I. GRUNDLAGENPROBLEME DER QUANTENMECHANIK I: OBJEKTIVIERBARKEIT, KOMPLEMENTARITÄT UND MESSPROBLEM

A. Axiome der Quantenmechanik

Die Quantenmechanik ist eine **fundamentale Theorie**. Sie kann daher nicht aus einer anderen Theorie abgeleitet werden. Jede formale Theorie baut auf **Axiomen** auf. Diese sind nicht aus tieferliegenden Prinzipien ableitbar, ihre Begründung muss auf andere Art erfolgen (z.B. SG). Sie können meist auch nicht direkt experimentell überprüft werden, sondern nur ihre Folgerungen. Axiome können akzeptiert werden aus Prinzipien der Einfachheit, Schönheit (!!) und daraus wie es ihnen gelingt, ein formales System zu strukturieren. Wie sich formale Systeme (Theorien wie QM, Klass. Mechanik etc.) auf die 'Wirklichkeit' beziehen ist eine komplexe Frage und wird in der Philosophiegeschichte sehr unterschiedlich beantwortet.

Axiome der QM (wie man sie im Lehrbuch findet):

- 1. Der **Zustand** eines Systems wird durch die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ beschrieben.
- 2. **Observable** werden durch hermitesche Operatoren \hat{A} repräsentiert.
- 3. Erwartungswerte erhält man durch Mittelwertbildung:

$$<\hat{A}> = <\Psi(x,t)|\hat{A}|\Psi(x,t)>$$

4. Die **Dynamik** des Systems ist durch die Schrödingergleichung (o. Dirac) gegeben:

$$i\hbar\dot{\Psi}(x,t) = \hat{H}\Psi(x,t)$$

5. **Messung:** Wenn in einer Messung der Eigenwert a_n des Operators \hat{A} gefunden wurde, so ist die Wellenfunktion in den entsprechenden Eigenzustand $\phi_n(x,t)$ des Operators übergegangen.

$$\Psi(x,t) \to \phi_n(x,t)$$

Diese **Axiome** bilden das Grundgerüst der QM: Sie formulieren die grundlegenden Gesetze (z.B: SG). Diese Gesetze können nun auf spezielle Probleme angewendet werden. Zu diesen Axiomen kommen noch die **Rechenregeln** aus der Mathematik (Hilbertraum, Integration,

lineare Algebra etc.). Die Vermittlung auf Anwendungen geschieht meist über **Modelle**. Wie wir gesehen haben, wird für die meisten Probleme gar nicht die SG direkt gelöst, sondern es werden Näherungen gesucht (HF, DFT ...).

B. Was ist $\Psi(x,t)$?

- Schrödinger: **Materiewelle**, d.h. 'Verschmierung' des Teilchens über den Raumbereich. $\Psi^2(x,t)dxdt$ ist wie bei der klassischen Welle die Intensität, also ein Maß für die 'Menge'.
- Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation: $\Psi^2(x,t)dxdt$ ist die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen am Ort x und zur Zeit t zu finden. Worauf bezieht sich $\Psi(x,t)$?
 - Einteilchen Interpretation: $\Psi(x,t)$ beschreibt ein Teilchen, z.B. ein Elektron.
 - Statistische (Ensemble) Interpretation: $\Psi(x,t)$ kann sich nur auf ein statistisches Ensemble gleich **präparierter** Teilchen bezeihen. $|\Psi(x,t)|^2$ gibt dann relative Häufigkeiten wieder. Die QM macht KEINE Aussagen über einzelne Teilchen, sondern nur über statistische Gesamtheiten.
 - Teilsystem oder das grosse Ganze?
 - * Wie wir noch diskutieren werden, gibt es in der QM immer einen Bezug zu einer Messung. Daher wird i.A. einem Teilsystem eine Wellenfunktion zugeschrieben, das etwa in Wechselwirkung mit einem Messgerät steht. Exemplarisch dazu die Position von Niels Bohr (Kopenhagener Interpretation). Die Ergebnisse von Messungen werden in klassischen Begriffen beschrieben. Beim 'Zeigerablesen' gibt es keine Unschärfe, Bohr schloss daraus auf das Primat der klassischen Physik. Diese ist immer schon vorausgesetzt, wenn wir Quantensysteme messen, die Quantensysteme können daher nur einen Teil des Kosmos ausmachen. Diese Position wurde später relativiert. Wie wir sehen werden, hat v. Neumann eine QM Beschreibung auch des Messgeräts (Umgebung) eingeführt. Allerdings bleibt dann ein Problem, wie man klassische Eigenschaften verstehen soll. Die Grenze QM-KM, wie von Bohr als gesetzt angenommen, bleibt unklar.

* In der Kosmologie gibt es eine Verschärfung der 'Einteilcheninterpretation'. Hier wird $\Psi(x,t)$ für das komplette Universum (einschliesslich Beobachter) angesetzt. Wie wir sehen werden, erzwingt das eine ganz bestimmte Interpretation ('Everett Mehrwelten'), von der aber fraglich ist, ob sie konsistent formulierbar ist.

C. Messprozess, gleichzeitige Messbarkeit, Unschärferelation, Komplementarität und Objektivierung

1. Messung

Bei der Messung einer Observablen \hat{A} wird das System in einen Eigenzustand der Observablen ϕ_n überführt:

$$\Psi(x,t) \to \phi_n \tag{1}$$

Dies ergibt sich nicht zwangsläufig aus dem Formalismus der QM, muss daher als Messpostulat extra gefordert werden (daher Axiom 5 oben). Dieser Übergang ist ein unstetiger Prozess.

Da \tilde{A} hermitesch ist, bilden die ϕ_n ein vollständiges Orthonormalsystem (VONS), man kann also entwickeln:

$$\Psi(x,t) = \sum_{n} c_n \phi_n$$

mit $c_n^2 = \langle \Psi(x,t)|\phi_n \rangle^2$ der Wahrscheinlichkeit, dass der Zustand ϕ_n vorliegt, also der entsprechende Eigenwert A_n gemessen wird.

$$\hat{A}\phi_n = A_n\phi_n$$

Daher nennt man die Veränderung des Zustands beim Messprozess auch Zustandsreduktion (Kollaps), da durch

$$\Psi(x,t) = \sum_{n} c_n \phi_n \to \phi_n \tag{2}$$

'plötzlich' nicht mehr die **Superposition** der ϕ_n vorliegt, sondern der Zustand auf einen Eigenvektor reduziert wurde.

2. Gleichzeitige Messbarkeit zweier Observablen, Vertauschungsrelationen, Unschärferelation

In der Messung wird also eine Wellenfunktion 'reduziert', d.h. mit der Wahrscheinlichkeit c_n^2 in den Eigenzustand ϕ_n des Operators \hat{A} überführt. Was nun, wenn ich gleich noch eine Messung anschliesse?

Messung A:

$$\Psi(x,t) \to \phi_n$$

Messung B:

$$\phi_n \rightarrow ??$$

Hier kann man nun zwei Fälle unterscheiden:

a) ϕ_n ist auch eine Eigenfunktion des Operators \hat{B} . Dann wird der Zustand nicht verändert, und der Eigenwert B_n wird gemessen:

$$\hat{B}\phi_n = B_n\phi_n$$

b) ϕ_n ist keine Eigenfunktion des Operators \hat{B} : Dann wird der Zustand selbst verändert, und ein Eigenzustand ψ_m von \hat{B} resultiert,

$$\phi_n \to \psi_m$$

man misst dann den Wert B_m . Wenn man nun A nochmals misst, wird nicht wieder A_n erhalten, sondern der gleiche Formalismus wie oben muss nochmals auf ψ_m angewendet werden. A und B sind also nicht gleichzeitig messbar, wenn die Operatoren nicht die gleichen Eigenfunktionen haben. Ein Maß für die gleichzeitige Messbarkeit ist der Kommutator

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Wenn A und B die gleichen Eigenfunktionen haben, verschwindet der Kommutator und man sagt, die Operatoren vertauschen.

$$[\hat{A}, \hat{B}]\phi_n = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\phi_n = A_n B_n \phi_n - B_n A_n \phi_n = 0$$

Insbesondere kann man für die Varianzen $\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$ zeigen, dass gilt:

$$\Delta A \Delta B = 1/2 < [A, B] >$$

Für die Observablen x und p führt das unmittelbar zu:

$$\Delta x \Delta p = 1/2\hbar$$

Es taucht also in der QM die Situation auf, dass zwei Observable nicht gleichzeitig beliebig genau messbar sind. Solche Observablen werden auch komplementär genannt. Ein prominentes Beispiel sind Ort und Impuls, x und p.

3. Interpretation der Unbestimmtheitsrelation (UR)

An dieser Stelle wird der Unterschied zur klassischen Physik deutlich: hier wird eigentlich nie über Messungen geredet. Den klassischen Objekten werden Eigenschaften wie Ort, Impuls etc. zugeschrieben, d.h. diese Objekte haben diese Eigenschaften, unabhängig von der Messung. In der klass. Physik sind Objekte Träger von Eigenschaften. Man sagt auch, alle Eigenschaften sind 'objektivierbar', d.h. dem Objekt zuschreibbar, unabhängig davon, ob sie jemand feststellt.

In der QM entzünden sich durch die komplementären Eigenschaften (Observablen) genau an diesem Punkt die Interpretationsprobleme:

• Subjektivistische Positionen (epistemisch): alle Eigenschafen sind objektivierbar, wir können sie nur nicht messen. D.h., die Eigenschaften liegen im Objekt vor, wir sind nur nicht in der Lage, sie auszulesen. Die UR markieren nur unser maximales Wissen über Quantenobjekte. Die Messgeräte sind Beschränkungen unterworfen, die die gleichzeitig scharfe Messung komplementärer Observablen verhindern.

• Objektivistische Positionen (realistisch): Die UR drücken ein Gesetz aus. Die Eigenschaften sind nicht vollständig bestimmt, d.h. nicht alle Eigenschaften sind dem QM Objekt gleichzeitig zuschreibbar, d.h. sie liegen nicht vor!

Quer dazu liegt noch die Unterscheidung in Einteilchen- und Ensembleinterpretation.

Heisenberg:

Heisenberg schlug eine **operationale** Definition von Eigenschaften vor. Wenn wir über Objekte und Eigenschaften reden, dann übernehmen wir unkritisch Vorgaben aus der Grammatik unserer Umgangssprache (grammatische Struktur: Prädikat-Kopula-Objekt). Diese tut immer so, als würden Objekte unabhängig vom Beobachter vorliegen, die zudem festgelegte Eigenschaften haben (die es nur noch zu bestimmen gilt!).

Wenn wir nun in neue Bereiche vordringen, muss man diesem 'Vorurteil' grundlegend misstrauen. Eigenschaften können dann erst einmal nur über die entsprechenden Messvorschriften definiert werden. Eine absolute Zuschreibung wie in der KM ist nicht möglich, diese setzt zu viel als gegeben voraus.

Zur Illustration der UR verwendet Heisenberg das Beispiel des Gausschen Wellenpaketes. Hier werden ebene Wellen überlagert, was zu einer räumlichen Lokalisierung führt. Dabei lässt sich die Orts-Impuls UR zwanglos ableiten.

Desweiteren gibt er ein Beispiel, wie etwa der Ort mit Hilfe von Photonen gemessen wird. Haben diese eine Wellenlänge λ im Bereich der Objektgrösse, kann man den Ort x auflösen. Allerdings wird dann auf das Teilchen ein Impuls $p = h/\lambda$ übertragen, der Impuls des Teilchens wird also gestört, d.h. die de Broglie Wellenlänge verändert.

Heisenbergs Interpretation der QM Wellenfunktion bezieht sich also zum Einen auf Einzelobjekte. Zum Anderen ist sie subjektivistisch: die Kenntnis über QM Objekte ist durch den Eingriff beim Messen begrenzt.

Viele **subjektivistische Interpretationen** behaupten, dass Quantenobjekte durchaus alle Eigenschaften gleichzeitig besitzen. Es sei nur die Limitation unserer Erkenntnisfähigkeit,

die es uns nicht erlaubt, diese gleichzeitig zu messen (Erkenntnisproblem). Keine Kenntnisnahme (Messung) läuft ohne Störung des Systems ab. Subjektivistische Interpretationen betonen diesen Aspekt des messenden Eingriffs. Jede Wahrnehmung ist Störung. Diese Perspektive kann man am Doppelspaltversuch (s.u.) verdeutlichen. Extreme Positionen behaupten, daß das Subjekt die Erscheinungsform des Objektes bestimmt, sei es durch die Wahl der Messappartur, oder sogar durch das Bewusstsein.

Konträr dazu ist die

Ensembleinterpretation.

Sie bezieht sich nie auf Einzelobjekte, sondern auf ein **Ensemble identisch präpa**rierter Quantensysteme. Die QM macht keine Aussagen über Einzelsysteme.

Der Zustand (Wellenfunktion) wird durch das **Präparationsverfahren** bestimmt, z.B. ein Atomstrahl, der einen Geschwindigkeitsfilter durchlaufen hat.

Das **Präparationsverfahren** legt nicht das Ergebnis von Einzelmessungen fest. Z.B. ist es völlig unbestimmt, wo ein Atom dieses Ensembles hinter dem Doppelspalt auftrifft. Die Wellenfunktion gibt jedoch die relativen Häufigkeiten für Elemente des Ensembles wieder. Die Wahrscheinlichkeiten lassen sich ja nicht durch eine Einzelmessung bestimmen, sondern nur durch wiederholte Messung am Ensemble.

Genauso die **Messung** von Observablen: Will man die Häufigkeitsverteilungen von Ort und Impuls bestimmen, so wird das Ensemble geteilt: an der einen Hälfte wird der Ort bestimmt, an der Anderen der Impuls. So bekommt man die Δx und Δp , welche als Standardabweichungen interpretiert werden.

Interpretation der UR: es ist nicht möglich ein Ensemble so zu präparieren, dass das Produkt der Standardabweichungen kleiner als $\hbar/2$ ist. Es wird nicht gleichzeitig Impuls und Ort EINES Teilchens gemessen!! Die UR wird daher nicht als Störung interpretiert, sondern als fundamentale Aussage über die Natur der Quantenobjekte.

Nach der 'Heisenberginterpretation' der UR liegen die Eigenschaften 'Bahn' und 'In-

terferenz' gleichzeitig vor, wir können es nur nicht feststellen. Die Ensembleinterpretation macht nur statstische Aussagen, hier ist die Unschärfe nichts, was man einem Einzelobjekt zuschreiben könnte.

Wie wir noch weiter sehen werden, ist die **Unbestimmtheit** (nicht Unschärfe!!!) eine zentrale Eigenschaft mikroskopischer Objekte.

D. Der Doppelspaltversuch

- Versuch mit grosser Intensität (viele Photonen/Elektronen etc.) Interferenzmuster sofort sichtbar.
- Versuch mit geringer Intensität, sodass jeweils nur ein Teilchen im Apparat ist \rightarrow Einzelne Schwärzungen, allerdings ist der Auftreffort nicht deterministisch vorhersagbar. Erst wenn viele Teilchen die Apparatur durchlaufen haben, ist das Interferenzmuster sichtbar. Allerdings: die Wahrscheinlichkeiten der einzelnen Einschläge ist mit $|\Psi(x,t)|^2$ gegeben. Wenn jeweils nur ein Spalt offen ist: keine Interferenz. D.h. auch wenn nur jeweils ein Teilchen "durch den Doppelspalt geht", ist die Nicht-Feststellung des Ortes elementar. Kann man also sagen, 'Ein Teilchen geht durch beide Spalte'?
- Viele Doppelspalte, durch die jeweils nur ein Teilchen geht: summiert man die Schwärzungen an den Schirmen in ein Bild, so ergibt sich das Gleiche wie oben.
- Diese Versuche wurden mit Photonen, Elektronen, Atomen und Molekülen (C60) durchgeführt. Zeilinger (Wien) ist der Meinung, dass es nicht wirklich eine Grenze nach oben gibt, z.B. hält er Interferenzversuche mit Bakterien für möglich.

Komplementarität: Offensichtlich liegen Wellen-und Teilchencharakter nicht gleichzeitig vor.

Das Verstörende an dem Doppelspaltversuch geht über den Komplementaritätsaspekt hinaus. Sei Ψ die Anfangswellenfunktion, dann sind ϕ_1 und ϕ_2 die (normierten) Wellenfunktionen beim Passieren der Spalte, d.h. charakteristisch für ϕ_1 ist, daß hier das Teilchen den Spalt 1 passiert. Nun ist die Gesamtwellenfunktion hinter dem Spalt die **lineare** Superposition:

$$\Psi = c_1 \phi_1 + c_2 \phi_2 \tag{3}$$

Berechnen wir die Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf dem Schirm im Doppelspaltexperiment, so ergibt sich:

$$\Psi^2 = (c_1\phi_1 + c_2\phi_2)^2 = c_1^2\phi_1^2 + c_2^2\phi_2^2 + c_1^*c_2\phi_1^*\phi_2 + c_2^*c_1\phi_2^*\phi_1$$
(4)

Wenn wir nun zuerst eine Zeit den einen, dann den anderen Spalt geschlossen halten, erhalten wir die Überlagerung der Beugungsbilder der Einfachspalte:

$$\Psi^2 = (c_1\phi_1 + c_2\phi_2)^2 \to c_1^2\phi_1^2 + c_2^2\phi_2^2 \tag{5}$$

d.h. das was für die Interferenz charakteristisch ist, ist der Interferenzterm:

$$c_1^* c_2 \phi_1^* \phi_2 + c_2^* c_1 \phi_2^* \phi_1 \tag{6}$$

Ohne diesen könnte man sagen, die Teilchen gehen entweder durch Spalt 1 oder durch Spalt 2. Der Interferenzterm, der offensichtlich verschwindet wenn wir den Durchgangsort feststellen, stellt eine Kombination beider Wege dar. Man kann nun sagen, die Teilchen gehen durch beide Spalte. Dies ist eine Redeweise, die sich an den Konzepten der klassischen Physik orientiert: Die Vorstellung von Objekten, die klar bestimmbare Eigenschaften haben. Damit kommen wir zu einem Bild, in dem sich das Teilchen 'irgendwie' teilt, durch beide Spalte 'gleichzeitig' geht, und dann am Schirm 'mit sich selbst interferiert'. Dies ist jedoch ein Bild, das nicht unbedingt nötig ist und das die Datenlage nicht hergibt.

Offensichtlich ist nur, daß der Weg **unbestimmt** ist. Wir sehen hieran, dassdie Unbestimmtheit des Ortes nicht nur unserer Messungenauigkeit geschuldet ist, sondern dass die Unbestimmtheit des Ortes eine Voraussetzung für das Erscheinen des Interferenzmusters ist.

Radikalisiert wird dies in den sogenannten **delayed choice** Experimenten (Abb. 1). Hierbei wird erst nach dem Passieren des Doppelspalts/Strahlteilers 'entschieden', ob eine

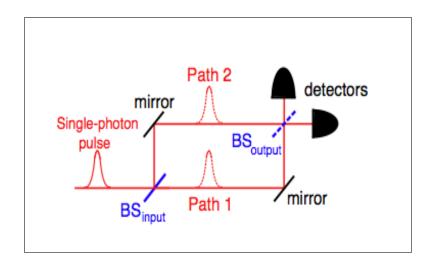


Abbildung 1: http://arxiv.org/abs/quant-ph/0610241

Weg oder eine Interferenzmessung durchgeführt wird. Je nach Wahl des Experiments wird das entsprechende Ergebnis erhalten. So kann eine Entscheidung zur Interferenzmessung nach Passieren des Strahlteilers erfolgen.

1. $Messung = St\"{o}rung$

Wenn man den Spalt identifizieren möchte, durch den das Teilchen geht, dann macht man das z.B. mit Hilfe von Photonen, die parallel zum Doppelspalt eingestrahlt werden. Haben diese eine Wellenlänge λ kleiner als der Spaltabstand d, dann kann man den Ort x auflösen. Allerdings wird dann auf das Teilchen ein Impuls $p = h/\lambda$ übertragen, der Impuls des Teilchens wird also gestört, d.h. die de Broglie Wellenlänge verändert. Damit wird die Kohärenz gestört und das Interferenzmuster verschwindet. In dieser Sichtweise hat das Teilchen gleichzeitig einen wohldefinierten Ort und Impuls, unsere Messapparaturen sind nur nicht in der Lage, diesen zu messen.

2. Messung = Verschränkung

Sehr interessant sind in diesem Kontext 'störungsfreie' Interferenzversuche. Dabei werden vor die Spalte Kavitäten gesetzt. Nun kann man den Versuch mit elektronisch angeregten

Atomen machen. Wenn man die Dimension der Kavität und Geschwindigkeit der Atome richtig wählt, kann das Atom durch Resonanz in der Kavität elektronisch abgeregt werden, es emittiert ein Photon in den Hohlraum, das gemessen wird. Damit wird die sogenannte Welcher-Weg-Information gewonnen, OHNE dass ein Impulsübertrag stattfindet. Es kann also der Durchgangsort bestimmt werden, ohne dass das Atom in der obigen Weise gestört wird.

Dennoch: Wenn der Ort des Teilchens registriert wird, verschwindet das Interferenzmuster, wird er nicht registriert, ist es sichtbar. Damit zeigt sich, dass allein die Festlegung des Ortes das Interferenzmuster zerstört.

Wichtig: dies passiert auch dann, wenn die Information nicht ausgelesen wird. Es reicht, dass diese Information gewonnen wurde.

Eine Radikalisierung wiederum stellen sogenannte **quantum eraser** Experimente dar. Diese werden mit Photonen durchgeführt und es ist möglich, die 'Welcher-Weg' Information vor der Messung wieder zu löschen. In diesem Falle tritt wieder Interferenz auf.

Wie kann man das verstehen?

Wir haben die Wellenfunktion der Atome, und die Wellenfunktion der Kavitäten. Die Letztere sei $|M_1\rangle$, wenn das Atom durch Kavität 1 ging, $|M_2\rangle$, wenn das Atom durch Kavität 2 ging. Offensichtlich gilt:

$$\langle M_i|M_j \rangle = \delta_{ij},$$

denn das Atom kann entweder in 1 oder 2 registriert werden, die Zustände der Kavitäten sind orthogonal. Die obige Wellenfunktion für das Atom

$$|\Psi> = c_1|\phi_1> + c_2|\phi_2>,$$
 (7)

wird zu:

$$|\Phi\rangle = c_1|\phi_1\rangle |M_1\rangle + c_2|\phi_2\rangle |M_2\rangle,$$
 (8)

denn der Detektorzustand ist in M_1 bzw M_2 wenn das Teilchen durch 1 oder 2 geht. Wir werden das weiter unten beim Messprozess nochmals genauer diskutieren. Wichtig ist hier: Die Detektorzustände sind vollständig mit den Atomzuständen **korreliert**, wir haben also ein vollständig korreliertes System. Wenn die Wellenfunktionen zweier Subsysteme derart korreliert sind, nennt man das **verschränkt**.

D.h., die Wahrscheinlichkeiten für Atomzustände und Detektorzustände sind nicht mehr unabhängig voneinander. Der Atomzustand alleine ist unbestimmt, d.h. das Atom liegt zu 50% in dem einen oder anderen Zustand vor. Kenne ich jedoch den Detektorzustand, so ist die Unbestimmtheit des Atomzustandes aufgehoben.

Berechnen wir nun die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Atoms hinter dem Detektor, so ergibt sich:

$$<\Phi|\Phi> = c_1^2 |\phi_1|^2 < M_1 |M_1> + c_2^2 |\phi_2|^2 < M_2 |M_2> +$$

$$c_1^* c_2 \phi_1^* \phi_2 < M_1 |M_2> + c_2^* c_1 \phi_2^* \phi_1 < M_2 |M_1> =$$

$$c_1^2 |\phi_1|^2 + c_2^2 |\phi_2|^2$$
(9)

Das Interferenzbild ist also verschwunden, wie oben diskutiert. Wichtig ist:

- Das Interferenzbild ist NICHT durch Impuls-oder Energieübertrag während der Wechselwirkung zerstört worden. Dies geschah einzig durch die Verschränkung der Wellenfunktionen.
- Dies ist ein **objektiver** Vorgang, es ist egal, ob der Experimentator die 'Welcher-Weg'-Information ausliest. Die Interferenzterme werden nicht durch das 'Bewusstsein' zerstört! Die Kenntnisnahme ändert nichts. Hier ist kein subjektives Moment, sondern alles basiert auf einem Vorgang, der allein in den Objekten begründet ist (objektiv).

E. Superpositionen und Dichtematrix

Das Charakteristische der QM ist, dass man nahezu unbegrenzt **Superpositionen** von Wellenfunktionen bilden kann. Das ist aber gleichzeitig auch die Quelle einiger Probleme. Wir hatten solche Darstellungen z.B. bei der Basissatzentwicklung kennengelernt. Hier

wird das MO als Superposition/Überlagerung verschiedener AO's dargestellt. Problematisch wird dies, wenn die ϕ_i verschiedene Eigenschaften repräsentieren. Dann muss man entweder sagen, dass diese Eigenschaften gleichzeitig vorliegen, oder dass diese Eigenschaft unbestimmt ist.

Beispiele:

•

$$\Psi = \sum_{k} c_k e^{ikx}$$

Dies ist eine Überlagerung verschiedener ebener Wellen in einem Wellenpaket. Das Wellenpaket hat keinen bestimmten Impuls, der Impuls ist **unbestimmt**

•

$$\Psi = \sum_{\mu} c_{\mu} \eta_{\mu}$$

Das MO ist eine Superposition von AO's. Das Elektron ist nicht in einem der AO's lokalisiert, d.h. der Ort ist unbestimmt. In der Quantenchemie wird mit Interpretationsfragen recht 'hemdsärmelig' umgegangen. Es geht hier eben oft nur darum, etwas zu berechnen. So werden z.B. in einer Mulliken Popuationsanalyse die 'Interferenzterme'

$$c_{\mu}c_{\nu}\eta_{\mu}\eta_{\nu}$$

einfach zwischen den Orbitalen aufgeteilt (was streng genommen nicht geht!, siehe Diskussion unten. Das wäre, als würde man beim Doppelspalteversuch die Interferenzterme einfach zwischen den beiden Spalten aufteilen!).

• Die Wellenfunktion hinter dem Doppelspalt ist eine Superposition der beiden Wellen aus den Einzelspalten.

Beide Male liegt eine Eigenschaft als klar definierter Impuls oder Ort NICHT vor. Die jeweilige Eigenschaft bleibt unbestimmt. Wir sagen auch nicht, das Wellenpaket hat alle Impulse gleichzeitig. Eher denken wir es als 'verschmiert'. Hier ist die Ensembleinterpretation einfacher zu verstehen als die Einteilcheninterpretation. Das Wellenpaket ist ein Ensemble von Teilchen mit der entsprechenden Impulsverteilung (bzw. Ortsverteilung). Diese Beispiele sind inzwischen vertraut und haben nichts Verstörendes. Dies ändert sich,

wenn man Superpositionen von offensichtlich distinkten Eigenschaften konstruiert.

Gerade der Doppelspaltvesuch zeigt, dass man nicht sagen kann: 'wir können den Ort nur nicht genau messen', sondern: 'er ist 'objektiv' unFNstimmt'. Die Observable 'Weg' (Weg 1 oder Weg 2) ist nicht feststellbar, will man nicht die Interferenz zerstören. Aus dem Interferenzmuster kann man die Wellenlänge (Impuls) bestimmen, das Interferenzmuster stellt damit eine Impulsmessung dar. Die Oberservable Weg ist nicht objektivierbar, d.h. sie ist liegt nicht objektiv vor. Sie ist nicht nur subjektiv nicht zugänglich (störungsfreie Messung), sondern objektiv nicht bestimmt.

Wie beim Wellenpaket oder beim MO Beispiel macht es keinen Sinn zu sagen, die Observablen haben bestimmte Werte, wir können diese nur nicht genau messen. Das Charakteristikum der QM ist gerade, dass Zustände möglich sind, bei denen diese Observablen unbestimmt sind. Es liegen nicht alle Eigenschaften im Objekt vor, einige können (objektiv) unbestimmt sein.

Wie kann man nun etwas besser bestimmen (quantifizieren), ob sich ein System in einem bestimmten Quantenzustand befindet? Dazu werden üblicherweise die sogenannten Projektionsoperatoren eingeführt. Zunächst dazu ein Beispiel aus dem Euklidischen Vektorraum:

Sei \vec{r} ein beliebiger, **normierter** Vektor. Um seine Komponente in Richtung des Einheitsvekors \vec{e}_3 zu bestimmen, projezieren wir ihn auf \vec{e}_3 folgendermassen:

$$\vec{e}_3 * \vec{r} = < \vec{e}_3 | \vec{r} >$$

Somit erhalten wir den auf \vec{e}_3 projizierten Vektor:

$$\vec{e}_3 < \vec{e}_3 | \vec{r} >$$

Dazu können wir auch den folgenden Projektionsoperator einführen, der zuerst das Skalarprodukt eines Vektors mit \vec{e}_3 bildet, und dann mit \vec{e}_3 multipliziert:

$$\hat{P} = |\vec{e}_3> < \vec{e}_3|$$

Hier wird nur die in der QM gebräuchliche Braketschreibweise verwendet.

Im Hilbertraum ist $\hat{P} = |\Psi> < \Psi|$ ein Operator mit Eigenwerten 0 und 1. D.h., dieser Operator stellt fest, ob ein Zustand vorliegt, oder nicht:

$$\hat{P}_{\Psi}|\Psi>=1*|\Psi>$$

Für zu $|\Psi\rangle$ orthonormale Zustände ist der Eigenwert gleich 0. Anstatt mit $|\Psi\rangle$ kann man das System auch durch den **Projektionsoperator** beschreiben. $|\Psi\rangle$ ist der Eigenzustand des Projektionsoperators, der Erwartungswert des Projektionsoperators $\langle \hat{P}_{\Psi}\rangle$ ist dann 0 oder 1 (Zustand liegt vor oder nicht!).

In der Quantenmechanik gibt es die wichtige Unterscheidung zwischen **reinen** und **ge-mischten** Zuständen. Ein gemischter Zustand beschreibt beispielsweise ein Gemenge von gleichpräparierten Photonen (z.B. gleiche Ortswellenfunktion), die mit Wahrscheinlichkeit p_1 in x-Richtung polarisiert sind und mit der Wahrscheinlichkeit p_2 in y-Richtung polarisiert sind. Man beschreibt dieses System, wie einen Haufen roter (p_1) und blauer Kugeln (p_2) , durch den statistischen Operator:

$$\rho = p_1 |\Psi_1 > < \Psi_1| + p_2 |\Psi_2 > < \Psi_2| \tag{10}$$

Der Erwartungswert diese Operators gibt die relativen Häufigkeiten wieder: p_n ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß der Zustand $|\Psi_n\rangle$ vorliegt. Beachte, daß es sich hier um die **klassisch** statistische Unsicherheit handelt (wie bei Ziehung der Lottozahlen!). Eine Überlagerung von Zuständen wir in Gl. 10 heisst **inkohäherent**.

Warum macht man das nun, wofür dient dieser statistische Operator? Nunja, genau zur Beschreibung von solch inkohärenten, statistischen Ensembles. Wenn wir nämlich einen **reinen** Zustand wie gewohnt als **kohärente Superposition** von Wellenfunktionen ansetzen:

$$\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2, \tag{11}$$

so erhalten wir als Projektionsoperator:

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| = |c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2\rangle\langle c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2| =$$

$$c_1^2|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + c_2^2|\Psi_2\rangle\langle\Psi_2| + c_1^*c_2|\Psi_2\rangle\langle\Psi_1| + c_2^*c_1|\Psi_1\rangle\langle\Psi_2|$$
(12)

Hier sind nun die zwei Zustände kohärent überlagert. Offensichtlich kann man nur dann sagen, daß die Zustände wie in einem statistischen Gemisch mit den Wahrscheinlichkeiten $c_1^2 = p_1$ und $c_2^2 = p_2$ vorliegen, wenn die sogenannten Interferenzterme $c_1^*c_2|\Psi_2><\Psi_1|+cc$ wegfallen. Vergleiche mit der Gleichung 4 zum Doppelspalt. Diese Terme sind für die charakteristische QM Interferenz verantwortlich, wenn sie wegfallen hat man nur die Überlagerung der Einzelspaltbilder. Wenn sie wegfallen, kann man also sagen, das Teilchen geht durch Spalt 1 oder 2, oder allgemeiner, Eigenschaft 1 oder 2 liegt vor, und zwar mit den Gewichten p_1 und p_2 . Wenn sie nicht wegfallen, kann man diese Eigenschaften nicht zuordnen, d.h. DIESE EIGENSCHAFTEN LIEGEN NICHT VOR, SIE SIND UNBESTIMMT!.

Allgemein kann man einen **reinen** Zustand in einem VONS (siehe oben) darstellen, und der sogenannte **Dichteoperator** hat dann folgende Gestalt:

$$\rho = \sum_{nm} c_n^* c_m |\phi_m| > \langle \phi_n| = \sum_n c_n^2 |\phi_n| > \langle \phi_n| + \sum_{n \neq m} c_n^* c_m |\phi_m| > \langle \phi_n|$$
 (13)

Daher darf man an dieser Stelle die c_n^2 noch nicht als Wahrscheinlichkeiten interpretieren. Am Beispiel des Doppelspaltversuchs: c_n^2 ist nicht die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen durch Spalt 'n' geht und c_m^2 ist nicht die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen durch Spalt 'm' geht. Die Eigenschaft Weg ist **unbestimmt** (und nicht '**unscharf**!). Es taucht Interferenz auf.

Vergleiche damit den statistischen Operator:

$$\rho = \sum_{n} c_n^2 |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \tag{14}$$

Hier sind die c_n^2 wirklich Wahrscheinlichkeiten, d.h. sie geben im Doppelspaltbeispiel die Wahrscheinlichkeit für Weg 'n' an. Hier ist nun eine **Ignoranzinterpretation** möglich,

die $p_n = c_n^2$ sind die **klassischen** Wahrscheinlichkeiten und reflektieren unser Wissen über das System. Damit also definite Messergebnisse vorliegen, müssen die Interferenzterme verschwinden. Und das ist ein zentrales, immer noch ungelöstes Problem der QM. Der Operator Gl. 13 dagegen representiert einen verschränkten Zustand.

F. Nochmals der Messprozess: v. Neumann

Die erste rigirose Formulierung des Messprozesses geht auf den Mathematiker v. Neumann zurück. Sei Ψ die Wellenfuntion des Systems, Φ die Wf der Messapparatur. Sobald das System mit dem Messgerät wechselwirkt, wird dieser Komplex durch eine Gesamtwellenfunktion (wie z.B Kerne und Elektronen im Molekül) beschrieben:

$$|\Psi>|\Phi>$$

Zunächst ein einfaches Beispiel für den Messprozess: Das System besitze zwei Zustände, |1> und |2>, das Messgerät zwei Zustände (Zeigerstellungen) $|M_1>$ und $|M_2>$. Es sei so beschaffen, dass es in den Zustand $|M_1>$ übergeht, wenn |1> vorliegt und in den Zustand $|M_2>$ übergeht, wenn |2> vorliegt:

$$|1>|M_2>\to |1>|M_1>$$

und

$$|2>|M_1> \to |2>|M_2>$$

Diese Übergänge sollen gemäß der QM Dynamik (SG) stattfinden, d.h. es wird vorausgesetzt, dass das Problem sich in Form zweier Hamiltonian für System und Messgerät inklusive Wechselwirkungshamiltonian darstellen lässt.

Der springende Punkt ist nun dieser: Wenn das System sich in einer Superposition befindet $(c_1^2 + c_2^2 = 1)$,

$$|\Psi>=c_1|1>+c_2|2>$$
,

dann wird auch der Gesamtzustand in eine Superposition versetzt:

$$|\Psi > |\Phi > = (c_1|1 > + c_2|2 >)|M > = c_1|1 > |M_1 > + c_2|2 > |M_2 >$$

Zunächst einmal sieht das gut aus, Zustand 1 ist mit Zeigerstellung M_1 verbunden, System und Messapparat sind vollständig korreliert. Das Problem aber ist nun, dass das Messgerät keine definite Zeigerstellung angibt, es ist nicht definitiv in einem Zustand. Das Messgerät hat nicht einmal einen eigenen Zustand, seine Wellenfunktion ist mit der des Systems korreliert. Denn wenn es individuierbar wäre, liesse sich die Gesamtwellenfunktion als Produkt von System- und Messgerät Wellenfunktion schreiben (siehe Hartree vs. HF). Solche korrelierten Zustände werden **verschränkt** genannt.

Daher hat v. Neumann den Kollaps eingeführt, den abrupten Übergang:

$$c_1|1>|M_1>+c_2|2>|M_2>\to |2>|M_2>$$

(oder nach $|1>|M_1>$). Der Übergang ist völlig stochastisch mit den Wahrscheinlichkeiten c_1^2 . Nach diesem Übergang liegt eine Produktwellenfunktion und eine eindeutige Zeigerstellung vor.

Allgemein: Seien nun die Φ_n mögliche Detektor-Eigenzustände, die den Messwerten entsprechen. Die Ψ_n sind dann die Eigenfunktionen des Operators, der diese Observablen repräsentiert. Wir können nun schreiben:

$$|\Psi>=\sum_{n}c_{n}|\Psi_{n}>,$$

und damit:

$$|\Psi>|\Phi> \longrightarrow \sum_n c_n |\Psi_n>|\Phi_n>.$$

Nach der Messung liegt ein definiver Messwert vor, die Wellenfunktion kollabiert also mit der Wahrscheinlichkeit c_n^2 zu:

$$|\Psi_n>|\Phi_n>$$
.

Bei der Diskussion oben haben wir gelernt, dass hier eine Verschränkung der Wellenfunktionen stattgefunden hat. Dabei wurden Objekt und Messgerät in einen korrelierten Zustand überführt, d.h., die beiden können nicht mehr als Einzelsysteme angesehen werden. Insbesondere haben die Wahrscheinlichkeiten, die mit Hilfe der Wellenfunktionen der Einzelsysteme berechnet werden können, keine reale Bedeutung.

Dieser Kollaps ist ein grosses Mirakel der QM. Welcher Dynamik gehorcht er? Die Enwicklung der Wellenfunktion muß doch einem dynamischen Prinzip gehorchen? Die Wellenfunktion entickelt sich gemäß der SG von $\Psi(t=0)$ zu $\Psi(t)$, und im Moment der Messung gibt es einen Sprung

$$\Psi(t) \to \Phi(t) = \Psi_n$$

Was verursacht diesen Sprung? Verdeutlichen kann man das am Doppelspaltexperiment. Die Wellenfunktion vor dem Schirm ist ausgedehnt, überspannt den ganzen Bereich des Schirmes. Aber dann plötzlich gibt es eine Schwärzung an einem Punkt, die Wellenfunktion schnurrt also in einem Moment auf einen Punkt zusammen, 'kollabiert' in diesen Punkt! Und niemand weiß, wie dies geschieht.

Man kann den Messprozess NICHT derart interpretieren, dass nach der Messung zwar ein Wert vorliegt, wir ihn nur nicht kennen (statistische Unsicherheit). Denn wenn dem so wäre, würde man das am Dichteoperator sehen, die Interferenzterme würden fehlen. Nur in diesem Fall liegen die Messwerte schon vor, man hat nur die statistische Unsicherheit.

$$\rho = \sum_{n} c_n^2 |\Psi_n > |\Phi_n > <\Phi_n| < \Psi_n|$$

Das Auftreten der Interferenzterme

$$c_n^* c_m |\Psi_n > |\Phi_n > < \Phi_m| < \Psi_m|$$

sagt uns, dass kein gemischter Zustand vorliegt, die Eigenschaft bzw. der Messwert ist objektiv unbestimmt, eine **Ignoranzinterpretation** der c_n^2 ist nicht möglich. Wenn man also nicht erklären kann, wie die Interferenzterme bei der Messung verschwinden, kann man die Messung nicht erklären. Man kann dann sagen, "die Eigenschaft liegt nicht vor", oder (wenn man diese Variante wählt), analog zum Doppelspaltexperiment ('das Teilchen geht durch beide Spalte'), es liegen beide gleichzeitig vor.

In der Quantenwelt mag man das akzeptieren, aber was, wenn man diese Superpositionen ins makroskopische überträgt?

G. Verschränkung (entanglement)

Durch die Messung entsteht ein verschränkter Zustand, d.h. die beiden Subsysteme können nicht mehr durch individuelle Wellenfunktionen beschrieben werden. Dies führt zu den oben diskutierten Phänomenen.

Wir schreiben einen Gesamtzustand als Produkt (dies ist ein sog. direktes Produkt, kein Skalarprodukt der Vektoren) der Einzelzustände:

$$|\Psi_{tot}\rangle = |\Phi\rangle |\Psi\rangle \tag{15}$$

Sei nun ϕ_n ein VONS für den Zustand Φ , ψ_n ein VONS für den Zustand Ψ . Dann kann man schreiben:

$$|\Psi_{tot}\rangle = \left(\sum_{n} c_n |\phi_n\rangle\right) \left(\sum_{m} c_m |\psi_m\rangle\right) = \sum_{nm} c_n c_m |\phi_n\rangle |\psi_m\rangle$$
 (16)

Dieser Zustand ist ein **Produktzustand** und beschreibt z.B. zwei Elektronen in unendlicher Entfernung. Jedes Elektron wird durch seine Wellenfunktion beschrieben, und die c_n^2 können als Wahrscheinlichkeiten des jeweiligen Einzelsystems interpretiert werden.

Nun betrachten wir eine Wellenfunktion, die sehr änhnlich aussieht:

$$|\Psi_{tot}\rangle = \sum_{nm} c_{nm} |\phi_n\rangle |\psi_m\rangle \tag{17}$$

Wenn nun $c_{nm} = c_n c_m$ gilt, dann nennt man die Wellenfunktion **separabel**, d.h. sie kann auch als Produkt geschrieben werden.

Wenn gilt $c_{nm} \neq c_n c_m$, dann nennt man die Wellenfunktion **nicht-separabel** oder **verschränkt** (**engl. entanglement**). Hier können den Einzelsystemen keine Einzelwahrscheinlichkeiten mehr zugeordnet werden. Sie sind korreliert und diese Korrelation kann selbst über sehr grosse Entfernungen bestehen.

Z.B. wenn ich den Detektorzustand $|M_1\rangle$ messe, ist der Atomzustand festgelegt! Beispiel: Betrachte zwei Elektronen mit den Spinzuständen $|0\rangle$ und $|1\rangle$. Der Zustand

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0>|0>+|1>|1>) \tag{18}$$

ist ein verschränkter Zustand, da er nicht als Produktzustand geschreiben werden kann, d.h. man findet keine Parameter a,b,c,d für die gilt:

$$(|0>|0>+|1>|1>) = (a|0>+b|1>)) (c|0>+d|1>)) =$$

$$= ac|0>|0>+ad|0>|1>+bc|1>|0>+bd|1>|1>$$

$$(19)$$

Damit sind die beiden Spins korreliert. Wenn ich einen Spin messe, gibt es die 50/50 Wahrscheinlichkeit, eine der Einstellung zu finden. Das Gleiche gilt für den Zweiten. Dies gilt jedoch nur für Messungen an unterschiedlichen Systemen. Wenn ich an einem System den einen Spin gemessen habe, liegt der andere fest, bedingt durch die Korrelation. Dies gilt auch für sehr grosse Entfernungen.

Die 'Welcher-Weg' Experimente werden wie folgt erklärt:

Messung ist also Verschränkung mit dem Messgerät. Im obigen Besipiel: Durch die Messung (Verschränkung) wird die Wellenfunktion 'verändert': Wenn der Detektor anspricht, d.h. der Zustand $|M_n>$ wird festgelegt, ist damit auch der Weg $|\phi_n>$ festgelegt. Damit 'kollabiert' die Wellenfunktion und die Interferenz verschwindet. **Dies ist unabhängig vom Ablesen**. D.h., das subjektive Element ist nicht nötig. Die Verschränkung kann jedoch wieder zurückgenommen werden (Quantum eraser), der Weg ist nicht mehr festgelegt und die Interferenz kann wieder auftauchen.

Eine Messung kann also die Wellenfunktion verändern (Kollaps). Dies ist reversibel. Verstörend dabei ist, dass diese **nicht-lokal** geschieht, d.h. mit der Messung die Wellenfunktion im gesamten Raumgebiet betroffen ist. Ein weiteres Problem ist jedoch, dass die Situation des Messgerätes gar nicht so klar ist. Durch die Verschränkung gerät sie selbst in eine Superposition.

H. Die Katze

Das Gedankenexperiment (Schrödinger):

- Versuchsaufbau: Katze in Box mit radioaktivem Präparat, Geigerzähler und Flasche HCN.
- Versuchsablauf: Ein Atom zerfällt, Geigerzähler registriert, zerschlägt Flasche, HCN wird frei, Katze tot!

• Problem: Box ist geschlossen, wir wissen nicht, ob Katze tot oder lebendig ist, erst beim Öffnen der Box.

Wie beschreibt das nun die QM:

Radioaktiver Zerfall: Es gibt zwei Zustände: unzerfallen |u> und zerfallen |z>.

Zur Zeit $t_0 = 0$ sei das Pr \ddot{p} arat unzerfallen:

$$\Psi(t=0) = |u>$$

Zu späteren Zeiten kann man die Wellenfunktion des Präparates als Superposition schreiben:

$$\Psi = c_1|u > +c_2|z >$$

Die Wellenfunktion Φ der Katze habe zwei Eigenzustände, |tot> und |lebt>: Somit erhalten wir mit der v. Neumannschen Beschreibung zu t=0:

$$|\Psi>|\Phi>=|u>|lebt>$$

und zu späteren Zeiten (Katze wird als Messapparat beschrieben):

$$|\Psi > |\Phi > = c_1|u > |lebt > +c_2|z > |tot >$$

Nun bilden wir die Dichtematrix

$$\rho = c_1^2 |u| |lebt| < u| < lebt| + c_2^2 |z| |tot| < z| < tot| + c_1^* c_2 |u| |lebt| < z| < tot| + c.c.$$

Das Auftreten der Interferenzterme

$$c_1^*c_2|u>|lebt> < z| < tot| + c.c.$$

ist hier wieder das Problem, wie oben beim Messprozess: Man kann nicht sagen, "die Katze ist entweder tot, oder lebendig", denn: Die Wellenfunktion der Katze ist mit der des radiaoktiven Präparates verschränkt. Die Katze ist in einer Superposition, je nach Interpretation kann man sagen:

- "Die Katze ist GLEICHZEITIG tot und lebendig"
- "Die Eigenschaft tot oder lebendig kann man der Katze nicht zuschreiben, sie ist weder noch, die Eigenschaft ist unbstimmt".

Interessant dabei: viele andere Eigenschaften wie Gewicht, Farbe etc. kann man der Katze klar zuschreiben, nur nicht 'tot' oder 'lebendig'.

Der Messprozess (Katze) hat genau betrachtet 2 Probleme:

- 1. Die Interferenzterme: erst wenn diese verschwunden sind, kann man die c_1^2 als Wahrscheinlichkeiten interpretieren, dass die Katze tot oder lebendig ist.
- 2. Das zweite Problem ist der 'Kollaps' der Wellenfunktion. Sobald wir Messen, ist das System in einem Eindeutigen Zustand, es gibt keine Wahrscheinlichkeit mehr, sondern Sicherheit. Der Kollaps lässt sich hier als das Verschwinden von Möglichkeiten verstehen. Was das Beispiel so brisant macht ist, dass Messen hier nur Deckel aufmachen und Nachsehen bedeutet. Das reine Reinschauen also, führt zum Kollaps (und nicht mal eine Störung, wie oben diskutiert).

Das Schöne an diesem Beispiel ist, daß die Eigenart der QM ins Maroskopische transportiert wurde, wo sie eine Paradoxie erzeugt. Das Beispiel ist nicht irrelevant, denn:

- es ist nur eine andere Formulierung für das Messproblem: wenn das Katzenproblem gelöst werden kann, ist auch das Messproblem gelöst. Und es ist doch komisch eine Theorie zu haben, die hier ein Problem hat (In der klassischen Physik wird über das Messen gar nicht geredet, warum?)
- offensichtlich gibt es solche Probleme in der makroskopischen Welt nicht. Wenn die QM aber eine fundamentale Theorie sein soll, die als Grenzfall auch die klassische Physik beinhalten soll, wie so oft behauptet, dann ist das sehr merkwürdig. Das Problem also: wie kann ich innerhalb der QM erklären, daß makroskopische Superpositionen nicht vorkommen?

Die Grundlagendiskussion der QM kreist seit Anfang an u.A. um diese Problem, das Problem des Messprozesses. Dabei wurden unterschiedliche Interpretationen (Lösungen) vorgeschlagen.