

8. Grundstruktur der Quantentheorie

8.1 Historische Skizze zur Quantenmechanik

Werner Heisenberg ist am 5. Dezember 1901 in Würzburg geboren.

Der Großvater führte in Osnabrück ein Schlossergeschäft.

Werners Vater, August Heisenberg, war Gymnasiallehrer für alte Sprachen in Würzburg; 1910 Ordinarius für Byzantinistik an der Universität München, Umzug der Familie.

Die Mutter Werner Heisenbergs war Tochter des Rektors des Maximiliansgymnasium in München. [35]

1920 begann Werner Heisenberg das Physikstudium bei Arnold Sommerfeld in München.

1922 erstes Zusammentreffen mit Niels Bohr in Göttingen. Studium in Göttingen bei Max Born.

1923 Dissertation in München.

1924 Habilitation in Göttingen.

1924-1925 als Rockefeller-Stipendiat am Bohr-Institut in Kopenhagen.

[35] David C. Cassidy: „Werner Heisenberg“. Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, Berlin, 2001; Amerikanische Originalausgabe: “Uncertainty. The Life and Science of Werner Heisenberg, Freeman, New York, 1992.

Juni 1925 Aufenthalt auf Helgoland. Beginn der **nicht-kommutativen Matrizenmechanik** [36].

Den klassischen Bahnbegriff vermeidend betrachtet Heisenberg die Gesamtheit der Schwingungsfrequenzen und der „Amplituden“ (Übergangswahrscheinlichkeiten), die die Intensität der Spektrallinien bestimmen [37], [38]. Er benutzt intuitiv die Matrizenmultiplikation, ohne zu diesem Zeitpunkt den mathematischen Begriff der Matrix zu kennen.

Eine mathematische Ausarbeitung von Heisenbergs Ansatz folgt in einer Arbeit von Max Born und Pascual Jordan [40] und in einer folgenden Arbeit von allen Dreien [41]. In [40] ist die Vertauschungsrelation (32) erstmals explizit formuliert.

[36] Werner Heisenberg: „Der Teil und das Ganze“. dtv, München, 1973, S. 74 ff.

[37] Werner Heisenberg: „Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen“. Zeitschrift für Physik, 33 (1925), S. 879.

[38] Brief von Werner Heisenberg an Wolfgang Pauli, 24. Juni 1925.
Auf der Rückfahrt von Helgoland besuchte Heisenberg Pauli in Hamburg für wenige Stunden, bedankte sich dafür mit Brief vom 21. Juni 1925. Hinweise dazu in [39], S. 89.

[39] Armin Hermann: „Die Jahrhundertwissenschaft. Werner Heisenberg und die Geschichte der Atomphysik“. rororo, Reinbek bei Hamburg, 1993.

[40] Max Born, Pascual Jordan: „Zur Quantenmechanik“. Zeitschrift für Physik 34 (1925), S. 858-888.

[41] Max Born, Werner Heisenberg, Pascual Jordan: „Zur Quantenmechanik II“. Zeitschrift für Physik 35 (1925), S. 557-615.

Eberhard Müller: Interdisziplinärer Zugang zu den Grundlagen der Quantentheorie: Grundstruktur der QT

Eine wertvolle ausführliche Diskussion der historischen Abläufe findet sich bei Max Jammer [30], S. 196 ff..

Jordan war Assistent bei Courant [42] während der Arbeit am später weltweit verbreiteten Buch von Courant und Hilbert zu den „Methoden der Mathematischen Physik“. Jordan war deshalb mit dem Umgang mit Matrizen bestens vertraut (Interview mit Max Jammer am 17. Juni 1963. Siehe [30], S. 207, dort Fußnote ³⁶.)

Born lernte Jordan bei einer Zugfahrt nach Hannover zufällig kennen ([30], S. 207 ff.). Born sprach mit einem Kollegen über die sonderbaren Schwierigkeiten bei den Rechnungen mit Matrizen. Jordan bekam das Gespräch mit und stellte sich Born am Bahnhof in Hannover vor. Er erklärt seine Bereitschaft, ihn bei der Behandlung der Matrizen zu unterstützen.

[42] Richard Courant (1888-1972) war Doktorand von Hilbert. Er wurde 1922 auf den Lehrstuhl von Felix Klein an der Universität Göttingen berufen und war dessen Nachfolger. Er emigrierte 1933 über Cambridge nach New York und baute das „Courant Institute for Mathematical Sciences“ auf, das 1964 nach ihm benannt wurde.

- Edith Stein (1891-1942) war seine Cousine. Sie promovierte mit Auszeichnung bei Husserl in Freiburg „Zum Problem der Einföhlung“ und versuchte vier Mal, eine Habilitation einzureichen, was ihr verwehrt wurde. Eine Arbeit „Psychische Kausalität“ hatte sie in Göttingen vorgelegt, eine Arbeit „Akt und Potenz“ in Breslau und Freiburg i. Breisgau. 1922 konvertierte sie zum Katholizismus, 1933 trat sie in den Karmel-Orden ein. Sie wurde zusammen mit ihrer Schwester Rosa am 9. August 1942 in Auschwitz-Birkenau vergast. 1999 wurde sie heiliggesprochen. [43]

[43] https://de.wikipedia.org/wiki/Edith_Stein.

[43] R. Courant, D. Hilbert: „Methoden der Mathematischen Physik“, Springer-Verlag, Berlin, Band 1, 1924, Band 2, 1937.

Bohr's Reaktion auf Heisenbergs Matrizenmechanik, wie Heisenberg sich erinnert ([30], S. 211): „Ich werde die Erregung nicht vergessen, als ich es schaffte, seine [Heisenbergs] Ideen zu den Quantenbedingungen auf die mysteriöse Gleichung $pq - qp = h/2\pi i$ zu reduzieren“.

Bohr hat den Gedanken der Komplementarität als eine Grundfigur der Quantenmechanik entwickelt und in Diskussionen und Abhandlungen sehr engagiert vertreten [44]. Mit Heisenberg hat er über einen langen Zeitraum intensiv zusammengearbeitet und unzählige lange Diskussionen geführt. Für Bohr ist die Vertauschungsrelation (32) das mathematische Kondensat der Komplementarität zwischen Wellenbild und Teilchenbild. Anders ausgedrückt:

Die Vertauschungsrelation (32) ist die mathematische Formulierung der Dialektik zwischen Wellenbild und Teilchenbild.

[44] Hans Primas: „Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism“, mit einem Vorwort von Paul Feyerabend. Lecture Notes in Chemistry 24, Springer-Verlag Berlin, 1981. In einem inhaltlich weit aufgespannten Spektrum bezieht sich das Buch auf wichtige Originalarbeiten. U. a. hat sich Primas mit Bohrs Begriff der Komplementarität intensiv befasst.

Mit Heisenbergs neuem Matrizenansatz schafft Wolfgang Pauli in kurzer Zeit die anspruchsvolle Herausforderung, das Wasserstoffatom zu berechnen [45]. Für einen Durchbruch der Matrizenmechanik war das ein entscheidender Beitrag. Dennoch wird der neue Ansatz von vielen Physikern zunächst reserviert aufgenommen.

Die weitere Entwicklung der Quantenmechanik

Ehe wir uns der schnellen Entwicklung der Quantenmechanik nach 1925 zuwenden, muss **Louis de Broglies** Wellenhypothese von 1923 nachgetragen werden [46]:

Die Welle-Teilchen-Dualität gilt nicht nur für Photonen, sie gilt auch für Elektronen und prinzipiell für alle massiven Teilchen.

[45] Wolfgang Pauli: „Über das Wasserstoffspektrum vom Standpunkt der neuen Quantenmechanik“. Zeitschrift für Physik 36 (1926), S. 336-363.

[46] Louis de Broglie: „Ondes et quanta“, Comptes Rendus Acad. Sci. (Paris) 177 (1923), S. 507-510; „Quanta de lumière, diffraction et interférences“, s.o. 177 (1923), S. 548-550; „Les quanta, la théorie cinétique des gaz et le principe de Fermat“, s.o. 177 (1923), S. 630-632.

29. November 1924: de Broglies Dissertation in Paris, Doktorvater Langevin.

In Zürich knüpft **Erwin Schrödinger** (1887-1961) an den Arbeiten de Broglies an. Er greift einen Zugang des irischen Physikers William Rowan Hamilton (1805-1865) auf, der mit der sogenannten Eikonal-Näherung die geometrische Optik aus der Wellenoptik ableitet. (Die Strecke eines Lichtstrahls vom Ausgangspunkt bis zum Endpunkt wird als „Eikonal“ bezeichnet.) Motiviert wird Schrödinger durch eine Bemerkung Einsteins in dessen zweitem Paper zum idealen Quantengas, wo Einstein weitergehende Folgerungen des Ansatzes von de Broglie erwartet ([30], S. 249).

Schrödinger war frisch an die Universität Zürich als Nachfolger von Peter Debye berufen worden, nachdem jener einen Lehrstuhl an der ETH angenommen hatte. Zum gemeinsamen Kolloquium der Universität und der ETH bittet Debye Schrödinger um einen Beitrag zu den de Broglie-Papers. Schrödinger war mit der Materie vertraut ([30], S. 257 ff.), nahm die Einladung an und publizierte mehrere Artikel [47]. Darin ist die „Schrödinger-Gleichung“ enthalten. Ihre Lösung gelang mit der Unterstützung von Hermann Weyl.

Schrödinger wollte die Lösung der Schrödinger-Gleichung als eine Materiewelle interpretieren, wie er durch die de Broglie-Wellen inspiriert war. Allerdings gelingt dies nur im Falle eines einzelnen Teilchens. **Bei mehreren Teilchen versagt die Materiewellen-Interpretation.** Damit war Schrödinger extrem unzufrieden.

[47] Erwin Schrödinger: „Quantisierung als Eigenwertproblem“. Annalen der Physik 79 (1926), I. Mitteilung 27. Januar eingegangen, S. 361-376; 2. Mitteilung 23. Februar eingegangen, S.489-527; 3. Mitteilung 10. Mai 1926 eingegangen, Annalen der Physik 80 (1926), S. 437-490; 4. Mitteilung 21. Juni 1926 eingegangen, Annalen der Physik 81 (1926), S 109-139.

Bald wurde die mathematische Gleichwertigkeit der Matrix-Mechanik Heisenbergs und der Wellen-Mechanik Schrödingers nachgewiesen.

Die zeitliche Priorität der Begründung der Quantenmechanik gehört Heisenberg.

Die Bedeutung der ψ -Funktion bleibt (zunächst) obskur, für beide Zugänge gleichermaßen.

Zur Berechnung vieler Problemstellungen der Atomphysik benutzen bis heute die meisten Physiker die Schrödinger-Gleichung. Der einzige Unterschied zur vertrauten Diffusionsgleichung ist die imaginäre Zeitvariable der **Schrödinger-Gleichung**. Sie sorgt dafür, dass ihre **zeitliche Dynamik deterministisch und reversibel** ist und eine Gruppe bildet. Die Zeitvariable durchläuft die gesamte reelle Achse. Im Gegensatz dazu beschreibt die Diffusionsgleichung, die zugleich auch für Wärmeleitung gilt, einen irreversiblen Prozess, der ein (Wärme-) Gleichgewicht anstrebt.

Ihre zeitliche Dynamik bildet eine Halbgruppe. Hier durchläuft die Zeitvariable nur die positive reelle Achse.

In der Schrödinger-Gleichung tritt die zeitliche Ableitung in 1. Ordnung auf, die räumlichen Ableitungen jedoch in 2. Ordnung. Dies zeigt, dass die Schrödingergleichung nicht Einstein-relativistisch ist. Denn in einer relativistischen dynamischen Gleichung müssen die Ableitungen nach der Zeitvariablen und nach den Ortsvariablen notwendig in gleicher Ordnung auftreten. Das trifft für die von Paul Dirac (1902-1984) 1927 gefundene Gleichung zur Beschreibung der Dynamik eines freien Elektrons zu. In der Dirac-Gleichung treten zeitliche und räumliche Ableitungen nur von 1. Ordnung auf. Dies trifft auch für die Maxwell-Gleichungen zu.

Die freie Dirac-Gleichung lässt sich, wie die freien Maxwell-Gleichungen, aus dem Kriterium zur elementaren Zerlegung der Darstellung der Symmetrie-Gruppe der speziellen Relativitätstheorie (Poincaré-Gruppe) herleiten.

Im September 1926 lädt Bohr Schrödinger nach Kopenhagen ein ([36], S. 91 ff.). Es kommt zu einem extrem intensiven Austausch. Bei der Frage der Interpretation der Quantenmechanik verbleiben zwischen Bohr und Heisenberg einerseits und Schrödinger andererseits unüberbrückbare Auffassungen.

1927 stellt Heisenberg die Unschärferelation auf.

Im gleichen Jahr schlägt Max Born (1882-1970) die statistische Interpretation der Quantenmechanik vor

Ebenfalls 1927 fand die fünfte Solvay-Konferenz statt. Im Mittelpunkt stand ein höchst intensiver Disput zwischen Einstein und Bohr. Mit immer neuen Gedankenexperimenten versucht Einstein, Schwächen der neuen Quantenmechanik aufzuzeigen. Bohr kann alle Einwände widerlegen. Die Quantenmechanik besteht ihre Feuertaufe. Keine Einigung gab es in der Frage der Interpretation der Quantenmechanik. Bohr, Heisenberg, Pauli verteidigen Borns statistische Interpretation. Einstein lehnt sie vehement ab. Er will die Kausalität nicht aufgeben: Gott würfelt nicht. Davon wird er nie abweichen.

1935 verfasst Einstein zusammen mit seinen Mitarbeitern Podolski und Rosen einen grundsätzlichen Artikel, in dem er seine kritischen Einwände an der Quantenmechanik festhält [48]. Diese Arbeit zeigt die neue Qualität von Quantenkorrelationen auf. Diese „**EPR-Korrelationen**“, die Einstein ausschloss, werden erstmals 1980 durch den französischen Experimentalphysiker Alain Aspect in seiner Doktorarbeit eindeutig nachgewiesen.

[48] Albert Einstein, Boris Podolski, Nathan Rosen: "Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?" Physical Review 47 (1935) S.777.

Nach dem „Goldenen Zeitalter der Physik“

Nach der Entdeckung des Neutrons 1932 wandte Heisenberg die Quantenmechanik auf den Atomkern an. In drei Abhandlungen „Über den Bau der Atomkerne“ legte er die Grundlage für die Kernphysik. Mit weiteren Pionierleistungen trug er zur Entwicklung der Quantenfeldtheorie bei (Paarerzeugung aus dem Vakuum, S-Matrix, ...). Im Zweiten Weltkrieg beschäftigte er sich neben der Kernreaktorentwicklung mit der kosmischen Höhenstrahlung. Ab den 1950er Jahren galt seinen Forschungen der Elementarteilchentheorie und der nichtlinearen Spinortheorie („Weltformel“).

1936, 1937 öffentliche Angriffe der SS gegen Heisenbergs Person. Er wurde als „weißer Jude“ bezeichnet und mit dem Tode bedroht. 1939 Einberufungsbescheid zur Wehrmacht. Heisenberg leitet das Uranprojekt. 1945 wurde im Pilot-Reaktor in Haigerloch Neutronenvermehrung erzielt. Der Reaktor blieb unterkritisch.

September 1941: Treffen mit Niels Bohr in Kopenhagen [49]. Das Gespräch mißlang, es konnte die Entwicklung der Atombombe nicht verhindern.

4. Juni 1942: Treffen mit dem für Rüstung zuständigen Reichsminister Speer. Neben Heisenberg nahmen u. a. der Industrielle und Erfinder Förster (Reutlingen) und der Luftwaffengeneral Milch teil [50]. Nach dem Vortrag und der Einschätzung Heisenbergs wurde von einem Atombombenprogramm Abstand genommen.

[49] Michael Frayn: „Kopenhagen. Stück in zwei Akten“. Wallstein-Verlag 2001.

[50] Persönlicher Hinweis von Monika Witte geb. Förster zum Protokoll des Treffens.

Auf Einladung von Paul Scherrer, Professor für Experimentalphysik an der ETH, hält Heisenberg im Dezember 1944 einen Vortrag in Zürich. Unter den Zuhörern sitzt der CIA-Agent Moe Berg. Er hat den Befehl, Heisenberg zu erschießen, falls es Anzeichen dafür geben sollte, dass Heisenberg an einer Atombombe arbeitet ([35], S. 598-600; [51], S. 120-122).

Mitte 1942 läuft in den USA das Manhattan-Projekt unter der Leitung von Robert Oppenheimer in vollem Umfang an [52]. Unter Einsatz von 2 Milliarden \$ und der Beteiligung von bis zu 150 000 Menschen führte es am

16. Juli 1945 zur ersten Test-Atombombenexplosion in Neu-Mexiko, am
06. August 1945 zum Abwurf der Uranbombe auf Hiroshima und am
09. August 1945 zum Abwurf der Plutoniumbombe auf Nagasaki.

Das Manhattan-Projekt wurde gegenüber dem US-Kongress geheimgehalten. Den Befehl zum Einsatz der Atombombe gab US-Präsident Harry S. Truman (während der Potsdam-Konferenz mit Stalin und Churchill, die vom 17. Juli - 2. August 1945 stattfand), gegen den Rat der Oberkommandierenden der US-Streitkräfte, McArthur für den Bereich Pazifik und Eisenhower für den Bereich Atlantik.

[51] Elisabeth Heisenberg: „Das politische Leben eines Unpolitischen“. Piper-Verlag München, 1980.

[52] Richard Rhodes: „The Making of the Atomic Bomb“. A Touchstone Book, published by Simon & Schuster, New York, 1988.

Nach dem Ende des Zweiten Weltkriegs wurden zehn deutsche Atomphysiker ein halbes Jahr lang in Farmhill in England interniert. Der englische Geheimdienst hörte ihre Gespräche ab. Die Abschriften sind inzwischen öffentlich.

12. April 1957: Göttinger Memorandum von 18 Atomphysikern gegen den Bau von Atomwaffen und der nuklearen Bewaffnung der Bundeswehr, u. a. mit Otto Hahn, Werner Heisenberg, C. F. v. Weizsäcker [53].

[53] „Aber dann ist der Urkern zerplatzt“. Interview mit Carl Friedrich von Weizsäcker, geführt durch den Publizisten Dietrich Hahn, Enkel von Otto Hahn, Frankfurter Allgemeine Zeitung vom 19.12.1998, Nummer 295, Ereignisse und Gestalten, S. III.

8.2 Die Grundstruktur der Quantentheorie

Die Information über ein physikalisches System (wir beziehen uns im Folgenden auf quantenphysikalische Systeme) wird durch Vektoren eines Hilbertraums repräsentiert. Dieser Hilbertraum ist der Zustandsraum der Quantentheorie. Für die Zustandsvektoren gilt das **Superpositionsprinzip**, die additive Überlagerung von Zustandsvektoren.

Messoperationen, beispielsweise Impulsmessung, Ortsmessung, Drehimpulsmessung werden durch **selbstadjungierte lineare Operatoren** repräsentiert. Sie werden als „**Observable**“ bezeichnet. Ihr Definitionsbereich liegt „dicht“ im Hilbertraum. (Jeder Hilbertraumvektor lässt sich als Limes einer konvergenten Folge von Elementen erhalten, die im Definitionsbereich des in Frage kommenden Operators liegen.)

Ein Operator A^* heißt adjungiert zum Operator A , wenn

$$\langle A^*\psi, \varphi \rangle = \langle \psi, A\varphi \rangle \quad \text{für alle Hilbertraumvektoren } \psi, \varphi \text{ aus dem Definitionsbereich von } A.$$

Ein Operator A heißt selbstadjungiert, falls

$$A^* = A$$

Adjunktion bedeutet bei einer Matrix das Transponieren („Spiegelung“ der Elemente der Matrix an der Hauptdiagonale) und Übergang zum komplex Konjugierten.

Viele Operatoren lassen sich bezüglich einer ausgewählten Basis des Hilbertraums als Matrizen darstellen. (Eine Basis im Hilbertraum ist eine Untermenge von Elementen, durch deren Kombination jedes beliebige Element des Hilbertraums approximiert werden kann.)

Physikalisch hat die Adjunktion mit Zeitumkehr zu tun. In den dynamischen Gleichungen der Quantenmechanik tritt die Zeitvariable t in Kombination mit der imaginären Einheit i auf. Aus $i \cdot t$ wird dann $-i \cdot t$.

Die Menge der beschränkten selbstadjungierten linearen Operatoren auf dem Hilbertraum bilden mit der Hintereinanderausführung der Anwendung auf einen Vektor eine **nichtkommutative Algebra, die Observablenalgebra**.

Der Erwartungswert (Messwert) eines Operators A in einem System, das sich im Zustand ψ befindet, wird durch das folgende Skalarprodukt definiert:

$$(35) \quad \langle \psi, A \psi \rangle$$

Selbstadjungierte Operatoren haben reelles Spektrum. Ihr Erwartungswert ist entsprechend eine reelle Zahl.

Die beschränkten linearen Operatoren $L(\mathcal{H})$ auf einem Hilbertraum \mathcal{H} bilden mit der Adjunktion eine involutive Algebra (*-Algebra).

Eine Verallgemeinerung der Matrixalgebra ist das Konzept einer **von Neumann-Algebra**, ein für die Quantentheorie kräftiges mathematisches Werkzeug [54].

Eine von Neumann Algebra M ist eine *-Unteralgebra von $L(\mathcal{H})$, falls

$$(36) \quad M = M''$$

Die Kommutante A' einer Untermenge A von $L(\mathcal{H})$ ist die Menge der Operatoren (und ihrer Adjungierten) aus $L(\mathcal{H})$, die mit allen Operatoren aus A vertauschen. Die Grundlage der Definition einer von Neumann-Algebra ist die erstaunliche Beobachtung $A' = A'''$. Mit $M = A'$ gilt dann (36). Der tragende Rahmen dieses mathematischen Zugangs ist das Spiel von Nichtvertauschbarkeit und Vertauschbarkeit.

[54] Artikel Nr. 430 zum Stichwort "Von Neumann Algebras" in "Encyclopedic Dictionary of Mathematics" by the Mathematical Society of Japan, The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1977. Eine knappe und präzise Darstellung.

Speziellliteratur: Masamichi Takesaki: "Theory of Operator Algebras", Springer-Verlag, New York, Volume I, 1979; Volume II, 2003.
Jacques Dixmier: "Von Neumann Algebras", North-Holland, Amsterdam, 1969.

Die Struktur einer von Neumann-Algebra lässt sich abstrakt, ohne Bezug zu einem Hilbertraum definieren. Diese abstrakte Algebra heißt W^* -Algebra. Umgekehrt lässt sich mittels einer Standardkonstruktion aus der abstrakten W^* -Algebra eine von Neumann-Algebra über einem Hilbertraum gewinnen.

Wir betrachten eine abstrakte W^* -Algebra und wählen uns eine maximal abelsche (bei der Multiplikation vertauschen alle Operatoren) W^* -Unteralgebra. Zu dieser Unteralgebra lässt sich kanonisch ein Raum konstruieren. Eine abelsche Operatoralgebra beschreibt klassische Physik. Passenderweise hält sie einen Raumbegriff bereit.

Bezogen auf die raum-zeitliche Ebene der klassischen Physik findet die quantentheoretische Beschreibung auf einer „Meta-Ebene“ statt. Auf dieser Meta-Ebene ist die **Dynamik der ψ -Funktion**, wie sie beispielsweise durch die Schrödinger-Gleichung bestimmt wird, **deterministisch!**

Für einen geeigneten Vektor ψ des Hilbertraums \mathcal{H} einer von Neumann-Algebra \mathcal{M} lässt sich eine modulare Konjugation S_ψ definieren, welche die Nichtkommutativität der Algebra „misst“.

$$(37) \quad S_\psi : x\psi \rightarrow x^*\psi \quad \text{für alle } x \in \mathcal{M}$$

$$S_\psi (x \cdot y) \psi = (x \cdot y)^*\psi = (y^* \cdot x^*) \psi$$

Für selbstadjungierte $x, y \in \mathcal{M}$, $x^* = x$, $y^* = y$, vertauscht S_ψ die Reihenfolge der Faktoren im Operatorenprodukt:

$$S_\psi (x \cdot y) \psi = (y \cdot x) \psi$$

Die „polare“ Zerlegung der modularen Konjugation S_ψ ergibt einen modularen, positiven Operator Δ_ψ und eine antiunitäre Involution J_ψ (ähnlich wie bei der Zerlegung einer komplexen Zahl in Realteil r und imaginären Winkelteil, $z = e^{i\varphi} \cdot r$):

$$(38) \quad S_\psi = J_\psi \Delta_\psi^{1/2}.$$

Es gilt: $S_\psi^* \cdot S_\psi = \Delta_\psi$.

Die hier vorgestellte Mathematik wurde ab der 1960er Jahre durch die japanischen Mathematiker M. Tomita und M. Takesaki initiiert und international weiterentwickelt. Diese Tomita-Takesaki-Theorie wurde beispielsweise für das Modell eines idealen Quantengases im thermischen Gleichgewicht eingesetzt. Der Energieoperator H des Systems (Hamiltonoperator) beschreibt das zeitliche Verhalten des Gases. Zugleich erzeugt der Logarithmus des modularen Operators eine Dynamik des Systems. Im thermischen Gleichgewicht ψ besteht zwischen beiden Operatoren die folgende Beziehung:

$$(39) \quad H = -kT \log \Delta_\psi$$

Damit haben wir einen Zusammenhang zwischen der Wärmebewegung im Quantengas und der Nichtkommutativität des Systems! Die Temperatur ist die Proportionalitätskonstante zwischen Quantenfluktuationen und Wärmebewegung.

Zur gleichzeitigen Verknüpfung der Nichtkommutativität mit einem Übergang von einem Zustand φ zu einem andern Zustand ψ benutzen wir eine relative modulare Konjugation $S_{\varphi,\psi}$.

$$(39) \quad S_{\varphi,\psi} : x\psi \rightarrow x^*\varphi \quad \text{für alle } x \in \mathcal{M}$$

Daraus lässt sich der relative modulare Operator bilden:

$$(40) \quad \Delta_{\varphi,\psi} = S_{\varphi,\psi}^* \cdot S_{\varphi,\psi}$$

Damit haben wir ein mathematisches Werkzeug, einen Operator der relativen Entropie zu definieren [55]:

$$(41) \quad R(\varphi, \psi) = -\log \Delta_{\varphi,\psi} + \log \Delta_\psi$$

Das ermöglicht eine **abstrakte Formulierung des 2. Hauptsatzes**:

Ein Zustand φ kann sich in einen Zustand ψ genau dann spontan (d. h. ohne Netto-Zufuhr von Energie) umwandeln, wenn der Operator der relativen Entropie $R(\varphi, \psi)$ positiv ist.

Der Erwartungswert $\langle \psi, R(\varphi, \psi) \psi \rangle$ hat die gewohnten Eigenschaften einer relativen Entropie.

[55] Eberhard E. Müller: "Note on relative entropy and thermodynamical limit". Helvetica Physica Acta 58 (1985), S. 622 ff.
Diesem Paper können mathematisch-technische Einzelheiten zur Definition (41) entnommen werden.

8.3 Heisenbergsche Unschärferelation

Aus der Vertauschungsrelation (32) lässt sich die Heisenbergsche Unschärferelation berechnen. Wir betrachten zwei Observable \mathbf{A} , \mathbf{B} , also zwei lineare selbstadjungierte Operatoren auf einem Hilbertraum. Mit einem Hilbertraumvektor ψ , der im Definitionsraum der beiden Operatoren, wie auch im Definitionsraum der Produkte und der Quadrate der beiden Operatoren liegt, bilden wir mit dem Skalarprodukt Erwartungswerte.

Das Quadrat der Unschärfe einer Observablen \mathbf{A} ist die Varianz:

$$\sigma_{\mathbf{A}}^2 = \langle \psi, (\mathbf{A} - \langle \psi, \mathbf{A}\psi \rangle \mathbf{Id})^2 \psi \rangle .$$

$$\sigma_{\mathbf{A}}^2 \sigma_{\mathbf{B}}^2$$

$$= \langle (\mathbf{A} - \langle \psi, \mathbf{A}\psi \rangle \mathbf{Id}) \psi, (\mathbf{A} - \langle \psi, \mathbf{A}\psi \rangle \mathbf{Id}) \psi \rangle \cdot \langle (\mathbf{B} - \langle \psi, \mathbf{B}\psi \rangle \mathbf{Id}) \psi, (\mathbf{B} - \langle \psi, \mathbf{B}\psi \rangle \mathbf{Id}) \psi \rangle$$

$$\geq | \langle (\mathbf{A} - \langle \psi, \mathbf{A}\psi \rangle \mathbf{Id}) \psi, (\mathbf{B} - \langle \psi, \mathbf{B}\psi \rangle \mathbf{Id}) \psi \rangle |^2 \quad \text{Cauchy-Schwarzsche Ungleichung}$$

$$\geq \left[\frac{1}{2i} \left(\langle (\mathbf{A} - \langle \psi, \mathbf{A}\psi \rangle \mathbf{Id}) \psi, (\mathbf{B} - \langle \psi, \mathbf{B}\psi \rangle \mathbf{Id}) \psi \rangle - \langle (\mathbf{B} - \langle \psi, \mathbf{B}\psi \rangle \mathbf{Id}) \psi, (\mathbf{A} - \langle \psi, \mathbf{A}\psi \rangle \mathbf{Id}) \psi \rangle \right) \right]^2$$

Die letzte Ungleichung besagt, dass das Quadrat des Imaginäranteils einer komplexen Zahl $z = x + iy$ größer ist als das Betragsquadrat von z : $|z|^2 = z \bar{z} = (x + iy)(x - iy) = x^2 + y^2 \geq y^2$; $y = \frac{1}{2i}(z - \bar{z})$.
(Beachte die Komplexkonjugation bei der Vertauschung der Faktoren im Skalarprodukt.)

rechte Seite der letzten Ungleichung

$$\begin{aligned}
 &= \left[\frac{1}{2i} \left(\langle \mathbf{A}\psi, \mathbf{B}\psi \rangle - \langle \psi, \mathbf{B}\psi \rangle \langle \psi, \mathbf{A}\psi \rangle - \langle \psi, \mathbf{A}\psi \rangle \langle \psi, \mathbf{B}\psi \rangle + \langle \psi, \mathbf{A}\psi \rangle \langle \psi, \mathbf{B}\psi \rangle \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \langle \mathbf{B}\psi, \mathbf{A}\psi \rangle + \langle \psi, \mathbf{A}\psi \rangle \langle \psi, \mathbf{B}\psi \rangle + \langle \psi, \mathbf{B}\psi \rangle \langle \psi, \mathbf{A}\psi \rangle - \langle \psi, \mathbf{B}\psi \rangle \langle \psi, \mathbf{A}\psi \rangle \right) \right]^2 \\
 &= \left[\frac{1}{2i} \left(\langle \mathbf{A}\psi, \mathbf{B}\psi \rangle - \langle \mathbf{B}\psi, \mathbf{A}\psi \rangle \right) \right]^2 \\
 &= \left[\frac{1}{2i} \langle \psi, (\mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A})\psi \rangle \right]^2
 \end{aligned}$$

Damit haben wir eine Beziehung für die Unschärfen zweier Observablen \mathbf{A}, \mathbf{B} :

$$\sigma_A \cdot \sigma_B \geq \frac{1}{2i} \langle \psi, (\mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A})\psi \rangle$$

Aus der Heisenbergschen Vertauschungsrelation (32) folgt die Heisenbergsche Unschärferelation:

$$(36) \quad \Delta p \Delta q \geq \frac{1}{2i} | \langle \psi, (\mathbf{P} \mathbf{Q} - \mathbf{Q} \mathbf{P}) \psi \rangle | = \frac{h}{4\pi}$$

In der Quantenmechanik können Ort und Impuls nicht gleichzeitig scharf sein. Ist der Ort scharf, dann ist der Impuls völlig unbestimmt. Ist der Impuls scharf, ist der Ort komplett unbestimmt. In der Quantenmechanik geht der Bahnbegriff der Newtonschen Mechanik verloren.

Die Heisenbergsche Unschärferelation folgt aus der Grundstruktur der Quantenmechanik. Sie ist keine Folge eines Messprozesses. Auch wenn Heisenberg ursprünglich durch ein grundsätzliches Gedankenexperiment zur Ortsmessung eines Elementarteilchens durch ein γ -Strahlen-Mikroskop die Unschärferelation gefunden hat. Er wollte die Paradoxie verstehen, dass die Spur eines Elektrons in der Nebelkammer sichtbar ist, obwohl der Bahnbegriff abhanden gekommen ist.

„Heisenberg-Mikroskop“:
Unschärfe beim Messvorgang

Beugung am Spalt: Interferieren
Lichtstrahlen mit einem Gangunterschied
einer halben Wellenlänge ($\lambda/2$), kommt es
zur Auslöschung:

$$\sin \varphi = \lambda/d$$

$$p = h/\lambda \quad (\text{Licht oder Materie als Welle})$$

$$\Delta p/p = \lambda/d$$

$$\Delta p \cdot d = p \cdot \lambda = (h/\lambda) \cdot \lambda = h$$

Nehmen wir d als Ortsunschärfe Δx ,
dann folgt $\Delta p \Delta x \geq h$.

