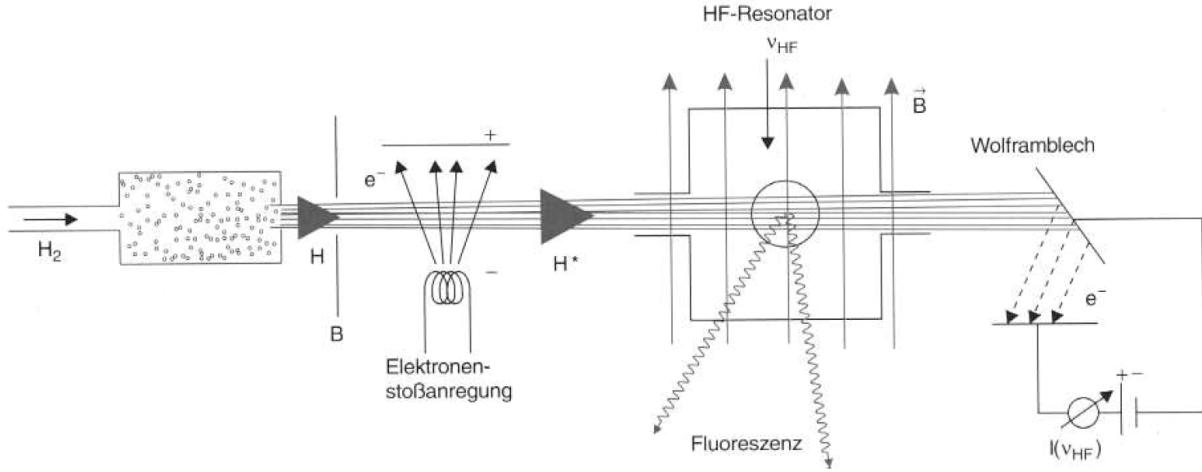


Abbildung 14.1.: Experimentelle Anordnung zur Bestimmung der Lamb-Verschiebung.

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 geschen 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. Einige Begriffe und Definitionen aus der Wahrscheinlichkeitsrechnung

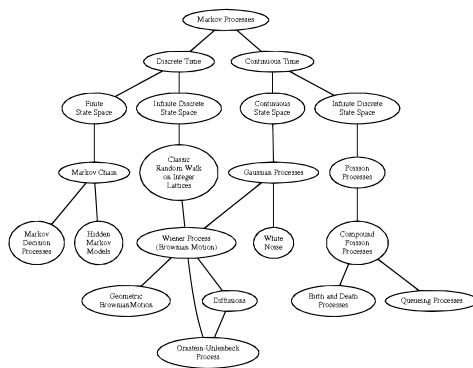


Abbildung 15.1.: Aufbau der Stochastik.

Anmerkung 25 (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:

$$\omega_{(v_\nu)} \propto e^{-\frac{m_0 v_\nu^2}{2k_B T}} \quad (15.1)$$

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 $\frac{m_0}{2} v_\nu^2$ 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 16.0.3 diskutiert wird.

Stochastische Teilchensysteme, Zufallsgesetze, Markoffsche Kette

To Do 47 (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

$$r_N = \frac{n_\nu}{N} = \frac{n_{(a_\nu)}}{N} \quad (15.3)$$

die *relative Häufigkeit* für den Wert a_ν der Größe a . Man schreibt statt r_n auch ausführlicher $r_{N_{(a_\nu)}}$.

Man beachte:

$$0 \leq r_{N_{(a_\nu)}} \leq 1 \quad (15.4)$$

und wegen $\sum_\nu n_\nu = 1$:

$$\sum_\nu r_{N_{(a_\nu)}} = 1 \quad (15.5)$$

Anmerkung 26 (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:

$$\sum_{\nu} W_{(a_{\nu})} = 1 \quad (15.6)$$

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 15.4 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 15.5 gilt:

$$\sum_\nu \mathcal{W}_{(a_\nu)} = 1 \quad (15.7)$$

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:

$$r_{N_{(a_\nu, b_\mu)}}^P = r_{N(a_\nu)} \cdot r_{N(b_\mu)} \quad (15.8)$$

Für die relative Häufigkeit, daß in N -Versuchen für a entweder der Wert a_ν oder der Wert a_μ gefunden wird, gilt:

$$r_{N_{(a_\nu, b_\mu)}}^S = r_{N(a_\nu)} + r_{N(b_\mu)} \quad (a_\nu \neq a_\mu) \quad (15.9)$$

und daher ist:

$$\mathcal{W}_{p(a_\nu, b_\mu)} = \mathcal{W}_{(a_\nu)} \cdot \mathcal{W}_{(b_\mu)} \quad (15.10)$$

$$\mathcal{W}_{s(a_\nu, b_\mu)} = \mathcal{W}_{(a_\nu)} + \mathcal{W}_{(b_\mu)} \quad (15.11)$$

Der **Mittelwert** von a (oder **Erwartungswert**) ist definiert durch:

$$\langle a \rangle = \text{Häufungspunkt von } \left\{ \sum_\nu r_{n(a_\nu)} \cdot a_\nu \right\} \quad (15.12)$$

also:

$$\langle a \rangle = \sum_\nu \mathcal{W}_{(a_\nu)} \cdot a_\nu \quad (15.13)$$

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:

$$\langle f \rangle = \sum_{\nu} \mathcal{W}_{(a_{\nu})} \cdot f(a_{\nu}) \quad (15.14)$$

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:

$$r_N(a_{\nu}) = \frac{n_{\nu}}{N} \quad (15.15)$$

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:

$$\mathcal{W}_{(a_{\nu})} = \mathfrak{w}_{(a_{\nu})} \Delta a_{\nu} \quad (15.16)$$

Für genügend kleine Δa_{ν} (exakt $\lim_{\Delta a_{\nu} \rightarrow 0}$) lauten die Formeln 15.7, 15.13 und 15.14:

$$\int \mathfrak{w}_{(a)} da = 1 \quad (15.17)$$

$$\langle a \rangle = \int \mathfrak{w}_{(a)} a da \quad (15.18)$$

$$\langle f \rangle = \int \mathfrak{w}_{(a)} f_{(a)} da \quad (15.19)$$

Sei speziell

$$f_{(a)} = (a - \langle a \rangle)^2 \quad (15.20)$$

ein Maß für die Abweichung vom **Mittelwert**. Dann heißt der Ausdruck:

$$\langle f_{(a)} \rangle = \langle (a - \langle a \rangle)^2 \rangle \quad (15.21)$$

$$= \int \mathfrak{w}_{(a)} (a - \langle a \rangle)^2 da \quad (15.22)$$

mittlere quadratische Abweichung oder mittlere quadratische Schwankung.

Wegen

$$(a - \langle a \rangle)^2 = a^2 + \langle a \rangle^2 - 2\langle a \rangle a \quad (15.23)$$

gilt:

$$\langle (a - \langle a \rangle)^2 \rangle = \langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2 \quad (15.24)$$

Anmerkung 27 (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.

15.2. Brownsche Molekularbewegung

15.2.1. Beschreibung der Diffusion nach Einstein

Stochastische- oder Zufallsprozesse wurden erstmals im Jahre 1905 durch EINSTEIN durch seine Arbeiten zur BRAUNSchen Molekularbewegung auf eine solide theoretische Grundlage gestellt.

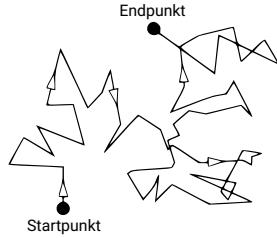


Abbildung 15.2.: Schematische Darstellung der Brownschen Molekularbewegung.

Die BRAUNSCHE-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 BRAUN 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.

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 Zeittdauer eines molekularen Stoßprozesse.

so coarse that it cannot predict what we see.??

Die zweite Annahme rechtfertigt die Beschreibung durch MARKOV-Prozesse. In diesem Zusammenhang 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 Betrag¹ Δ mit einer Wahrscheinlichkeitfunktion $\phi_{(\Delta)}$. Diese ist derart normiert, daß gilt:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{(\Delta)} dx = 1 \quad (15.25)$$

¹Die Beschreibung wird zur Vereinfachung nur eindimensional durchgeführt.

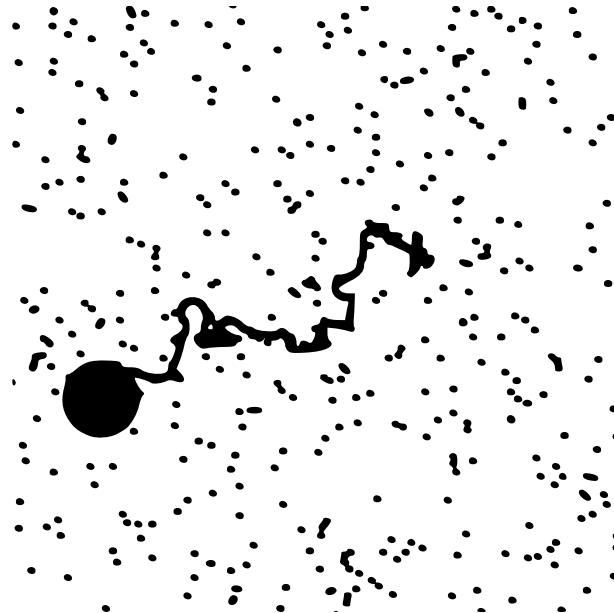


Abbildung 15.3.: Beispiel einer Brownschen Bewegung: Gasmolekül.

Weil τ eine mikroskopische Größe ist, wird $\phi_{(\Delta)}$ nur für mikroskopische Intervalle nahe 0 von Null verschieden sein. Weiterhin gilt die Symmetriebedingung:

$$\phi_{(\Delta)} = \phi_{(-\Delta)} \quad (15.26)$$

Wenn man die Wahrscheinlichkeit, mit der man ein Teilchen an der Position x zur Zeit t antreffen kann, mit $\rho_{(x,t)}$ bezeichnet, so ergibt sich nach Einsteins Hypothese für die Änderung:

$$p_{(x,t+\tau)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{(\Delta)} p_{(x-\Delta,t)} d\Delta \quad (15.27)$$

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:

$$p + \tau \frac{\partial p}{\partial t} = p \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{(\Delta)} d\Delta - \frac{\partial p}{\partial x} \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta \phi_{(\Delta)} d\Delta + \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta^2}{2} \phi_{(\Delta)} d\Delta \quad (15.28)$$

Mittels 15.25 und 15.26 erhält man:

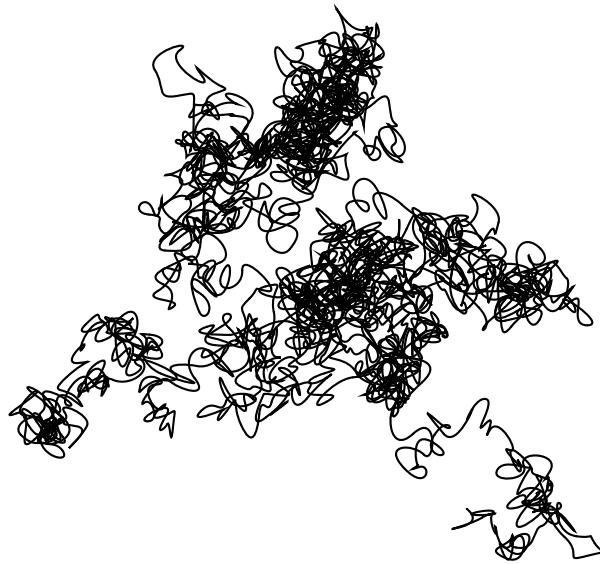


Abbildung 15.4.: Simulation einer Brownschen Bewegung in zwei Dimensionen.

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \quad (15.29)$$

wobei die Konstante D geschrieben werden kann als:

$$D = \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta^2}{2} \phi(\Delta) d\Delta \quad (15.30)$$

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:

$$p_{(x,t+\tau)} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \quad (15.31)$$

Hieraus kann man leicht ableiten:

$$\langle x^2 \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} p_{(x,t+\tau)} x^2 dt = 2Dt \quad (15.32)$$

15.2.2. Beschreibung der Diffusion nach Langevin

Die dynamische Diffusionsgleichung 15.29, 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; 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 (un in gewisser Weise elegantere) Herleitung der Ergebnisse EINSTEINS erzielte.

Als Ausgangspunkt kann die Differentialgleichung, die die Geschwindigkeit v eines Teilchens beschreibt, benutzt werden:

$$\dot{v} = -\gamma v + \frac{1}{m_0} F_{(t)} \quad (15.33)$$

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 mächtsten vorhersagbar
3. im stationären Zustand soll gelten:

$$\langle v^2 \rangle = \frac{k_b T}{m_0} \quad (15.34)$$

Die letzte Annahme wird notwendig durch den Gleichverteilungssatz der Thermodynamik welches besagt, daß $\langle \frac{1}{2}mv^2 \rangle = \frac{1}{2}k_bT$ ist.

In Termen von x kann die Gleichung 15.33 umgeschrieben werden in:

$$\ddot{x} = -\gamma \dot{x} + \frac{1}{m_0} F_{(t)} \quad (15.35)$$

Multipliziert man beide Seiten mit $2x$ so erhält man:

$$\frac{\partial^2 x^2}{\partial t^2} - 2\dot{x}^2 = -\gamma \frac{\partial x^2}{\partial t} - \frac{2x}{m_0} F_{(t)} \quad (15.36)$$

Werden nun die Mittelwerte beider Seiten gebildet, so erhält man unter Verwendung von 15.34:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle x^2 \rangle + \gamma \frac{\partial}{\partial t} \langle x^2 \rangle = \frac{2k_bT}{m_0} + \frac{2}{m_0} \langle F_{(t)} \rangle \quad (15.37)$$

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:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle x^2 \rangle + \gamma \frac{\partial}{\partial t} \langle x^2 \rangle = \frac{2k_bT}{m_0} \quad (15.38)$$

Durch Einsetzen kann einfach gezeigt werden, daß die folgende Gleichung eine Lösung dieser Differentialgleichung darstellt.

$$\langle x^2 \rangle_t = \langle x^2 \rangle_0 = \frac{2k_bT}{m_0 \gamma} t + c (1 - e^{-\gamma t}) \quad (15.39)$$

Für lange Zeiten geht diese Gleichung in die Gleichung 15.32 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. 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.

15.3.1. 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.

15.3.2. Zufallsvariablen

Wenn ein stochastischer Prozeß in einem physikalischen System beschrieben wird, sind die zugrundeliegenden Prozesse verborgen. Zum Beispiel in der Beschreibung der BRAUNSchen 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. 112??)

15.3.3. Multivariate und bedingte Wahrscheinlichkeitenabilities

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.

15.3.4. 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:

$$\phi_{(\vec{s})} = \langle e^{i\vec{s}\vec{X}} \rangle = \int p_{(\vec{x})} e^{-i\vec{x}^T \vec{s}} d^n \vec{x} \quad (15.42)$$

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

$$\phi_{(s_1, s_2, \dots, s_n)} = \phi_{(s_1)} \phi_{(s_2)} \phi_{(s_3)} \dots \phi_{(s_n)}$$

3. Wenn

$$Y = \sum_{j=1}^n X_j$$

und

$$\phi_{j(s)} = \langle e^{isX_j} \rangle$$

ist, so ergibt sich für die Variable Y :

$$\phi_{(s)} = \langle e^{isY} \rangle = \prod_{j=1}^n \phi_{j(s)}$$

15.4. Einige wichtige Verteilungsfunktionen

15.4.1. 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

$$\langle X_1^4 \rangle = \frac{4!}{2! \cdot 4} (V_{11}^2) = 3V_{11}^2$$

15.5. Noch nicht einsortiert

Ergodizität

Für ergodische Systeme gilt:

$$\text{Scharmittel} = \text{Zeitmittel}$$

$$\begin{aligned}\langle G \rangle &= \int \mu_{(x)} G_{(x)} dx \\ &= \int G_{(x)} dt \\ &= \sum G_{(x(t))} dt\end{aligned}$$

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 Messswerten 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 Unsicherheit² 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-Verteilt³, 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.

²Der Begriff *Fehler* ist, wie schon gesagt zu vermeiden

³unabhängig 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- oder Lorentz-Verteilung 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-zahlwerten Variablen durch die einparametrische Poisson-Verteilung ⁴ 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

$$\langle n(n-1)\cdots(n-r+1) \rangle = \left[\left(\frac{\partial G_{(s)}}{\partial s} \right)^r \right]_{s=1} \quad (15.54)$$

⁴Die Poisson-Verteilung wird hier nur wegen der Vollständigkeit aufgenommen. Für die Betrachtungen und Herleitungen zur Stochastischen Mechanik ist sie nicht relevant.

hier fehlt noch etwas

Definieren man eine die gemeinsame Verteilung:

$$p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots)$$

und die bedingte Verteilung:

$$p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots \| \mu_1, \tau_1; \mu_2, \tau_2; \dots) = \frac{p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; \mu_1, \tau_1; \mu_2, \tau_2; \dots)}{p(\mu_1, \tau_1; \mu_2, \tau_2; \dots)} \quad (15.55)$$

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:

$$p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) = \prod_i p(x_i, t_i) \quad (15.56)$$

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

$$p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n) = p(x_1, t_1 + \epsilon; x_2, t_2 + \epsilon; \dots; x_n, t_n + \epsilon) \quad (15.57)$$

daher sind solche Wahrscheinlichkeiten nur Funktionen der Zeitdifferenz $t_i - t_j$. Die Wahrscheinlichkeiten sind somit zeitunabhängig:

$$p(x, t) = p_s(x)$$

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:

$$G(t, \tau) = \langle x_{(t)} x_{(t+\tau)} \rangle \quad (15.58)$$

$$= \iint p_{(x_1, t; x_2, t+\tau)} x_1 x_2 dx_1 dx_2 \quad (15.59)$$

Bei stationären Systemen hängt die Funktion nur von τ ab und wird als daher mit $G(\tau)$ bezeichnet.

Die reduzierte Autokorrelationsfunktion ist definiert als:

$$R_{(t, \tau)} = \langle x_{(t)} x_{(t+\tau)} \rangle \quad (15.60)$$

$$= G_{(t, \tau)} - \langle x_{(t)} \rangle \langle x_{(t+\tau)} \rangle \quad (15.61)$$

Für stationäre Systeme kann ein entsprechendes Spektrum definiert werden ⁵:

$$S_{(\omega)} = \int G_{(\tau)} e^{-i\omega\tau} dt \quad (15.62)$$

$$= 2 \int_0^\infty G_{(\tau)} \cos(\omega\tau) dt \quad (15.63)$$

Entsprechend kann man für die Fourier-transformierte Variable schreiben:

$$\tilde{x}_{(\omega)} = \int x_{(t)} e^{-i\omega t} dt \quad (15.64)$$

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-Kitchin-Theorems.

⁵Hier 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:

$$\frac{1}{T} \int_0^T \dots dt$$

Als einfaches Beispiel betrachtet man

$$\bar{x}_{(T)} = \frac{1}{2T} \int_{-T}^T x_{(t)} dt \quad (15.65)$$

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:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \langle \bar{x}_{(T)} \rangle = \langle x \rangle_s \quad (15.66)$$

Die Varianz kann dabei wie folgt berechnet werden:

$$\langle \bar{x}_{(T)} \rangle^2 = \frac{1}{4T^2} \iint_{-T}^T \langle x_{(t_1)} x_{(t_2)} \rangle dt_1 dt_2 \quad (15.67)$$

Wenn dieser Prozess stationär ist, kann man schreiben

$$\langle x_{(t_1)} x_{(t_2)} \rangle = R_{(t_1 - t_2)} + \langle x \rangle^2 \quad (15.68)$$

wobei R die reduzierte Zwei-Zeit-Korrelationsfunktion ist. Daher wird

$$\langle \bar{x}_{(T)}^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{1}{4T^2} \iint_{-2T}^{2T} R_{(\tau)} (2T - |\tau|) d\tau \quad (15.69)$$

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:

$$\int_0^\infty \|R_{(t)}\| dt \leq \infty \quad (15.70)$$

d.h. die Funktion $\langle x_{(t_1)}, x_{(t_2)} = R_{(t_1-t_2)}$ wird schnell gegen Null konvergieren, wenn $|t_1 - t_2| \rightarrow \infty$ ist.

In vielen Fällen kann man feststellen, dass folgendes gilt:

$$R_{(\tau)} = A \cdot e^{-\tau/\tau_c} \quad (15.71)$$

wobei τ_c die Korrelationszeit ist. In diesem Fall kann man schreiben

$$m.s. - \lim_{T \rightarrow \infty} \bar{x}_{(\tau)} = \langle x \rangle_s \quad (15.72)$$

so dass das Mittelwertbildung gültig ist. Hier ist das m.s.-Limit definiert als eine Folge von Zufallsvariablen Y_n :

$$m.s. - \lim_{n \rightarrow \infty} Y_n = Y \quad (15.73)$$

Dies bedeutet, dass

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle (Y_n - Y)^2 \rangle = \quad (15.74)$$

Weitere Funktionen können analog definiert werden, zum Beispiel die Autokorrelationsfunktion:

$$G_{(\tau)} = \frac{1}{T} \int_0^T x_{(t)} x_{(t+\tau)} dt \quad (15.75)$$

Man kann wie oben zeigen, dass

$$m.s. - \lim_{T \rightarrow \infty} G_{(\tau)} = \langle x_{(t)} x_{(t+\tau)} \rangle_s dt \quad (15.76)$$

Hier wird vorausgesetzt, dass der Durchschnitt

$$\langle x_{(t+\lambda+\tau)} x_{(t+\lambda)} x_{(t+\tau)} x_{(t)} \rangle_s$$

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

$$S_{(\omega)} = \int e^{-i\omega\tau} G_{(\tau)} d\tau$$

Völlig analog den obigen Erläuterungen folgt dann:

$$S_{(\omega)} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} |e^{-i\omega t} x(t)|^2 dt$$

15.7. Markow-Prozesse

Markow-Eigenschaften

Die Behandlung vieler stochastischer Prozesse wird stark vereinfacht, wenn man die Markov-Eigenschaft 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:

$$p_{(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n)} p(x_1, t_1 | x_2, t_2) p(x_2, t_2 | x_3, t_3) \dots p(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}) \quad (15.77)$$

mit

$$t_1 \geq t_2 \geq t_3 \dots \geq t_n \geq t_n$$

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. 15.78 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-Kolmogorow-Gleichung die folgende Form an

$$p(x_1, t_1 | x_3, t_3) = \sum p(n_1, t_1 | n_2, t_2; n_3, t_3) \cdot p(n_2, t_2 | n_3, t_3) \quad (15.78)$$

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. Gleches 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 ändert⁶. 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:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|x| \geq \epsilon} p_{(x, t + \Delta t | z, t)} dx = 0 \quad (15.79)$$

Das heißt, dass die Wahrscheinlichkeit, dass sich die Endposition von der Anfangsposition unterscheidet schneller schneller gegen Null konvergiert als Δt .

⁶Zumindest in erster Näherung, da natürlich $dv/dt \neq \infty$ gelten muss.

Differenzielle Chapman-Kolmogorow-Gleichung

Unter geeigneten Bedingungen kann die Chapman-Kolmogorow-Gleichung durch eine Differentielform⁷ ersetzt werden. Die Anforderungen sind $\forall \epsilon > 0$:

- Die Gleichung

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{p_{(\vec{x}, t + \Delta t | \vec{z}, t)}}{\Delta t} = W_{(vecx | \vec{z}, t)}$$

konvergiert gleichmäßig in x, z und t für alle $|\vec{x} - \vec{z}| \geq \epsilon$

- Es gilt

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\vec{x} - \vec{z}| < \epsilon} (x_i - z_i) p_{(\vec{x}, t + \Delta t | \vec{z}, t)} d\vec{x} = A_{i(\vec{z}, t)} + O_{(\epsilon)}$$

- und weiterhin

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\vec{x} - \vec{z}| < \epsilon} (x_i - z_i) \cdot (x_j - z_j) \cdot p_{(\vec{x}, t + \Delta t | \vec{z}, t)} d\vec{x} = B_{ij(\vec{z}, t)} + O_{(\epsilon)}$$

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

$$C_{ijk} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\vec{x} - \vec{z}| < \epsilon} (x_i - z_i) \cdot (x_j - z_j) \cdot (x_k - z_k) \cdot p_{(\vec{x}, t + \Delta t | \vec{z}, t)} d\vec{x}$$

Nach der Definition 15.79 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 $f_{(\vec{x})}$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f_{(\vec{x})} p_{(\vec{x}, t | \vec{y}, t')} d\vec{x} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left(\int f_{(\vec{x})} (p_{(\vec{x}, t + \Delta t | \vec{y}, t')} p_{(\vec{x}, t | \vec{y}, t')}) d\vec{x} \right) \quad (15.80)$$

$$= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left(\iint f_{(\vec{x})} p_{(\vec{x}, t + \Delta t | \vec{z}, t)} p_{(\vec{z}, t | \vec{y}, t')} d\vec{x} d\vec{z} - \int f_{(\vec{x})} p_{(\vec{x}, t + \Delta t | \vec{y}, t')} d\vec{x} \right) \quad (15.81)$$

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:

$$f_{(\vec{x})} = f_{(\vec{z})} + \sum_i (x_i - z_i) \frac{\partial f}{\partial z_i} + \sum_{ij} \frac{1}{2} (x_i - z_i) (x_j - z_j) \frac{\partial^2 f}{\partial z_i \partial z_j} \quad (15.82)$$

⁷In der Zeit.

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:

Formel überprüfen

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int f_{(\vec{z})} p_{(\vec{z}, t | \vec{y}, t)} d\vec{z} &= \int \left(p_{(\vec{z}, t | \vec{x}, t)} \left(\sum_i A_{i(\vec{z}, t)} \frac{\partial f_{(\vec{z})}}{\partial z_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij(\vec{z})} \frac{\partial^2 f_{(\vec{z})}}{\partial z_i \partial z_j} \right) \right. \\ &\quad \left. + \int_{\vec{z}}' f_{(\vec{z})} [W_{(\vec{z} | \vec{x}, t)} p_{(\vec{x}, t | \vec{y}, t')} - W_{(\vec{x} | \vec{z}, t)} p_{(\vec{z}, t | \vec{y}, t')}] d\vec{x} \right) d\vec{z} \end{aligned}$$

In der Gleichung wurde dabei folgende Abkürzung verwendet:

$$\int_{\vec{x}}' \cdots d\vec{x} = \lim_{\text{epsilon} \rightarrow 0} \int_{|\vec{x} - \vec{z}| > \epsilon} \cdots d\vec{x}$$

Nun integrieren kann man über die einzelnen Terme integrierten. Angenommen, dass $f_{(\vec{z})}$ verschwindet, bevor man die Grenzen des Bereichs von \vec{z} erreicht, dann verschwinden die Oberflächenterme und man erhält:

Formel überprüfen

$$\int f_{(\vec{z})} \frac{\partial}{\partial t} p_{(\vec{z}, t | \vec{y}, t)} d\vec{z} = \int f_{(\vec{z})} \left(\left[- \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} A_{i(\vec{z}, t)} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} B_{ij(\vec{z})} \right] + \int_{\vec{z}}' [W_{(\vec{z} | \vec{x}, t)} p_{(\vec{x}, t | \vec{y}, t')} - W_{(\vec{x} | \vec{z}, t)} p_{(\vec{z}, t | \vec{y}, t')}] d\vec{x} \right) d\vec{z} \quad (15.83)$$

Da $f_{(\vec{z})}$ sonst willkürlich wird, kann man folgern, dass

$$\frac{\partial p_{(\vec{z}, t | \vec{y}, t')}}{\partial t} = \left[- \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} A_{i(\vec{z}, t)} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} B_{ij(\vec{z})} \right] p_{(\vec{z}, t | \vec{x}, t')} + \int [W_{(\vec{z} | \vec{x}, t)} p_{(\vec{x}, t | \vec{y}, t')}] d\vec{x} \quad (15.84)$$

In der Gleichung 15.84 wurde $\int' \cdot$ durch $\int \cdot$ 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 15.84 zeitunabhängig sind. Die stationäre Verteilungsfunktion wird dann als die stationäre Lösung von Gleichung 15.84 definiert, folgender Beziehung erfüllt ist:

$$\frac{dp_s}{dt} = 0$$

Gilt weiterhin

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} p_{(x, \tau|x_0)} = p_{s(x)}$$

dann wird der Prozess als ergodisch bezeichnet. Dies ist oft⁸ 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 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

$$\langle \vec{X}_{(t)} | [\vec{x}_0, t_0] \rangle = \int p_{(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0)} \vec{x} d\vec{x} \quad (15.85)$$

und die Autokorrelationsmatrix

$$\langle \vec{X}_{(t)} \vec{X}_{(t)}^T \rangle = \int \vec{x} \vec{x}_0^T p_{(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0)} d\vec{x} d\vec{x}_0 \quad (15.86)$$

$$= \int \langle \vec{X}_{(t)} | [\vec{x}_0, t_0] \rangle \vec{x}_0^T p_{(t_0 | \text{vec}x_0, t_0)} \vec{x}_0 \quad (15.87)$$

Die Definition 15.85 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.

⁸Aber nicht immer.

Insbesondere gilt: Das stationäre bedingte Mittel der obigen Korrelationsfunktion ist für einen Markov-Prozess gegeben als:

$$\langle \vec{X}_{(t)} | [\vec{x}_0, t_0] \rangle_s = \langle \vec{X}_{(t)} | [\vec{x}_0, t_0] \rangle \quad (15.88)$$

Daher ergibt Gleichung 15.86 die *stationäre Autokorrelationsfunktion*.

15.9.1. Lineares Regressionstheorem

Nimmt man an, dass

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{X}_{(t)} | [\vec{x}_0, t_0] \rangle = -\mathbf{A} \langle \vec{X}_{(t)} | [\vec{x}_0, t_0] \rangle \quad (15.89)$$

mit der Anfangsbedingung

$$\langle X_{(t_0) | [\vec{x}_0, t_0]} \rangle = \vec{x}_0$$

gilt, dann ergibt sich

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{X}_{(t)}$$

mit der Anfangsbedingung $\langle \vec{X}_{(t)} \vec{X}_{(t_0)}^T \rangle$

Wenn man nun die reduzierte Zwei-Zeit-Korrelationsfunktion definiert:

$$\mathbf{R}_{(\tau)} = \langle$$

dann hat diese die folgende Lösung:

$$\mathbf{R}_{(\tau)} = e^{-\mathbf{A}\tau} \mathbf{V}$$

$$\mathbf{V} = \langle$$

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:

$$\frac{\partial}{\partial t} p_{(\vec{z}, t) | \vec{y}, t} = \int [W_{(\vec{z} | \vec{x}, t)} p_{(\vec{x}, t) | \vec{y}, t} W_{(\vec{x} | \vec{z}, t)} p_{(\vec{z}, t) | \vec{y}, t}] d\vec{x}$$

Diese Gleichung wird in erster Ordnung in Δt für die Anfangsbedingung

$$p_{(\vec{z}, t) | \vec{y}, t} = \delta(\vec{y} - \vec{z})$$

gelöst. Dies ergibt dann:

$$p_{(\vec{z}, t + \Delta t) | \vec{y}, t} = \delta_{(\vec{y} - \vec{z})} \left[1 - \Delta t \int W_{(\vec{x} | \vec{z}, t)} d\vec{x} \right] + \Delta t w_{(\vec{z}, t) | \vec{y}, t}$$

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 $W_{(\vec{z} | \vec{y}, t)}$ durchsetzt sind. Für ganzzahlige stochastische Variablen gilt:

$$\frac{\partial}{\partial t} P_{(\vec{n}, t) | \vec{n}', t'} = \sum_{\vec{m}} W_{(\vec{n} | \vec{m}, t)} P_{(\vec{m}, t) | \vec{n}', t'} W_{(\vec{m} | \vec{n}, t)} P_{(\vec{n}, t) | \vec{n}', t'}$$

Auf diese Sprungprozesse wird detaillierter in Kap. ?? eingegangen.

16. 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)[176]. 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 [209], 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 [?] [176]. 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.

16.0.1. 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.

16.0.2. Stabilität von Atomen

Die Erklärung von Aufbau, Stabilität und Linienspektren von Atomen war eines der vorrangigsten Arbeitsgebiete der Physik Ende des 19. und Anfang des 20. Jahrhunderts. Ein erster einfacher Ansatz dazu das Bohr-Sommerfeld-sche 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 zwangsläufig

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 dieser Kompendiums sind.

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.

Mit der Quantenmechanik wurde klar, dass sich ein Elektron im Grundzustand des Wasserstoffatoms 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 für die Stabilität von Atomen und die Form des Grundzustands.

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.²

ABBILDUNG FEHLT NOCH!

Abbildung 16.1.: 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.

²Hinweis: Auch bei der hier im Kompendium beschriebenen Herleitung der Schrödinger-Gleichung wurde dieser Umstand stillschweigend vernachlässigt.

Betrachtet man die Form des Grundzustandes, welche in Abb. 16.0.2 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 zentralesymmetrisches 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 28:

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 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.

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. 16.0.2 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 nähernde 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

$$Q_{eff} = e - 4\pi e \int_0^r \rho_{(r)} \vec{r}'^2 d\vec{r}'$$

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 Aufenthaltswahrscheinlichkeit 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 16.2.: 5-5.

16.0.3. 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

$$\overline{\left(\frac{\delta p^2}{2m_0}\right)} = \frac{3}{2} k_b T \quad (16.1)$$

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 16.1 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 :

$$E_{kin} = E_{konv} + \Delta E \quad (16.2)$$

wobei ΔE durch 16.1 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 16.1 in die Definition ?? des Diffusionskoeffizienten ein, so ergibt sich:

$$\Delta E \tau = \frac{3}{4} \cdot 2\nu m_0 \quad (16.3)$$

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

$$\Delta E \tau = \frac{3}{4} \hbar \quad (16.4)$$

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 Zeitspanne τ dieser Schwankung ist gleich $3/4\hbar$.

Auch andere Effekte lassen sich unmittelbar als Folge der Beziehung 16.4 verstehen. Dazu gehören der Tunneleffekt und die Nullpunktsbewegung von Atomen in Molekülen und Festkörpern am absoluten Temperaturnullpunkt. Diese Nullpunktsbewegung, die nach 16.2 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 16.4 auch das Auftreten einer gewissen *Ortsunschärfe* des betrachteten Teilchens unter Wirkung der Vakuumkräfte. Analog zu 16.1 folgt für die Schwankung der x-Komponente des Teilchenimpulses (bei Abwesenheit äußerer Kräfte):

$$\overline{\left(\frac{\delta p_x^2}{2m_0}\right)} = \frac{1}{2}k_b T \quad (16.5)$$

Aufgrund derselben Argumentation wie zuvor ergibt sich dann analog zu 16.4:

$$\frac{\delta p_x^2}{2m_0} \cdot \tau = \frac{\hbar}{4} \quad (16.6)$$

(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 16.6:

$$\Delta p_x \Delta x = \frac{\hbar}{2}$$

Für die y- und z-Koordinaten ergeben sich entsprechende Beziehungen. Zum Abschluß soll ausdrücklich darauf hingewiesen werden, dass die Beziehung 16.4:

$$\Delta E \tau = \frac{3}{4} \hbar$$

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*.

Tunneleffekt

Ein Phänomen, das dem Teilchenverhalten im Doppelspaltexperiment ähnlich verblüffend ist, ist der sogenannte **Tunneleffekt**. Um dies zu erklären, betrachte man Abb. 16.0.3.

ABBILDUNG FEHLT NOCH!

Abbildung 16.3.: Schematische Darstellung des Tunneleffektes.

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

$$\Delta E = E_{(x_a)} - E_{(x_2)}$$

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.³

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.

16.0.4. 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. 16.0.4) für $n = 0$.

ABBILDUNG FEHLT NOCH!

Abbildung 16.4.: Wellenförmige Struktur der Wahrscheinlichkeitsdichten für Teilchen in Potentialen.

In sogenannten angeregten Zuständen mit höherer Energie zeigt die Wahrscheinlichkeitsdichte des betreffenden Teilchens eine wellenförmige Verteilung, wie beispielsweise in Abb. 16.0.4 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 Versuchsbedingungen.

Aus der rein korpuskularstatistischen Sicht der stochastischen Mechanik ergibt sich jedoch das Phänomen einer wellenförmigen Wahrscheinlichkeitsdichte ganz zwangslös. Sehr einfach kann dies am Beispiel des harmonischen Oszillators (Abb. 16.0.4) 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.

³Insgesamt wirken dabei die stochastischen Kräfte im quantenmechanischen Fall so, dass die Energie im zeitlichen Mittel konstant bleibt, also erhalten bleibt.

m Gegensatz dazu hat das Teilchen bei einer klassischen Bewegung in diesem Potential mit der Geschwindigkeit v^4 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 (16.0.2) 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 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.

16.0.5. 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.

⁴Also in einem angeregten Zustand

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 Ruhemasse⁵, elektrischer Ladung. Häufig wird hier auch der Spin genannt. Ob es sich beim Spin um eine intrinische Eigenschaft handelt, hängt von der Interpretation der Quantenmechanik ab. Für die stochastische Mechanik ist der Spin keine intrinische 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 extrinsischen Eigenschaften wie Energie, Impuls, Drehimpuls, Aufenthaltsort durch die Vakuumfluktuationen überlagert werden.

16.0.6. 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, sind 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. 16.0.6). 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.

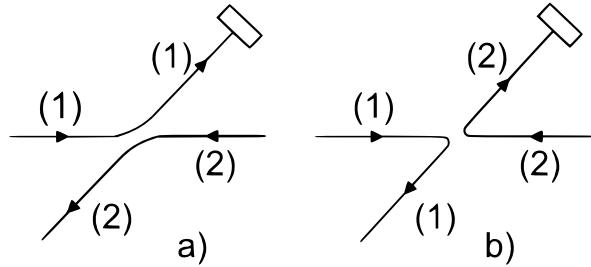


Abbildung 16.5.: Schematische Darstellung der Ununterscheidbarkeit quantenmechanischer Teilchen.

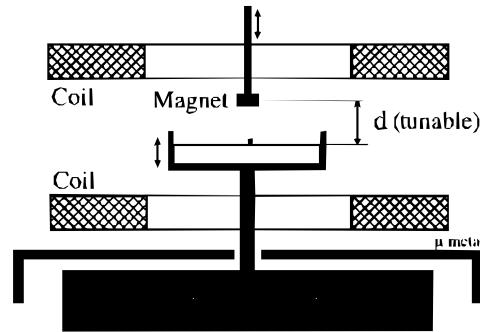


Abbildung 16.6.: Experimenteller Aufbau zur Untersuchung Hydrodynamische Analoga.

16.0.7. Hydrodynamische Analoga der Quantenmechanik

Als hydrodynamische Quantenanaloga⁶ 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

⁵Die Ruhemasse kann auch Null sein (z. B. bei Photonen), allerdings werden diese Teilchen dann nicht durch die (nichtrelativistische) Schrödinger-Gleichung beschrieben.

⁶Wiki: ([Link](#)), ([Link](#))

verschiedene quantenmechanische Phänomene nachahmen, darunter Teilchenbeugung, Quantentunneln, quantisierte Bahnen, den Zeeman-Effekt und das Quantenkorral[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, wodurch 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 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

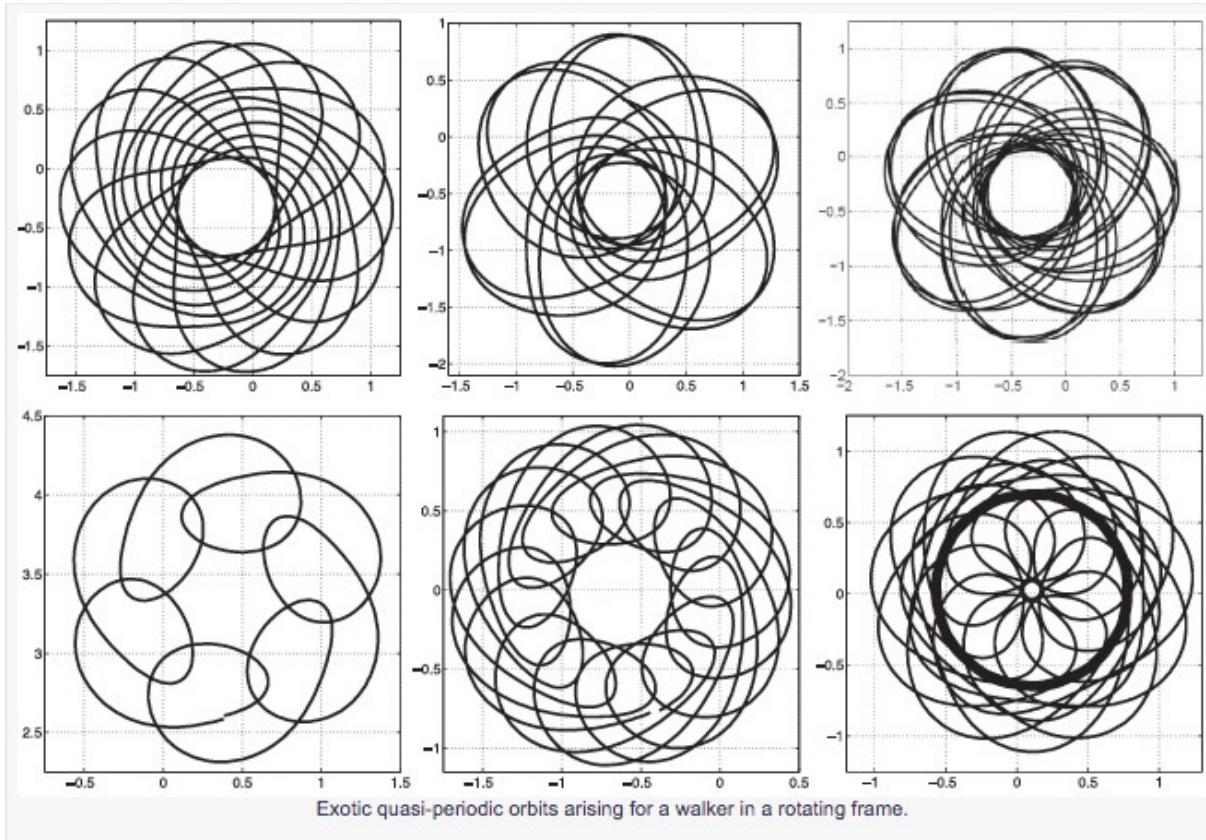


Abbildung 16.7.: Bewegungsmuster eines Tröpfchens auf einer vibrierenden Oberfläche (Quelle: [\(Link\)](#) .

Es wurde festgestellt, dass sich ein wanderndes Tröpfchen auf einem vibrierenden Flüssigkeitsbad analog zu mehreren verschiedenen quantenmechanischen Systemen verhält, nämlich zu Teilchenbeugung, Quantentunneln, quantisierten Umlaufbahnen, dem Zeeman-Effekt und dem Quantenkorral. Einzel- und Doppelspaltbeugung

Seit dem frühen 19. Jahrhundert ist bekannt, dass sich auf einem weit von den Schlitzen entfernten

Bildschirm ein Beugungsmuster zeigt, wenn Licht durch einen oder zwei kleine Schlitze 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 Schlitze 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 Schlitze laufen, ein ähnliches Interferenzverhalten zeigen.[6] 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 Schlitze 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 Doppelspalteperiment 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.[15] Die Tröpfchen liefen in fast geraden Linien durch die Schlitze, und es erschienen keine Streifen.[16] Quanten-Tunnelbau

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 Barrierenbreite 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[8]. 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[7]. 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[9] 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

Forscher haben 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.[10]

17. 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.

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.*

¹Nicht zu verwechseln mit der freien Energie in der Thermodynamik.

²Im Sinne von technisch nutzbaren Energiemengen.

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 eifriger 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 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 Entfernungen 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. Chemie ignoriert werden. Das Versprechen von unendlich viel freier Energie ist verführerisch, mit unsagbaren Reichtümern, die denjenigen erwarten, der sie erreichen kann - ähnlich wie das Versprechen des ewigen Lebens.

³aus: Skeptical Briefs June 1999; Victor J. Stenger

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-Sponsorschaft. 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.

17.1. Schrödinger Katze

*When I hear of Schrödinger's cat, I reach for my pistol.
(Stephen Hawking)*

Anmerkung 29 (Lebt Schrödingers Katze noch?):Keine Ahnung, schau halt nach! ^a

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. ^b

^aDie Frage wurde eigentlich schon endgültig geklärt, siehe ([Link](#)).

^bDies 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.

ERWIN SCHRÖDINGER führte das Gedankenexperiment 1935 ein, um die Schwierigkeiten der Kopenhagener Deutung der Quantenmechanik zu verdeutlichen [?]. 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. ⁴

⁴Führt CERN hierzu aktuelle Forschungen durch? ([Link](#))

Anmerkung 30 (Hat Scheödinger 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.

17.2. Vakuumenergiemaschinen

Die Existenz der Nullpunktenergie nachzuweisen ist eine Sache, nützliche Mengen zu extrahieren eine andere. Bisher wurden keine deratigen Geräte gebaut, die funktional sind.

A. Java-Applet

```
//////////////////////////////  
//  
// A simulation of the "two-slit process," demonstrating  
// Ed Nelson's theory of Stochastic Mechanics.  
//  
// Written as a birthday present to Ed.  
//  
// John Lafferty (lafferty@cs.cmu.edu) May 4, 1998.  
//  
//////////////////////////////  
  
import java.util.*;  
import java.applet.Applet;  
import java.awt.*;  
  
public class TwoSlit extends Applet {  
    private PointPanel pointPanel;  
    private Button zoom;  
    private boolean zoomedIn;  
  
    public void init() {  
        configurePanel();  
    }  
  
    private void configurePanel() {  
        setBackground(Color.black);  
        GridBagLayout gridBag = new GridBagLayout();  
        GridBagConstraints c = new GridBagConstraints();  
  
        setLayout(gridBag);  
  
        // Add the panel where the particles will be displayed.  
        pointPanel = new PointPanel(this);
```

```
c.fill = GridBagConstraints.BOTH;
c.weighty = 1.0;
c.gridwidth = GridBagConstraints.REMAINDER;
gridBag.setConstraints(pointPanel, c);
add(pointPanel);

// This is just added to give a little space above the
// zoom button. There must be a more elegant way to do this.
Label l = new Label("          ");
c.fill = GridBagConstraints.NONE;
c.weightx = 1.0;
c.weighty = 0.0;
c.gridwidth = 1;
c.gridwidth = GridBagConstraints.REMAINDER;
gridBag.setConstraints(l, c);
add(l);

// Now add the zoom-in/zoom-out button.
zoom = new Button();
zoom.setForeground(Color.white);
c.fill = GridBagConstraints.NONE;
c.weightx = 1.0;
c.weighty = 0.0;
c.gridwidth = 1;
c.anchor = GridBagConstraints.WEST;
gridBag.setConstraints(zoom, c);
add(zoom);

// Start off looking at the more distant view of the slits
pointPanel.zoomout(zoom);
zoomedIn = false;
}

// A method to handle an event where the zoom button is
// pressed. Uses 1.0 (deprecated) event model since many
// browsers have problems with 1.1.
public boolean action(Event e, Object o) {
    if (e.target instanceof Button) {
        Button b = (Button) e.target;
        if (zoomedIn) {
            pointPanel.zoomout(b);
```

```
        zoomedIn = false ;
    }
    else {
        pointPanel.zoomin(b);
        zoomedIn = true;
    }
    return true;
}
else return false;
}

public void paint(Graphics g) {
    pointPanel.paint(g);
}

public void update(Graphics g) {
    pointPanel.update(g);
}
}

// This class displays the particles and does all of the calculations to
// determine the trajectory of the diffusion. The notation used tries
// to be consistent with that in Nelson's chapter; for example, the
// variable a is used to denote half the distance between the slits.

class PointPanel extends Panel implements Runnable {
    QPoint point[];
    Bin bin[];
    boolean setPointPrev, fullPaint;
    Random random;
    int numPoints=100;
    int numBins=50;
    int screen;
    float a= 0f;
    double m_over_hbar=1.0/50;
    double sqrt_dt;
    double dt;
    float lambda=0.10f;
    float binsPercent=0.15f;
    boolean inited=false;
    int ticks=0;
```

```
int wall_width=3;
TwoSlit controller;

public PointPanel(TwoSlit controller) {
    super();
    resize(controller.size().width, controller.size().height);
    fullPaint = true;
    random = new Random();
    screen = (int) (size().width*(1-binsPercent));
    setParameters();
    makePoints(numPoints);
    makeBins(numBins);
    this.controller = controller;
    start();
}

public void start() {
    repaint();
    (new Thread(this)).start();
}

public void run() {
    while (true) {
        movePoints();
        try {
            Thread.sleep(5);
        }
        catch (InterruptedException e)
        {}
    }
}

int binOfHeight(int y) {
    for (int i=0; i<bin.length; ++i) {
        if ((bin[i].y1 <= y) && (y < bin[i].y2)) return i;
    }
    return -1;
}

double cosh(double x) {
    return (Math.exp(x)+Math.exp(-x))/2;
}
```

```
double sinh(double x) {
    return (Math.exp(x)-Math.exp(-x))/2;
}

// The following method calculates the drift of the diffusion , given
// by formula (17.5). Note: there are some typos in this formula in
// the Princeton monograph; these have been corrected in the on-line
// notes and this code. The code directly implements the formula , but
// makes a linear approximation when the absolute value of the argument
// to the hyperbolic functions is large.

double drift(double x, double t) {
    double l44 = 4*Math.pow(lambda,4);
    double l22 = 2*Math.pow(lambda, 2);
    double t2 = Math.pow(t,2);

    double linterm = (t+l22)/(l44+t2);
    double argh = 2*l22*x*a/(l44+t2);
    double result;

    // The following is added to prevent overflow problems.
    // If the argument to the hyperbolic sine and cosine terms
    // is large (or small), then the following linear approximation
    // to the drift is accurate.
    if (argh > 100) {
        result = (a-x)*linterm;
    }
    else if (argh < -100) {
        result = -(a+x)*linterm;
    }
    else {
        double sinhterm = sinh(argh) * (t+l22)/(l44+t2);
        double sinterm = Math.sin(2*t*x*a/(l44+t2)) * (t-l22)/(l44+t2);
        double coshterm = cosh(argh);
        double costerm = Math.cos(2*t*x*a/(l44+t2));
        result = -x*linterm + a*(sinhterm - sinterm)/(coshterm + costerm);
    }

    return result;
}
```

```
void movePoints() {
    if (!fullPaint && setPointPrevs)
        fullPaint = true;
    for (int i = 0; i < point.length; i++) {
        point[i].prevX = point[i].x;
        point[i].prevY = point[i].y;
        if (point[i].x >= screen) {
            if (point[i].active == true) {
                int b = binOfHeight(point[i].y);
                if (b >= 0) {
                    bin[b].count += 1;
                    Bin.N++;
                }
            }
            else {
                point[i].active = true;
            }
            point[i].x = 0;
            point[i].y = getRandomSlit();
        }
        point[i].x += 1;
        if (point[i].active) {
            // The following is the main calculation done in the simulation.
            // It calculates the trajectory of the diffusion using the natural
            // discrete approximation. The diffusion coefficient, m_over_hbar,
            // is hidden in sqrt_dt, and determines the relative size of the
            // fluctuations.
            double dw;
            if (random.nextGaussian() < 0) dw = -sqrt_dt;
            else dw = sqrt_dt;
            double x = (double) (size().height/2 - point[i].y);
            double t = (((double) point[i].x/screen)*a*a*m_over_hbar*10*lambda);
            double b = drift(x,t);
            point[i].y += Math.round(b*dt + dw);
        }
    }
    setPointPrevs = true;
    ticks++;
    repaint();
}

int getRandomSlit() {
```

```

    if (random.nextGaussian() < 0) {
        return (int)(size().height/2 - a);
    }
    else {
        return (int)(size().height/2 + a);
    }
}

void makePoints(int n) {
    point = new QPoint[n];
    for (int i = 0; i < point.length; i++) {
        point[i] = new QPoint();
        point[i].color = Color.white;
        // If you want the points to be randomly colored, uncomment this line:
        // point[i].color = new Color((float)Math.random(), (float)Math.random());
        point[i].x = (int)(Math.random()*screen);
        point[i].y = getRandomSlit();
        point[i].active = false;
    }
    setPointPrevs = false;
}

void makeBins(int numBins) {
    bin = new Bin[numBins];
    int width = size().height / numBins+1;
    int prevy = 0;
    for (int i = 0; i < bin.length; i++) {
        bin[i] = new Bin();
        bin[i].count = 0;
        bin[i].y1 = prevy;
        bin[i].y2 = prevy + width;
        prevy = bin[i].y2;
    }
    bin[bin.length-1].y2 = size().height-1;
}

private void setParameters() {
    // These determine the relative scale of the quantum fluctuations
    sqrt_dt = a / Math.sqrt((double) screen);
    dt = m_over_hbar * a * a / screen;
}

```

```

public void paint(Graphics g) {
    g.setColor(Color.black);
    g.fillRect(wall_width, 0, screen-wall_width, size().height);
    drawSlits(g);
    if (inited==false) {
        g.setColor(Color.white);
        g.fillRect(screen, 0, size().width, size().height);
        inited=true;
    }
    for (int i = 0; i < point.length; i++) {
        if (point[i].active == false) continue;
        g.setColor(point[i].color);
        g.fillRect(point[i].x, point[i].y, 2, 2);
    }
    fullPaint = false;
    setPointPrevs = false;
}

void drawSlits(Graphics g) {
    g.setColor(Color.white);
    g.fillRect(0, 0, wall_width, (int)(size().height/2-a-lambda*a));
    g.fillRect(0, (int)(size().height/2-a+lambda*a), wall_width, (int)(a-lambda*a));
    g.fillRect(0, (int)(size().height/2), wall_width, (int)(a-lambda*a));
    g.fillRect(0, (int)(size().height/2+a+lambda*a), wall_width, (int)(size().height/2+a-lambda*a));
    g.setColor(Color.black);
    g.fillRect(0, (int)(size().height/2-a-lambda*a), wall_width, (int)(2.0*lambda*a));
    g.fillRect(0, (int)(size().height/2+a-lambda*a), wall_width, (int)(2.0*lambda*a));
}

void drawBins(Graphics g) {
    int increment=2;
    int max_height=0;
    int display_width = size().width-screen-1;

    if (ticks % 10 != 0) return;

    g.setColor(Color.black);
    g.fillRect(screen, 0, size().width, size().height);
    g.setColor(Color.white);
    g.fillRect(screen, 0, wall_width, size().height);
}

```

```
for (int b=0; b<bin.length; ++b) {
    if (increment*bin[b].count > max_height) {
        max_height = increment*bin[b].count;
    }
}

g.setColor(Color.white);
if (max_height > display_width) {
    for (int b=0; b<bin.length; ++b) {
        float x = display_width * ((float) bin[b].count * increment / max_
        int w = screen+(int)x;
        g.drawLine(screen, bin[b].y1, w, bin[b].y1);
        g.drawLine(screen, bin[b].y2, w, bin[b].y2);
        g.drawLine(w, bin[b].y1, w, bin[b].y2);
    }
}
else {
    for (int b=0; b<bin.length; ++b) {
        int w = screen+increment*bin[b].count;
        g.drawLine(screen, bin[b].y1, w, bin[b].y1);
        g.drawLine(screen, bin[b].y2, w, bin[b].y2);
        g.drawLine(w, bin[b].y1, w, bin[b].y2);
    }
}
}

public void update(Graphics g) {
    drawSlits(g);
    drawBins(g);
    if (fullPaint)
        paint(g);
    else if (setPointPrevs) {
        for (int i = 0; i < point.length; i++) {
            if (point[i].active == false) continue;
            g.setColor(Color.black);
            g.fillRect(point[i].prevX, point[i].prevY, 2, 2);
            g.setColor(point[i].color);
            g.fillRect(point[i].prevX, point[i].prevY, 2, 2);
        }
    }
}
```

```
public synchronized void zoomin(Button b) {
    a = 100f;
    numBins = 30;
    m_over_hbar = 1.0/12500;
    b.setLabel("zoom out");
    makeBins(numBins);
    setParameters();
    for (int i=0; i<point.length; ++i) {
        point[i].active = false;
    }
}

public synchronized void zoomout(Button b) {
    a = 30f;
    numBins = 35;
    m_over_hbar = 1.0/40;
    b.setLabel("zoom in");
    makeBins(numBins);
    setParameters();
    for (int i=0; i<point.length; ++i) {
        point[i].active = false;
    }
}

class QPoint {
    int x, y;
    int prevX, prevY;
    Color color;
    boolean active;
}

class Bin {
    int y1, y2;
    int count;
    static int N=0;
}
```


B. Periodensystem

| | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-----------------------------------|-----------------------------------|------------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|-------------------------------------|----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|
| H 1 1.008 2.20 | | | | | | | | | | | | | | He 2 4.003 | | | |
| Li 3 6.94 0.98 | Be 4 9.01 1.57 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| Na 11 22.99 0.93 | Mg 12 24.31 1.31 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| K 19 39.102 0.82 | Ca 20 40.08 1.00 | Sc 21 44.96 1.36 | Ti 22 47.90 1.54 | V 23 50.94 1.63 | Cr 24 52.00 1.66 | Mn 25 54.94 1.55 | Fe 26 55.85 1.83 | Co 27 58.93 1.88 | Ni 28 58.71 1.91 | Cu 29 63.55 1.90 | Zn 30 65.37 1.65 | Ga 31 69.72 1.81 | Ge 32 72.59 2.01 | As 33 74.92 2.18 | Se 34 78.96 2.55 | Br 35 79.904 2.96 | Kr 36 83.80 3.00 |
| Rb 37 85.47 0.82 | Sr 38 87.62 0.95 | Y 39 88.91 1.22 | Zr 40 91.22 1.33 | Nb 41 92.91 1.6 | Mo 42 95.94 2.16 | Tc 43 101.07 1.9 | Ru 44 102.91 2.2 | Rh 45 106.4 2.28 | Pd 46 107.87 2.20 | Ag 47 112.40 1.93 | Cd 48 114.82 1.69 | In 49 118.69 1.78 | Sn 50 121.75 1.96 | Sb 51 127.60 2.05 | Te 52 126.90 2.1 | I 53 131.30 2.66 | Xe 54 131.30 2.60 |
| Cs 55 132.91 0.79 | Ba 56 137.34 0.89 | La * 57 138.91 1.1 | Hf 72 178.49 1.3 | Ta 73 180.95 1.5 | W 74 183.85 2.36 | Re 75 186.2 1.9 | Os 76 190.2 2.2 | Ir 77 192.2 2.20 | Pt 78 195.09 2.28 | Au 79 196.97 2.54 | Hg 80 200.59 2.00 | Tl 81 204.37 1.62 | Pb 82 207.2 2.33 | Bi 83 (208.98) 2.02 | Po 84 2.0 2.0 | At 85 2.2 2.2 | Rn 86 2.2 2.2 |
| Fr 87 0.7 | Ra 88 0.9 | Ac ‡ 104 1.1 | Rf 105 Db | Sg 106 Bh | Hs 107 Mt | Ds 109 Rg | Cn 110 Nh | Fl 111 Rg | Mc 112 Cn | Lv 113 Nh | Ts 114 Fl | Og 115 Mc | | | | | |

Symbol
Ordnungszahl
mittl.
Atommasse
Elektronegativität

| | La | Ce | Pr | Nd | Pm | Sm | Eu | Gd | Tb | Dy | Ho | Er | Tm | Yb | Lu |
|---------------|-----------------|----------------------|--------------|---------------------|------------|-------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| * Lanthanoide | 57 138.91 | 58 140.12 | 59 140.91 | 60 144.24 | 61 1.13 | 62 150.4 | 63 151.96 | 64 157.25 | 65 158.93 | 66 162.50 | 67 164.93 | 68 167.26 | 69 168.93 | 70 173.93 | 71 174.97 |
| † Aktinoide | Ac 89 1.1 | Th 90 (232.01) | Pa 91 | U 92 (283.03) | Np 93 | Pu 94 | Am 95 | Cm 96 | Bk 97 | Cf 98 | Es 99 | Fm 100 | Md 101 | No 102 | Lr 103 |

B.1. Atomare Einheiten

Atomare Einheiten sind besonders zweckmäßig bei der Berechnung von atomaren und molekularen Problemen. Sie wurden von HARTREE eingeführt. Drei Basisgrößen (die man alle gleich **EINS** setzt) legen dieses Maßsystem fest:

1. Das Plancksche Wirkungsquantum, \hbar
2. Die Elektronenmasse, m_e
3. Die Elementarladung, e

Mit der Wahl der Dielektrizitätskonstante des Vakuums $4\pi\epsilon_0 = 1$ lassen sich dann alle Maße im Sinn der atomaren (Bohrschen) Einheiten ausdrücken.

Präzisere Zahlenwerte findet man z.B. in *Atomic, Molecular, and Optical Physics Handbook*, AIP (1996), Seite 4. In der letzten Spalte sind die atomaren Einheiten in den Größen der SI-Einheiten dargestellt:

| Größe | Atomare Einheit | Zahlenwert (SI) |
|------------------------|---|---|
| Wirkung | $\hbar = 1$ | $1.0545726 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ |
| Masse | $m_e = 1$ | $0.9109389 \cdot 10^{-30} \text{ kg}$ |
| Ladung | $e = 1$ | $1.6021773 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ |
| Zeit | $\tau_0 = \frac{\hbar^3}{m_e e^4}$ | $2.4188843 \cdot 10^{-17} \text{ s}, 0.024 \text{ fs}$ |
| Länge | $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$ | $5.2917724 \cdot 10^{-11} \text{ m}, 1 \text{ bohr}$ |
| Geschwindigkeit | $v_B = \frac{\hbar e^2}{m_e}$ | $2.1876914 \cdot 10^6 \text{ m/s}, \frac{c}{137}$ |
| Energie | $E_H = \frac{\hbar^2 m_e e^4}{\hbar^2}$ | $4.3597482 \cdot 10^{-18} \text{ J}, 27.211 \text{ eV}$ |
| Kraft | $\frac{E_H}{a_0^2}$ | $8.2387295 \cdot 10^{-8} \text{ N}$ |
| Leistung | $\frac{E_H^2}{\hbar}$ | $1.8023798 \cdot 10^{-1} \text{ W}$ |
| Elektrische Feldstärke | $\frac{E_H}{ea_0}$ | $5.142208 \cdot 10^{11} \text{ V/m}$ |
| Intensität | $\frac{E_H^2}{\hbar a_0^2}$ | $6.43641 \cdot 10^{19} \text{ W/m}^2$ |

Tabelle B.1.: Atomare Einheiten und ihre SI-Zahlenwerte

Die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante $\alpha = \frac{\hbar e^2}{c} = \frac{1}{137}$ und die Compton-Wellenlänge $\lambda_c = \frac{\hbar}{m_e c}$ ausgedrückt. Für die atomare Energieeinheit E_H wird manchmal die Größe **1 Hartree** = 27.211 eV verwendet.

C. Literatur

Bücherschrank

Tabelle C.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) | |
| 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) | |
| Skripte / Quantenmechanik: | | |
| | (0) [88] | |
| | (0) [89] | (Tabelle 4.1) |
| | (0) [99] | |
| | (0) [100] | |
| | (0) [104] | (Zeichnungen) |
| | (0) [121] | |
| | (0) [137] | |
| | (0) [138] | |
| Skripte / Stochastik: | | |
| | (0) [110] | |
| | (0) [111] | |
| | (0) [139] | |
| Lehrbuch / Allgemein: | | |
| | (0) [58] | gutes Lehrbuch |

Tabelle C.1.: (Fortsetzung) Spezielle Literatur nach Themen

| Thema | Literatur | Kommentar |
|-------------------------|-----------|----------------|
| | (0) [69] | gutes Lehrbuch |
| Lehrbuch / Stochastik: | | |
| | (0) [128] | |
| | (0) [108] | |
| Thema / Lokalität: | | |
| Thema / Zitterbewegung: | | |

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] NELSON, Edward: *Dynamical Theories of Brownian Motion*. NY : Princeton Univeristy Press, 1967. – ([Local](#))
- [4] NELSON, Edward: *Quantum Fluctuation*. NY : Princeton Univeristy Press, 1985. – ([Local](#))
- [5] NELSON, Edward: Review of stochastic mechanics. In: *J. Phys.: Conf. Ser.* 361 (2012), S. 1–4. – ([Local](#))
- [6] PAVON, Michele: *A stochastic control problem connected to the measurement process in stochastic mechanics*. – ([Local](#))
- [7] PAVON, Michele: Hamilton?`s principle in stochastic mechanics. In: *J. Math. Phys.* 36 (1995), S. 6774. – ([Link](#)), ([Local](#))
- [8] 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](#))
- [9] DAVIDSON, Mark P.: *Stochastic Models of Quantum Mechanics - A Perspective*. Palo Alto, USA, . – ([Local](#))
- [10] G.N., Ord: *Quantum Mechanics in a Two Dimensional Spacetime - What is a wavefunction?* 2009. – ([Local](#))
- [11] 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](#))
- [12] 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](#))

- [13] OHBA, Ichiro: Some stochastic aspects of quantization. In: *Prama journal of physics* (2002)
- [14] 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 velocity of light. In: *Physics Letters* 81 A (1981), Nr. 1, S. 12–14. – ([Local](#))
- [15] PETRONI, Nicola C.: *Asymptotic behaviour of densities for Nelson processes.* – ([Local](#))
- [16] 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](#))
- [17] PETRONI, N. C. ; MARTINO, S. de ; SIENA, S. de ; F., Illuminati: *Controlled Stochastic Collective Dynamics of Particle Beams.* – ([Local](#))
- [18] W., Petersen ; C., Perret: *Numerical integreation of complex SDEs.* Seminar for Applied Mathematics, March 2012. – ([Local](#))
- [19] BACCIAGALUPPI, Guido: *Nelsonian Mechanics Revisited.* – ([Local](#))
- [20] BACCIAGALUPPI, Guido: *A Conceptual Introduction to Nelson's Mechanics.* 2005. – ([Local](#))
- [21] HARANAS, Ioanis I.: *A Different Derivation of the Calogero Conjecture.* – ([Local](#))
- [22] HARANAS, Ioanis I.: A Different Derivation of the Calogero Conjecture. In: *Journal of Theoretics* 4 (2002), Nr. 1, S. 1–7. – ([Local](#))
- [23] SUPPES, Patrick: Probabilistic Causality in Quantum Mechanics. In: *Journal of Statistical Planning and Interference* 258 (1990), S. 293–303. – ([Local](#))
- [24] 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](#))
- [25] GARBARCZEWSKI, Peter: Derivation of the quantum potential from realistic Brownian particle motions. In: *Physics Letters A* 162 (1992), S. 129–136. – ([Local](#))
- [26] KOBAYASHI, Keita ; YAMANAKA, Yoshiya: *Extension of Nelson's Stochastic Quantization to Thermal Situation in Thermo Field Dynamics.* 2010. – ([Local](#))
- [27] FLIESS, Michel: *An intrinsic approach to the quantum fluctuations in stochastic mechanics.* 2006. – ([Local](#))
- [28] PUTHOFF, H. E.: Ground state of hydrogen as a zero-point-fluctuation-determined state. In: *Physical Review D* (1987)
- [29] PUTHOFF, H. E.: *Quantum Vacuum Fluctuations: A New Rosetta Stone of Physics?* 2003. – ([Local](#))

-
- [30] IMAFUKU, Kentaro ; OHBA, Ichiro: Tunneling time and Nelson's Quantum Mechanics. In: *NN* 982 (1997), S. 30–40. – ([Local](#))
 - [31] NN: *Review of Stochastic Mechanics.* – ([Local](#))
 - [32] WISEMAN, Howard M.: Stochastic Processes in Physics / Centre of Laser Science, The University of Queensland. 1998. – Forschungsbericht. – ([Local](#))
 - [33] DERAKHSHANI, Maaneli: *A Suggested Answer To Wallstrom's Criticism: Zitterbewegung Stochastic Mechanics II.* Institute for History and Foundations of Science, University Utrecht, 2016. – ([Local](#))
 - [34] *A Suggested Answer To Wallstrom's Criticism: Zitterbewegung Stochastic Mechanics I.* Institute for History and Foundations of Science, University Utrecht, 2016. – ([Local](#))
 - [35] DERAKHSHANI, Maaneli: *Stochastic Mechanics Without Ad Hoc Quantization: Theory And Application To Semiclassical Gravity.* Utrecht, University Utrecht, Proefschrift, 2017. – ([Local](#))
 - [36] ROWLANDS, Peter: *Are there alternatives to our present theories of physical reality* Department of Physics, University of Liverpool, 2006. – ([Local](#))
 - [37] HESTENES, David: The Zitterbewegung Interpretation of Quantum Mechanics. In: *Found. Physics* 20 (1990), Nr. 10, S. 1213–1232. – ([Local](#))
 - [38] KRACKLAUER, A. F.: An Intuitive Paradigm For Quantum Mechanics. In: *Physics Essays* 5 (1992), Nr. 2, S. 226–234. – ([Local](#))
 - [39] 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](#))
 - [40] VATSYA, SR: Current State of Quantum Theory. In: *Physics & Astronomy International Journal* 1 (2017), Nr. 4. – ([Local](#))
 - [41] 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](#))
 - [42] WANG, Xiao-Song ; XIONG, Cai-Dong: *Zitterbewegung at the level of quantum field theory.* Chengdu 610054, China, . – ([Local](#))
 - [43] GRÖSSING, Gerhard: *Quantum Cybernetics: A New Perspective for Nelson's Stochastic Theory, Nonlocality and the Klein-Gordon Equation.* – ([Local](#))
 - [44] GRÖSSING, Gerhard ; PASCASIO, Johannes M. ; SCHWABL, Herbert: *A classical explanation of quantization.* Akademiehof, Friedrichstr. 10, 1010 Vienna, Austria, . – ([Local](#))

-
- [45] GRÖSSING, Gerhard: *Kontinuum – Die Geschichte einer Verdrängung mit besonderem Augenmerk auf die Quantentheorie*. 2005. – ([Local](#))
 - [46] FLAMM, D.: *Neueres zum Weltbild der Quantenmechanik*. Universität Wien, . – ([Local](#))
 - [47] DRAGON, Norbert: *Anmerkungen zur Quantenmechanik*. Skript, 2017. – ([Link](#)), ([Local](#))
 - [48] 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](#))
 - [49] BAEZ, John C. ; BIAMONTE, Jacob D.: *Quantum Techniques for Stochastic Mechanics*. University of California, Riverside, CA 92521, USA, . – ([Local](#))
 - [50] 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](#))
 - [51] 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](#))
 - [52] GARBACZEWSKI, Piotr: Relativistic problem of random flights and Nelson's stochastic mechanics. In: *PhysicsLetters A* 164 (1991), S. 6–16. – ([Local](#))
 - [53] DERAKHSHANI, Maaneli: *Stochastic Mechanics Without Ad Hoc Quantization: Theory And Applications To Semiclassical Gravity*, Universiteit Utrecht, Proefschrift, 2017. – ([Local](#))
 - [54] HÜMMLER, Holm G.: *Relativer Quantenquark — Kann die moderne Physik die Esoterik belegen?* Springer, 2017. – ([Local](#))
 - [55] WILLIAMS, Angharad: *On Nelson's stochastic mechanics for a semiclassical parabolic state.*, Swansea University, Diss., 2012. – ([Link](#)), ([Local](#))
 - [56] BACCIAGALUPPI, Guido: Non-equilibrium in Stochastic Mechanics. In: *Journal of Physics: Conference Series* 361 (2012), S. 1–12. – ([Link](#)), ([Local](#))
 - [57] MITCHELL, John: *Exploring Stochastic Quantum Mechanics and Emergent Gravity*, Undergraduate Honors Theses – Paper 1338, 2019. – ([Link](#)), ([Local](#))
 - [58] GRIFFITH, David ; SCHROETER, Darrell F.: *Introduction to Quantum Mechanics*. 3rd. edition. Reed College, Oregon : Cambridge University Press, 2017. – ([Local](#)) [C-1](#)
 - [59] HUAN, Alfred: Statistical Mechanics. – Forschungsbericht. – ([Local](#))

-
- [60] STOHRER, Wolf-Dieter ; KOCH, O.: Die Phänomene der Quantenmechanik / Universität Bremen. 1999. – Forschungsbericht. – ([Local](#))
 - [61] GLODDE, Martin ; PLIKAT, Martin ; STOHRER, wolf-Dieter: Das qualitative Orbitalmodell in der Chemie / Universität Bremen. 2001. – Forschungsbericht. – ([Local](#))
 - [62] 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](#))
 - [63] KEYL, Michael: Algebraische Methoden der Quantentheorie / Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Berlin,. Berlin, 1997. – Forschungsbericht. – ([Local](#))
 - [64] DEGENHART, Christof: Quantenmechanik-Formelsammlung. 1994. – Forschungsbericht. – ([Local](#))
 - [65] 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](#))
 - [66] MARSHALL, Trevor W. ; SANTOS, Emilio: *The myth of the photon.* 1997. – ([Local](#))
 - [67] MARSHALL, Trevor W.: *The zeropoint field – no longer a ghost.* 2001. – ([Local](#))
 - [68] MILTON, Kimball A.: *The Casimir Effect: Physical Manifestations of Zero-Point Energy.* 2001. – ([Local](#))
 - [69] RÖTH, Ernst-Peter: *Einführung in die statistische Thermodynamik und Quantenmechanik.* – ([Local](#)) C-2
 - [70] GARRET, Ron: *Quantum Mysteries Disentangled.* 2008. – ([Local](#))
 - [71] JAIN, Khyati: Quantum Tecgniques for Stochastic Mechanics / Birla Institute of Technology and Science. 2019. – Forschungsbericht. – ([Local](#))
 - [72] CRESSON, Jacky ; DARSES, Sebastian: Stochastic embedding of dynamical systems. In: *Journal of Mathematical Physics* 48 (2007), S. 072703–1 – 072703–54. – ([Local](#))
 - [73] BUSH, W. M. John ; OZA, Anand U.: Hydrodynamic quantum analogs. In: *Rep. Prog. Phys* 84 (2020), Nr. 017001, S. 41 pp.. – ([Local](#))
 - [74] GUERRA, Francesco: Stochastic variational principles and quantum mechanics. In: *Ann. Inst. Henri Poincare* 49 (1988), Nr. 3, S. 315–324. – ([Local](#))
 - [75] ARULDHAS, G.: *Quantum Mechanics 500 Problems with Solutions.* PHI Learning. – ([Local](#))

- [76] PETRONI, Nicola C. ; MORATO, Laura M.: Entangled states in stochastic mechanics. In: *J. Phys. A: Math. Gen.* 33 (2000), S. 5833–5848. – ([Local](#))
- [77] LINDGREN, J. ; LIUKKONEN, J.: Quantum Mechanics can be understood through stochastic optimization on spacetimes. In: *Scientific Reports* 9 (2019), Nr. 1. – ([Link](#)), ([Local](#))
- [78] 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](#))
- [79] AGRAWAL, Shiv: *A Stochastic View of Quantum Mechanics*. 2020. – ([Local](#))
- [80] TUMULKA, Roderich: *Lecture Notes on Foundations of Quantum Mechanics – Winter semester 2017/18*. Lecture Notes, . – ([Local](#))
- [81] TUMULKA, Roderich: *Lecture Notes on Foundations of Quantum Mechanics – Winter semester 2019/20*. Lecture Notes, . – ([Local](#))
- [82] LOMONACO, Samuel J.: *A Rosetta stone for quantum mechanics with an introduction to quantum computation*. Lecture Notes, 2000. – ([Local](#))
- [83] MUNKHAMMAR, Joakim: *Quantum mechanics from a stochastic least action principle*. Foundational Questions Institute Essay, 2019. – ([Local](#))
- [84] EBERHARD, P. H.: Bell’s Theorem without Hidden Variables. In: *Il Nuovo Cimento* (1977), Nr. B1
- [85] CARLEN, Eric A.: Conservative Diffusions. In: *Commun. Math. Phys.* (1984), S. 293–315. – ([Local](#))
- [86] SMITH, Jim: *Modern Quantum Mechanics*. 2. Boston : Addison-Wesley, 2011. – ([Local](#))
- [87] DIRAC, P. A. M.: *The principles of quantum mechanics*. 3. Oxford : Clarendon Press, 2011. – ([Local](#))
- [88] NATTERMANN, Thomas: *Quantenmechanik*. Skript, 2001. – ([Local](#)) **C-1**
- [89] MANTEL, Karl-Heinz: *Einführung in die Quantenmechanik*. München : Skript, 2011. – ([Local](#)) **C-1**
- [90] VAN BELLE, Jean L.: *The Zitterbewegung Interpretation of Quantum Mechanics*. March 2019. – ([Local](#))
- [91] BEYER, M. ; PAUL, W.: On the Stochastic Mechanics Foundation of Quantum Mechanics. In: *Universe* 7 (2021), S. 166. – ([Link](#)), ([Local](#))

- [92] DERAKHSHANI, Maaneli: *A Suggested Answer To Wallstrom's Criticism: Zitterbewegung Stochastic Mechanics I.* Utrecht, The Netherland, April 2019. – ([Local](#))
- [93] MARROCCO, Michele: *Simple derivation of Schrödinger equation from Newtonian dynamics.* Rome, Italy, . – ([Local](#))
- [94] GRÖSSING, G. ; FUSSY, S. ; PASCASIO, J. M. ; SCHWABL, H.: *Elements of sub-quantum thermodynamics: quantum motion as ballistic diffusion.* Vienna, Austria, . – ([Local](#))
- [95] FLIESS, Michel: Probabilités et fluctuations quantiques (Probabilities and quantum fluctuations). In: *Mathématique, Série I* 344 (2007), S. pp.663–668. – ([Link](#)), ([Local](#))
- [96] 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](#))
- [97] STEINSIEK, Annette ; SCHNEIDER, Ursula A.: *Die perfekte Welle. Erwin Schrödinger On Zitterbewegung.* Innsbruck, Austria : Begleittext zu Faksimiles aus dem Brenner-Archiv, 2019. – ([Local](#))
- [98] BRODY, Dorje C. ; HUGHSTON, Lane P.: Stochastic reduction in nonlinear quantum mechanics. In: *Proc. R. Soc. Lond. A* 458 (2002), S. 1117–1127. – ([Local](#))
- [99] BRANDES, T.: *Quantenmechanik II.* Skript, 2012. – ([Local](#)) C-1
- [100] G., Blatter: *Quantenmechanik.* Skript, 2015. – ([Local](#)) C-1
- [101] BOYER, Timothy H.: Stochastic Electrodynamics: The Closest Classical Approximation to Quantum Theory. In: *Atoms* 7 (2019), Nr. 29. – ([Local](#))
- [102] SCHMELZER, I.: *Nelsonsche Stochastik - FAQ.* 2. Version. November 2008. – ([Local](#))
- [103] ALBEVERIO, Sergio ; HOGH-KROHN, Raphael: *A remark on the connection between stochastic mechanics and the heat equation.* – ([Local](#))
- [104] DIEZEMANN, Gregor: *PC II-Quantenmechanik.* Skript, 2015. – ([Local](#)) C-1
- [105] 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](#))
- [106] NOTTALE, Laurent: *New Formulation of Stochastic Mechanics – Application to Chaos.* – ([Local](#))
- [107] GODART, Maurice: *Stochastic Theory of Quantum Mechanics.* – ([Local](#))
- [108] KLYATSKIN, V. I.: *Stochastic equations through the eye of the physicist basic concepts, exact results and asymptotic approximations.* Elsevier Science, 2005. – ([Link](#)), ([Local](#)) C-2

-
- [109] MESSER, August: *Das Realismus-Problem der Quantenmechanik angesichts der Dekohärenz-Interpretation*, Justus-Liebig-Universität Gießen, Diss., 2007. – ([Local](#))
 - [110] KREE, Reiner: *Stochastische Beschreibung physikalischer Systeme*. Skript, 2015. – ([Local](#))
[C-1](#)
 - [111] SANTEN, Ludger ; RIEGER, Heiko: *Stochastische Prozesse in der statistischen Physik*. Skript, 2015. – ([Local](#))
[C-1](#)
 - [112] 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](#))
 - [113] 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](#))
 - [114] SIMON, Barry: *Ed Nelson's Work in Quantum Theory*. 2004. – ([Local](#))
 - [115] ILLUMINATI, Fabrizio ; VIOLAS, Lorenza: Stochastic variational approach to minimum uncertainty states. In: *J. Phys. A Math. Gen.* 28 (1995), S. 2953–2961. – ([Local](#))
 - [116] 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](#))
 - [117] 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](#))
 - [118] GARBACZEWSKI, Piotr: Relativistic problem of random flights and Nelson's stochastic mechanics. In: *Physics Letters A* 164 (1992), S. 6–16. – ([Local](#))
 - [119] SIEDSCHLAG, Christian: *Mechanismen der Ionisation atomarer Systeme in intensiven Laserpulsen*, Universität Dresden, Diss., 2002. – ([Local](#))
 - [120] WERNER, Patrick: *Quanteneffekte in nanomechanischen Systemen*, Ludwig Maximilians Universität, München, Diss., 2002. – ([Local](#))
 - [121] BURKARD, G.: *Höhere Quantenmechanik und Elektrodynamik*. Skript, 2012. – ([Local](#))
[C-1](#)
 - [122] MAGYAR, Rudolph J.: *A Glance at the Fractional Quantum Hall Effect*. 2001. – ([Local](#))
 - [123] WITTICH, Olaf: *Eine Invarianzeigenschaft Brownscher Bewegung und Transformationen der Feynman-Kac-Formel*, Universität Göttingen, Diss., 1997. – ([Local](#))

-
- [124] FRITSCHE, 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](#))
 - [125] FRITSCHE, Lothar ; HAUGK, Michael: Reexamining the Einstein-Podolsky-Rosen experiment, photon correlation and Bell's inequality. In: *ResearchGate* (2007), August. – ([Link](#)), ([Local](#))
 - [126] FRITSCHE, Lothar ; HAUGK, Michael: Stochastic Foundation of Quantum Mechanics and the Origin of Particle Spin. In: *ResearchGate* (2009), Dezember. – ([Link](#)), ([Local](#))
 - [127] FRITSCHE, Lothar ; HAUGK, Michael: *Quantum Mechanics without Observers*. 2019. – ([Local](#)) 3-21
 - [128] MAHNKE, Reinhard ; KAUPUZS, Jevgenijs ; LUBASHEVSKY, Ihor: *Physics of Stochastic Processes – How Randomness Acts in Time*. Wiley-VCH, 2009. – ([Local](#)) C-2
 - [129] 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](#))
 - [130] PEÑA, Luis de l. ; CETTO, Ana M. ; HERNÁNDEZ, Andrea V.: *The Emerging Quantum – The Physics Behind Quantum Mechanics*. Springer, 2015. – ([Local](#))
 - [131] BARROW, John D.: *The Book of Nothing*. Vintage Books, New York. – ([Local](#))
 - [132] CLOSE, Frank: *Nothing – A Very Short Introduction*. Oxford University Press. – ([Local](#))
 - [133] *Light and Vacuum*. 2. Edition. World Scientific, 2017. – ([Local](#))
 - [134] NISSEN-MEYER, Johannes: *Zur Begründung des Bornschen statistischen Gesetzes*. München, Ludwig-Maximilians-Universität, Bachelorarbeit, 2009. – ([Local](#))
 - [135] BOPP, Fritz: Quantenmechanische und stochastische Prozesse. In: *Zeitschrift für Naturforschung* 10a (1955), S. 789–793. – ([Local](#))
 - [136] BOPP, Fritz: Elementarvorgänge der Quantenmechanik in stochastischer Sicht. In: *Annalen der Physik* 17 (1966), Nr. 7-8, S. 407–414. – ([Local](#))
 - [137] HORNER, Heinz: *Stochastische Dynamik klassischer und quantenmechanischer Systeme, WS 1994/95*. Skript, 2002. – ([Local](#)) C-1
 - [138] H., Fichtner: *Manuskript zur Vorlesung Grundlagen der Quantenmechanik und Statistik*. Skript, 2013. – ([Local](#)) C-1

- [139] PIVATO, Marcus: *Stochastic Processes and Stochastic Integration*. 1999. – ([Local](#)) C-1
- [140] REICHL, Linda E.: *A Modern Course in Statistical Physics*. Wiley-VCH, 2016. – ([Local](#))
- [141] MILONNI, Peter W.: *An Introduction to quantum optics and quantum fluctuations*. Oxford Graduate Texts, 2019. – ([Local](#))
- [142] JONA-LASINIO, G.: Stochastic processes and quantum mechanics. In: *Astérisque, tome 132* (1985), S. 203–216. – ([Local](#)), ([Link](#))
- [143] 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](#))
- [144] FLEMING, Ray: *The 100 Greatest Lies in Physics*. 2017. – ([Local](#))
- [145] MACDONALD, D. K. C.: *Noise and Fluctuations*. John Wiley & Sons, 1962. – ([Local](#))
- [146] SIDHARTH, B.G.: *The Universe of Fluctuations*. Springer, 2005. – ([Local](#))
- [147] PAPOULIS, Athanasios ; PILLAI, S. U.: *Probability, Random Variables and Stochastic Processes*. McGraw-Hill, 2002. – ([Local](#))
- [148] KNILL, Oliver: *Probability Theory and Stochastic Processes with Applications*. Overseas Press, 2009. – ([Local](#))
- [149] MICHEAS, Athanasios C.: *Theory of stochastic objects probability, stochastic processes, and inference*. CRC Press, 2018. – ([Local](#))
- [150] ARULDHAS, G.: *Quantum Mechanics 500 Problems with Solutions*. PHI Learning, 2011. – ([Local](#))
- [151] HUANG, Kerson: *Introduction to Statistical Physics, Second Edition*. CRC Press, 2010. – ([Local](#))
- [152] JAMMER, Max: *The Philosophy Of Quantum Mechanics The Interpretations Of Quantum Mechanics In Historical Perspective*. John Wiley & Sons, 1974. – ([Local](#))
- [153] LONGAIR, Malcolm: *Quantum Concepts in Physics An Alternative Approach to the Understanding of Quantum Mechanics*. Cambridge Books, 2013. – ([Local](#))
- [154] PHILLIPS, A. C.: *Introduction to Quantum Mechanics*. Wiley, 2003. – ([Local](#))
- [155] SHANKAR, R.: *Principles of Quantum Mechanics*. Plenum Press, 1994. – ([Local](#))
- [156] FANO, Guido ; M., Blinder S.: *Twenty-First Century Quantum Mechanics Hilbert Space to Quantum Computers Mathematical Methods and Conceptual Foundations*. Springer, 2017. – ([Local](#))

- [157] MILLER, David A. B.: *Quantum Mechanics for Scientists and Engineers*. Cambridge University Press, 2008. – ([Local](#))
- [158] SUESSKIND, Leonard ; FRIEDMANN, Art: *Quantum mechanics. The theoretical minimum*. Basic Books, 2014. – ([Local](#))
- [159] BES, Daniel R.: *Quantum Mechanics A Modern and Concise Introductory Course*. Springer, 2012. – ([Local](#))
- [160] NASSAR, Antonio ; MIRET-ARTÉS, Salvador: *Bohmian Mechanics, Open Quantum Systems and Continuous Measurements*. Springer, 2017. – ([Local](#))
- [161] MASUJIMA, Michio: *Path Integral Quantization and Stochastic Quantization*. Springer, 2009. – ([Local](#))
- [162] KLIEMANN, Wolfgang ; NAMACHCHIVAYA, N. S.: *Nonlinear dynamics and stochastic mechanics*. CRC Press, 2018. – ([Local](#))
- [163] CHAICHIAN, M. ; A., Demichev: *Path Integrals in Physics. Stochastic Process & Quantum Mechanics*. Institut of Physics Publishing, 2001. – ([Local](#))
- [164] PAUL, Wolfgang ; BASCHNAGEL, Jörg: *Stochastic Processes – From Physics to Finance*. Springer, 2013. – ([Local](#))
- [165] 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](#))
- [166] BRANDT, Siegmund ; DAHMEN, Hans D.: *Quantenmechanik in Bildern: Eine Einführung mit vielen Computergrafiken*. Springer Spektrum, 2015. – ([Local](#))
- [167] DÜRR, Detlef ; LAZAROVICI, Dustin: *Verständliche Quantenmechanik: Drei mögliche Weltbilder der Quantenphysik*. Springer Spektrum, 2008. – ([Local](#))
- [168] GYTHIEL, Anthony: *An Introduction to Stochastic Processes in Physics*. The Johns Hopkins University Press, 2002. – ([Local](#))
- [169] 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](#)
- [170] ZINKERNAGEL, Henrik: Niels Bohr on the wave function and the classical/quantum divide". In: *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 53, S. 9–19,. <http://dx.doi.org/10.1016/j.shpsb.2015.11.001>. – DOI 10.1016/j.shpsb.2015.11.001. – 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, 3-15

- [171] HEISENBERG, W. ; PAULI, W. (Hrsg.): *The Development of the Interpretation of the Quantum Theory*". – 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."
- [172] BOHR, Niels: *Quantum Physics and Philosophy—Causality and Complementarity, Essays 1958-1962 on Atomic Physics and Human Knowledge* 3-15
- [173] ELITZUR, Avshalom C. ; COHEN, Eliahu ; 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.
- [174] 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.
- [175] 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..
- [176] ASCHENBACH, Jutta: *Korpuskularstatistische Begründung der Quantenmechanik*, TU Clausthal, Staatsexamenarbeit, 1978. – (Local) 2-4, 3-21, 16-1
- [177] E., Nelson: In: *J. Math. Phys.* 5 3-24
- [178] E., Nelson: In: *Phys. Rev.* 152 3-2, 3-24
- [179] LUDWIG, G.: *Einführung in die Grundlagen der Theoretischen Physik*. Bd. Band 3: Quantentheorie. Vieweg, Braunschweig, 1976. – 82 S.
- [180] DIRAC, P. A.: *The Principles of Quantum Mechanics*. Bd. 36. 4. Aufl. Oxford Press 1958, 1958
- [181] WEIZSÄCKER, C. von: *Zum Weltbild der Physik*. 2. Aufl. Hirzel, Leipzig, 1944. – 30–31 S.
- [182] FRANZ, W.: *Quantentheorie*. Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1970
- [183] SCHRÖDINGER, E.: In: *Sitzungsber. Preuß. Akad. Wissensch., Phys.-Mathem. Abt.* 24 24 (1930), Nr. 418 3-22
- [184] MESSIAH, A.: *Quantum Mechanics*. Bd. II. North Holland, Amsterdam, 1962. – 950 ff. S. 3-22

- [185] FÜRTH, R.: In: *Z. für Physik* 81 (1933), 143 S. – ([link](#)) **3-22**
- [186] FEYNMAN, R. P.: In: *Rev. Mod. Phys.* 20 (1948), 367 S. – ([abstract](#)) **3-22**
- [187] WEIZEL, W.: In: *Z. für Physik* 134 (1954), 264 S. **3-22**
- [188] WEIZEL, W.: In: *Z. für Physik* 135 (1954), 270 S. **3-22**
- [189] 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**
- [190] FÊNYES, I.: In: *Z. für Physik* 132 (1952), 81 S. **3-22**
- [191] BOHM, D.: In: *Phys. Rev.* 85 (1952), 166 –180 S. **3-24**
- [192] BOHM, D. ; VIGIER, J. P.: In: *Phys. Rev.* 96 (1954), 208 S. **3-24**
- [193] BROGLIE, L. de: *The Current Interpretation of Wave Mechanics: a Critical Study*. Elsevier, 1964 **3-24**
- [194] LANDÉ, A.: *New Foundations of Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 1965
3-24
- [195] COMISAR, G. G.: In: *Phys. Rev. B* 138 (1965), 1332 S. **3-24**
- [196] SANTOS, E.: In: *Nuovo Cimento* 59b (1969), 65 S. **3-24**
- [197] PEÑA-AUERBACH, L. de l.: In: *J. Math. Phys.* 10 (1969), 1620 S. **3-24**
- [198] PEÑA-AUERBACH, L. de l.: *J. Math. Phys.* 12, 453 (1971). (1971)
- [199] BOPP, F.: In: *Z. Naturforschung* 9a (1954), 479 S. **3-24**
- [200] H., Gebelein.: *Turbulenz*. Berlin : Springer, 1935. – 75 S. **5-21**
- [201] SOMMERFELD, A.: *Vorlesungen über Theoretische Physik, Bd. II: Mechanik der deformierbaren Medien*. 6. Leipzig : Akadem. Verlagsges., 1970. – 115 ff. S. **5-30**
- [202] RAHMAN, A.: In: *Phys. Rev. A* 136 (1969), 405 S.
- [203] LANGEVIN, P.: In: *Compt. Rend.* 146 (1908), 530 S.
- [204] EINSTEIN, Albert: In: *Ann. Phys.* 17 (1905), 549 S. **5-9**
- [205] FOKKER, A. ; PLANCK, M.: In: *Ann. d. Physik* 104 (1914), 312 S. **5-13**
- [206] FOKKER, A. ; PLANCK, M.: In: *Sitz. der Preuss. Akad.* (1917), 324 S.

-
- [207] KOLMOGOROFF, A. N.: Math. Ann. 125, 415 (1931). (1931) 5-13
 - [208] KRAMERS, H. A.: North Holland, Amsterdam, 1957
 - [209] NEUMANN, J. von: Springer, Berlin, 1932 16-1
 - [210] 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

Stichwortverzeichnis

- Arithmetisches Mittel, 5-29
Aufenthaltswahrscheinlichkeit, 3-3, 6-55
Auswahlregel, 6-75, 6-90
- Bahnen
 klassische, 6-53
Balmer Serie, 6-79
Balmer-Serie, 6-79
Bohrscher Radius, 6-13
Bohrsches Magneton, 6-36, 7-2
Boltzmann-Konstante, 5-2
Bornsche Reihe, 12-1
Brackett-Serie, 6-79
Brownsche Bewegung, 5-25
Brownsche Schar, 5-25
- Casimir-Effekt, 14-4
- Delbrück-Streuung, 14-4
Determinismus, 16-2
Dipolübergänge, 6-75
Dipolmoment, 6-61, 6-63, 6-64
Dirac-Gleichung, 7-11
Dirac-Gleichung, 7-15
Dopplerverbreiterung, 6-75
Drehimpuls, 6-37
Drehimpulsoperator, 6-37
Dubletts, 13-1
Duhamel-Integral, 5-6
- Ehrenfest-Theorem, 5-34, 5-39, 5-40
Eigenwert, 3-24
Eigenzustand, 6-53
Einteilchenenergie, 8-2
Einteilchensystem, 6-80
Elektronen
 polarisierte, 7-14
Elementarladung, 6-56
- Entartung, 6-33, 6-35, örpotential9-1, 9-1
Entartung (Quantenmechanik), 6-36
Erwartungswert, 6-35
Erwartungswert, 6-61, 15-4, 15-5
Eulersche Winkel, 7-5
Eulersche Zahl, 6-56
- Faxen-Holtsmark-Formel, 12-1
Fokker-Planck-Gleichung, 5-10, 5-19
Fourier-Transformation, 6-6
Freier Wille, 16-2
- Gaußscher Integralsatz, 5-14, 5-37, 6-37
Gesamtenergie, 8-2
GHZ-Experiment, 16-1
Grezsche Formel, 5-37, 5-38
Grezsche-Funktion, 11-1
Grundzustand, 6-60
- Häufungspunkt, 15-3
Hamiltonoperator, 6-59, 6-62
Hartree-Fock-Verfahren, 8-2
Hawking-Strahlung, 14-4
Hermitescher Operator, 5-37, 5-39, 7-21
Hertzscher Dipol, 6-66
- Impulsstromdichte, 6-36
Indertimismus, 16-1
- 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
- Keplerbahn, 6-56
- Kolmogoroffsche Differentialgleichung, 5-13
- Konvektions-Diffusions-Gleichung, 5-21
- Kugelflächenfunktionen, 6-28, 6-30, 6-32
- Kugelwellen, 12-1
- Lamb-Verschiebung, 14-4
- Langevin-Gleichung, 5-5
- Langevin-Gleichungen, 5-25
- Laplace-Operator, 5-12, 5-17
- Legendre-Polynom, 6-22
- Linearkombination, 6-4, 6-62
- Linienbreite
natürliche, 6-75
- Linienbreite, 6-72, 6-75
- Lyman-Serie, 6-79
- Magnetfeld, 6-80
- Markow-Kette, 15-6
- Maxwell-Gleichungen, 6-66
- Mehrteilchensysteme, 8-1, 8-1, 8-1
- Mittelwert, 15-4, 15-5
- mittlere quadratische Abweichung, 15-6
- Näherungsverfahren, -Verfahren 8-1
- Nachwirkungsintegral, 5-6
- Navier-Stokes-Gleichungen, 5-13, 5-17, 5-21, 5-22, 5-27
- Newtonische Gesetze, 5-22
- Normalverteilung, 15-1
- Nullpunktsenergie, 14-4
- Ortsraum, 6-6
- Paschen-Back-Effekt, 13-1
- Paschen-Serie, 6-79
- Pauli-Gleichung
nichtrelativistisch, 7-9
- Pauli-Matrizen, 7-9
- Pauli-Prinzip, 8-1
- Periodensystem, 11-1
- Periodensystem, 11-1
- Pfund-Serie, 6-79
- Photoelektrischer Effekt, 7-14
- Pickery-Serie, 6-79
- Planck-Konstante, 5-30
- Poisson-Transformation, 6-67
- Polarkoordinaten, 6-38
- Poyntingvektor, 6-68
- 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
- Quantisierungsachse, 6-91
- Rauschen, 5-13
- Rayleigh-Streuung, 6-88
- Ritz-Serie, 6-79
- Rodrigues-Formel, 6-22
- Rutherford-Formel, 12-2
- Rydberg-Formel, 6-91
- Satz von Bolzano-Weierstraß, 15-3
- Satz von Stokes, 6-83
- Scharmittel, 5-7
- Scharnhorst-Effekt, 14-4
- Schrödinger-Gleichung, 6-3, 6-12–6-14, 6-57, 6-90
- Schrödingergleichung, 6-45, 6-62
- Schrödingergleichung
Impulsdarstellung, 6-10

- zeitabhängige, 5-25
Schwinger-Effekt, 14-4
Selbstadjungierter Operator, 5-39
Slater-Determinante, 8-1
Smoluchowski-Gleichung, 5-10
Spektrallinie, 6-72
Spektrallinien
 Klassifikation, 6-79
Spektren, 13-1
Spin-Bahnkopplung, 13-1
Spinmatrizen, 7-9
Spinor, 7-21
Spontane Emission, 6-72, 14-4
Störungstheorie, 9-1, Regel 9-1, ängig 9-1, 9-1
Stochastik, 15-1
Stochastik, 5-1, 15-6
Streuphasen, 12-1
Streupotential, 12-1
Streuung, 12-1

Taylor-Formel, 6-55
Taylor-Polynom, 5-17
thermodynamische Temperatur, 5-2
Thomas-Fermi-Dirac-Methode, 10-1
Tunneleffekt, 16-8

Unbestimmtheit, 3-3
Unruh-Effekt, 14-4

Vakuum, 6-60
Vakuumfluktuation, 6-1
Vektorpotential, 6-66
Verborgene Variablen, 16-1
Victor J. Stenger, 17-2
Volumenkraft, 5-18

Wahrscheinlichkeit, 15-5
Wahrscheinlichkeitsdichte, 5-2, 15-5
Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, 3-3
Wahrscheinlichkeitsrechnung, 15-1
Wasserstoffatom, 6-13
 Energieniveaus, 6-30
 Entartung, 6-33
 gebundene Zustände, 6-13
 homogenes Magnetfeld, 6-88
 Linien, 6-79
Wasserstoffatom, 6-13, 6-60–6-63
Welle-Teilchen-Dualismus, 3-2, 3-4

Wellenfunktion, 3-3, 3-4
Weyl-Gleichung, 7-20
WKB-Näherung, 6-45

Yukawa-Potential, 12-2

Zeeman-Effekt, 13-1
 normaler, 6-88
Zentralkraft, 6-38, 6-44
Zufall, 16-2
Zugeordnete Legendrepolygone, 6-23
Zustandsfunktion, 3-3
Zweikörperproblem, 6-29, 6-33

Offene Punkte

| | | |
|-----|--|------|
| 1. | To Do (Abriss ist noch unvollständig.) | 4-1 |
| 2. | To Do (Fehler) | 5-4 |
| 3. | To Do (nächste Formel falsch) | 5-6 |
| 4. | To Do (Abbildung einfügen) | 6-2 |
| 5. | To Do (Abbildung einfügen) | 6-6 |
| 6. | To Do (Abbildung einfügen) | 6-6 |
| 7. | To Do (Abbildung einfügen) | 6-27 |
| 8. | To Do (Abbildung einfügen) | 6-30 |
| 9. | To Do (Abbildung einfügen) | 6-39 |
| 10. | To Do (Abbildung einfügen) | 6-39 |
| 11. | To Do (Abbildung einfügen) | 6-43 |
| 12. | To Do (Formel überprüfen) | 6-48 |
| 13. | To Do (Abbildung einfügen) | 6-51 |
| 14. | To Do (Abbildung einfügen) | 6-51 |
| 15. | To Do (Hier Abbildung einfügen.) | 6-55 |
| 16. | To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 8-1 |
| 17. | To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 8-1 |
| 18. | To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 8-1 |
| 19. | To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 8-1 |
| 20. | To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 8-1 |
| 21. | To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 8-1 |
| 22. | To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 8-2 |
| 23. | To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 8-2 |
| 24. | To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 8-2 |
| 25. | To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 9-1 |
| 26. | To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 9-1 |
| 27. | To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 9-1 |
| 28. | To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 9-1 |
| 29. | To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 9-1 |
| 30. | To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 9-1 |

| | |
|--|------|
| 31. To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 10-1 |
| 32. To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 10-1 |
| 33. To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 11-1 |
| 34. To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 11-1 |
| 35. To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 11-1 |
| 36. To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 12-1 |
| 37. To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 12-1 |
| 38. To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 12-1 |
| 39. To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 12-1 |
| 40. To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 12-1 |
| 41. To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 12-1 |
| 42. To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 12-2 |
| 43. To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 13-1 |
| 44. To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 13-1 |
| 45. To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 13-1 |
| 46. To Do (Kapitel / Section fehlt noch.) | 13-1 |
| 47. To Do (In seperates Kapitel im Anhang schieben.) | 15-2 |

Editorielle Anmerkungen

