Axiomatischer Zugang zur (Quanten-)Physik

Kurztext im Rahmen von „Quanten auf Reisen“

Physikdidaktik, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

26. Juli 2025

Weitere Kurztexte hier: https://physikdidaktik.uni-freiburg.de/kurztexte/

Gefördert durch:

Bundesministerium für Forschung, Technologie und Raumfahrt

universität freiburg

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Axiomatischer Zugang zur (Quanten-)Physik

Autor: Thomas Filk, Version vom: 15.07.2025

In der Mathematik ist ein Axiomensystem ein minimaler Satz von Aussagen,[1] die als wahr definiert werden und aus denen durch festgelegte Schlussfolgerungsregeln weitere Aussagen als wahr oder falsch bewiesen werden können. Die wesentlichen Bedingungen an ein Axiomensystem sind

(a) die Widerspruchsfreiheit: Es soll keine Aussage geben, von der man beweisen kann, dass sie sowohl wahr als auch falsch ist, und

(b) die Unabhängigkeit der Axiome, d.h., es soll nicht möglich sein, für eines oder mehrere der Axiome unter Verwendung der anderen Axiome beweisen zu können, dass sie richtig sind.

Eine dritte Eigenschaft, die Vollständigkeit, kann nach den Unvollständigkeitssätzen von Gödel nicht immer garantiert werden. „Vollständig“ bedeutet dabei, dass von jeder formulierbaren Aussage bewiesen werden kann, ob sie richtig oder falsch ist. Darüber hinaus spielt gelegentlich in der Praxis eine Rolle, ob ein Axiomensystem reichhaltig bzw. interessant ist, d.h., ob sich viele nicht selbstverständliche Aussagen daraus ableiten lassen und ob diese Aussagen zur Definition von interessanten Strukturen Anlass geben.

Es gibt viele Axiomensysteme in der Physik: die drei Newton'schen Postulate der Newton'schen Mechanik, die Maxwell-Gleichungen zusammen mit der Lorentz-Kraft in der Elektrodynamik, die Axiome der speziellen Relativitätstheorie (insbesondere die Konstanz der Lichtgeschwindigkeit in allen Inertialsystemen unabhängig vom Bewegungszustand der Quelle) und der allgemeinen Relativitätstheorie, die Hauptsätze der Thermodynamik etc. Oft spricht man in der Physik eher von Postulaten als von Axiomen, obwohl die Bedeutungen dieser beiden Terme kaum zu trennen sind.

[1] Ich setze hier voraus, dass man entscheiden kann, ob eine Folge von Symbolen eine wohl definierte Aussage bildet oder nicht. In der Mathematik wird dies im Rahmen der Symbollogik geklärt.

Allgemein sind Postulate Aussagen, die man nicht mehr auf einfachere Aussagen zurückführen kann und die man als gegeben und richtig annimmt. In der Physik sollten diese Aussagen und die aus ihnen ableitbaren Schlussfolgerungen nicht im Widerspruch zum Experiment stehen. Oftmals handelt es sich sogar um Erfahrungstatsachen (z.B. die Konstanz der Lichtgeschwindigkeit in der SRT oder die Existenz einer Zustandsgröße ‚Temperatur' in der Thermodynamik), die nicht unbedingt in jeder denkbaren Welt gelten müssten. Außerdem sollen diese Aussagen untereinander nicht widersprüchlich sein.

In dieser Form können Aussagen im Laufe der Zeit durchaus ihren Charakter als Postulate verlieren: Aus heutiger Sicht kann man sagen, dass zu Keplers Zeit die Kepler'schen Gesetze den Charakter von Postulaten hatten – aus der Empirie gewonnenen Regelmäßigkeiten, die sich nicht weiter begründen lassen. Nachdem Newton seine Gesetze formuliert hatte (die nun den Charakter von Postulaten hatten), konnte man die Kepler'schen Gesetze aus den Newton'schen Gesetzen sowie dem Newton'schen Gravitationsgesetz ableiten. Das Newton'sche Gravitationsgesetz lässt sich wiederum aus den Grundannahmen und Grundgleichungen der allgemeinen Relativitätstheorie ableiten.

Ganz allgemein wird man in der Physik zwei Arten von Postulaten unterscheiden: Zum Einen sind dies die Anforderungen, die man überhaupt an eine physikalische Theorie bzw. ein physikalisches Modell stellen muss, damit man diese Theorie als widerspruchsfreie Theorie bezeichnen und in dieser Form akzeptieren kann. In Anlehnung an die Philosophie (und die Kategorientheorie der Mathematik) könnte man hier auch von Kategorien sprechen, die erfüllt sein müssen, damit wir überhaupt von Physik sprechen können. Zum anderen sind das Beobachtungstatsachen, die man nicht mehr weiter erklären kann und daher einer Theorie als Postulate zugrunde legt. Zur ersten Gruppe kann man beispielsweise das Postulat zählen, was überhaupt (reine) physikalische Zustände sind. Zur zweiten Klasse kann man das Postulat der Speziellen Relativitätstheorie zählen, dass sich Licht für jeden inertialen Beobachter unabhängig vom Bewegungszustand der Quelle mit Lichtgeschwindigkeit ausbreitet.

In diesem Kapitel geht es hauptsächlich um die erste Klasse von Postulaten, die allen Theorien in der Physik gemein sind bzw. die jede Theorie spezifizieren muss, damit man sie als Theorie bezeichnen kann.

1.1 Allgemeiner Formalismus

In jeder physikalischen Theorie gibt es zwei Konzepte, auf denen die Theorie beruht: (1) Das Konzept der Observablen und (2) das Konzept der Zustände. Ein axiomatischer Formalismus hat für eine Theorie zu klären, die diese beiden Konzepte mathematisch repräsentiert werden und in welcher Beziehung sie zu den physikalischen Realisierungen stehen.

1.1.1 Physikalische Realisierungen von Observablen und Zuständen

In diesem Abschnitt werden die physikalischen – man könnte auch sagen „experimentellen", „pragmatischen" oder „operationalen" – Realisierungen einer Observablen und eines Zustands betrachtet. Diese sind unabhängig von einer Theorie und gelten gleichermaßen in der Newton'schen Mechanik, der Quantenmechanik oder auch der Thermodynamik. Die Unterschiede bestehen lediglich in der mathematischen Repräsentation dieser Konzepte, die in den nächsten Abschnitten betrachtet werden.

Observable sind physikalische Größen, die an einem physikalischen System gemessen werden können. Ihre Realisierung besteht in der Angabe eines Messprotokolls und einer Vorschrift, wie man am Ende einer solchen Messung zu einer Zahl – dem Ergebnis der Messung – gelangt. Es ist eine Erfahrungstatsache, welche Größen das sind, und man kann nie sicher sein, dass man alle an einem System beobachtbaren Größen auch kennt. John von Neumann definiert sogar ein physikalisches System durch die Menge der Observablen, die an diesem System beobachtet werden können [1].

Die physikalische Realisierung eines Zustands erfolgt durch ein im Prinzip beliebig großes Ensemble gleichartig präparierter Systeme. Gewöhnlich führen wir ein Experiment nicht nur einmal durch sondern nach Möglichkeit unter denselben Ausgangsbedingungen genügend oft, sodass wir statistische Auswerteverfahren verwenden können. Die mathematische Vorstellung von einem Zustand als einem Erwartungswertfunktional auf der Menge der Observablen, d.h. einer Abbildung $\mathcal{R} \longrightarrow \mathrm{Erw}(\mathcal{R})$, wird dadurch realisiert, dass man an einem ausreichen großen und repräsentativen Teilensemble der physikalischen Realisierung eines Zustands die Messung einer Observablen $\mathcal{R}$ vornimmt und von den erzielten Ergebnissen den Mittelwert bildet.

Auf diese Weise können wir auch an demselben Zustand verschiedene Observablen messen, die sich an demselben System nicht gleichzeitig bestimmen lassen (beispielsweise Ort und Impuls bei quantenmechanischen Systemen oder allgemeiner zwei nicht kompatible Observable $\mathcal{R}$ und $\mathcal{S}$). Man unterteilt dazu das Ensemble gleichartig präparierter Systeme in ebenfalls große Teilensembles und misst an einem Teilensemble die Observable $\mathcal{R}$ und an einem anderen Teilensemble die Observable $\mathcal{S}$. Auf diese Weise erhält man für einen Zustand – das Ensemble gleichartig präparierter Systeme – die Erwartungswerte von nicht kompatiblen Observablen in diesem Zustand.

Eine ähnliche Aussage gilt auch für Observable, die sich *per definitionem* nicht durch eine Einzelmessung bestimmen lassen, beispielsweise die Standardabweichung $\Delta\mathcal{R}$ einer Observablen $\mathcal{R}$ oder ihren Mittelwert.

1.1.2 Der axiomatische Rahmen einer Theorie

Der axiomatische Rahmen einer Theorie hat zu klären, durch welche mathematische Strukturen bzw. Objekte die physikalischen Observablen und Zustände repräsentiert werden, und wie diese Strukturen mit beobachtbaren Größen – das sind im Wesentlichen die Erwartungswerte von Observalben – in Beziehung stehen. Das bedeutet, ein axiomatischer Rahmen hat die folgenden Fragen zu klären:

1. Durch welche mathematische Struktur werden Observable mathematisch dargestellt?

2. Durch welche mathematische Struktur werden Zustände mathematisch dargestellt?

Neben der mathematischen Spezifizierung dieser beiden Konzepte muss ein allgemeiner Formalismus die folgenden Fragen beantworten können:

3. Wie gelangt man aus der Kenntnis des Zustands zu Vorhersagen für die Resultate von Messungen einer Observablen an Systemen, die durch diesen Zustand beschrieben werden?

4. Woher weiß man, durch welchen Zustand ein System zu beschreiben ist, wenn bestimmte Beobachtungsergebnisse vorliegen?

5. Schließlich muss eine Theorie noch angeben, wie die zeitliche Entwicklung des Systems beschrieben werden kann.

Es gibt noch einige weitere Forderungen, die beispielsweise in der Standardformulierung der Quantentheorie (hierunter verstehe ich eine Minimalform der Kopenhagener Deutung, die im Wesentlichen die obigen Fragen beantwortet) teilweise schon nicht mehr erfüllt sind. Beispielsweise kann man von einer fundamentalen Theorie fordern, dass sie für unsere Realität eine Ontologie definiert, die auf das Universum als Ganzes anwendbar ist. Dies ist für die Quantentheorie nicht der Fall. Die folgenden Abschnitte kommentieren diese Konzepte.

1.2 Observable und Zustände

Die beiden zentralen Begriffe – Observable und Zustände – werden ausführlich in einem anderen Kurztext behandelt (siehe Observable und Zustände). An dieser Stelle werden nur die wichtigsten Eigenschaften im Zusammenhang mit diesen beiden Konzepten behandelt.

1.2.1 Observable

Ein allgemeiner physikalischer Formalismus muss für eine Theorie zunächst klären, welche Observablen es gibt bzw. bekannt sind. Diese Observablen bilden jedoch nicht einfach nur eine strukturlose Menge, sondern es gibt auch Beziehungen zwischen den Observablen, die bekannt sein sollten und sich in einer mathematischen Darstellung widerspiegeln müssen. In diesem Kapitel bezeichne ich die physikalische Observable als Messvorschrift in Anlehnung an von Neumann [1] mit kaligraphischen Buchstaben, z.B. $\mathcal{R}$, die zugehörige mathematische Darstellung dieser Observablen kennzeichne ich durch R.

Kennt man eine Observable $\mathcal{R}$, also die Vorschrift, wie man diese Observable an einem System messen kann, so kennt man auch die Observable $f(\mathcal{R})$ für eine Funktion f: Man misst die Observable $\mathcal{R}$ an einem physikalischen System und bildet von dem erhaltenen Messwert r die Funktion $f(r)$. Insbesondere ist die Observable $\alpha\mathcal{R}$ (für eine beliebige reelle Zahl α) durch die Messvorschrift von $\mathcal{R}$ gegeben, wobei jeder gemessene (an einer Zeigerstellung abgelesene) Messwert mit α multipliziert wird. Lassen sich zwei Observable $\mathcal{R}$ und $\mathcal{S}$ gleichzeitig an einem System messen (das bedeutet, es gibt ein Protokoll, bei dem man gleichzeitig einen Messwert sowohl für $\mathcal{R}$ als auch für $\mathcal{S}$ erhält - diese Werte seien r und s), dann ist die Observable $f(\mathcal{R},\mathcal{S})$ definiert als die Messvorschrift, bei der von den Messwerten die Funktion $f(r,s)$ gebildet wird.

Bei Observablen $\mathcal{R}$ und $\mathcal{S}$, die sich nicht gleichzeitig an einem System messen lassen – solche Observablen bezeichnet man als nicht kompatibel –, sind allgemeine Funktionen $f(\mathcal{R},\mathcal{S})$ zunächst nicht definiert. Insbesondere sind auch Ausdrücke der Art $\mathcal{R}+\mathcal{S}$ oder $\mathcal{R}\cdot\mathcal{S}$ als Messvorschriften nicht definiert.

Die mathematische Darstellung (Repräsentation) einer Observablen hängt von der Theorie ab, die wir verwenden. In der klassischen Mechanik handelt es sich bei Observablen um Funktionen von Ort und Impuls (bzw. Geschwindigkeit), d.h. Funktionen auf dem Phasenraum. In der Quantenmechanik werden Observable durch sogenannte selbst-adjungierte bzw. hermitesche Operatoren[2] auf einem Hilbert-Raum – einem Vektorraum mit einem Skalarprodukt – dargestellt.

Die mathematische Darstellung einer Observablen repräsentiert nicht den Messprozess, also den dynamischen Vorgang der Messung, sondern eher die Informationen, die man durch solche Messungen erlangen kann: die Menge der möglichen Messwerte sowie die Zustände, die mit diesen Messwerten verbunden sind.

1.2.2 Zustände

Auch bei den Zuständen sollte man zwischen der physikalischen Realisierung und der mathematischen Darstellung unterscheiden. Sehr oft definiert man einen Zustand als ein „Erwartungswertfunktional auf der Menge der Observablen“. Diese zunächst mathematische Definition kann man durchaus wörtlich interpretieren: Wenn wir ein System durch einen Zustand beschreiben, erlaubt es dieser Zustand, jeder Observablen eine Zahl – ihren Erwartungswert in diesem Zustand – zuzuordnen. Ein Zustand beschreibt also unsere Erwartungen in Bezug auf die Ergebnisse, die bei einer Messung an einem System auftreten. Schrödinger bezeichnet einen Zustand als einen „Katalog von Erwartungen“ [2].

Dieser Katalog von Erwartungen beruht auf unserem Wissen über die Vergangenheit eines Systems bzw. eines Ensembles von Systemen. Im Wesentlichen bezieht sich dieses Wissen auf die Art, wie diese Systeme präpariert wurden. Unsere Erwartungen in Bezug auf mögliche Messergebnisse können nur auf diesem Wissen beruhen, und wenn uns bewusst ist, dass unser Wissen unvollständig ist, verwenden wir sogenannte gemischte Zustände (in der klassischen Mechanik sind das Wahrscheinlichkeitsverteilungen über einem Zustandsraum, beispielsweise dem Phasenraum; in der Quantentheorie sind das sogenannte Dichtematrizen). Unser Wissen über die Vergangenheit eines Systems muss nicht beliebig weit zurückreichen: Es reicht das Wissen über solche Aspekte, die für die Vorhersagen zukünftiger Messungen von Bedeutung sind. Das sind meist die letzten Präparationen, die an einem System vorgenommen wurden.[3] Es gibt aber auch physikalische Systeme mit einem „Gedächtnis“, beispielsweise Spinglassysteme oder neuronale Netzwerke.

Gelegentlich wollen wir auch einem Einzelsystem einen Zustand zuschreiben. An

[2] Für unbeschränkte Operatoren auf einem Hilbert-Raum besteht ein Unterschied zwischen selbst-adjungiert und hermitesch, der hier jedoch nicht berücksichtigt wird.

[3] Die Physik ist hier in einer glücklichen Lage. Möchte man in der Psychologie den mentalen Zustand einer Person beschreiben, können beliebig weit zurückliegende Ereignisse oder Erfahrungen für die Vorhersage des zukünftigen Verhaltens wesentlich sein.

diesem Punkt unterscheiden sich verschiedene Interpretationen, insbesondere die sogenannten Ensemble-Interpretationen von der Kopenhagener Deutung. Während Ensemble-Interpretationen den Begriff der Wahrscheinlichkeit vermeiden und nur von relativen Häufigkeiten sprechen – die Born'sche Regel besagt dann, dass das Absolutquadrat eines Skalarprodukts gleich der relativen Häufigkeit ist, mit der bei einer Messung einer Observablen an einem Ensemble gleichartig präparierter Zustände ein bestimmtes Resultat erzielt wird – wendet die Kopenhagener Interpretation den Zustandsbegriff auch auf Einzelsysteme an und spricht statt von relativer Häufigkeit von Wahrscheinlichkeit. Es gibt aber auch Situationen, bei denen der Unterschied relevant wird: Beispielsweise gilt das sogenannte No-Cloning Theorem, wonach ein unbekannter Zustand nicht dupliziert werden kann, nicht für Ensemblezustände. An einem Ensemble kann der Zustand bestimmt und dann beliebig oft kopiert werden. Diese Aussage gilt jedoch nicht für den Zustand, den wir einem einzelnen System zuschreiben.

Man bezeichnet einen Zustand – realisiert als Ensemble – als rein, wenn es keine Unterteilung dieses Ensembles in (für statistische Auswertungen ebenfalls genügend große) Subensembles gibt, die für eines dieser Subensembles andere Erwartungswerte liefert als das gesamte Ensemble. Diese Vorstellung von reinen Zuständen entspricht auch unserer üblichen Vorstellung von reinen Zuständen als maximales bzw. nicht mehr erweiterbares Wissen über ein System. Entspricht ein Ensemble von Systemen einem Gemisch, so lässt es sich in Subensembles aufteilen, die weniger gemischten Zuständen (oder sogar reinen Zuständen) entsprechen. Reine Zustände lassen sich nicht mehr in noch reinere Zustände aufteilen.

Mathematisch wird ein Zustand repräsentiert durch die Angabe einer Abbildung, die jeder Observablen eine Zahl – ihren Erwartungswert in diesem Zustand – zuordnet. Ein Zustand ist somit eine mathematische Kodierung unseres Wissens über die Art, wie ein System präpariert wurde, sodass wir dieses Wissen für die Vorhersage zukünftiger Messungen – die Vorhersage eines Erwartungswerts für beliebige Observable – an diesem System nutzen können.

Elementare Eigenschaften dieser Abbildung sind:

1. Die Identitätsobservable, die immer nur den Messwert 1 als Ergebnis liefert, soll den Erwartungswert 1 haben,

2. eine positive Observable, die immer nur positive Ergebnisse als Messwerte liefert, soll auch einen positiven Erwartungswert haben, und

3. das λ-fache einer Observablen $\mathcal{R}$, die immer das λ-fache eines Messwerts von einer Messung von $\mathcal{R}$ liefert, soll auch das λ-fache des Erwartungswerts haben.

Weitere Eigenschaften hängen davon ab, welche Strukturen auf der Menge der Observablen definiert sind.

Oft unterscheidet man (insbesondere in der Quantentheorie) den Zustand von dem Erwartungswertfunktional, das dieser Zustand definiert. Der Zustand wird in der Quantentheorie z.B. durch einen normierten Vektor $|\psi\rangle$ in einem Hilbert-Raum dargestellt, wohingegen die Abbildung $\mathcal{R} \to \mathrm{Erw}(\mathcal{R})$ durch $\mathrm{Erw}(\mathcal{R}) = \langle\psi|R|\psi\rangle$ gegeben ist.

1.2.3 Vorhersage und Präparation

Der Begriff des Zustands als eine Abbildung, die jeder Observablen einen Erwartungswert zuordnet, beinhaltet schon die Vorschrift, wie man aus einer Theorie zu experimentell überprüfbaren Vorhersagen kommt. Wenn auf Seiten der Theorie der Zustand eines Systems bekannt ist, kann man auch angeben, was man bei der Messung einer bestimmten Observablen für einen Erwartungswert erhält. Der Erwartungswert ist dann der Mittelwert der Ergebnisse, die man bei der Messung einer Observablen an sehr vielen Systemen erhält. Hierbei ist wichtig, dass der Zustand physikalisch durch ein Ensemble von Systemen repräsentiert wird und nicht nur durch ein Einzelsystem.

Diese Bedingung ist andererseits aber auch problematisch: Der Kosmos als Ganzes lässt sich nicht als Ensemble realisieren, das Gleiche gilt auch für komplexere Systeme wie beispielsweise einen menschlichen Organismus oder ein menschliches Gehirn. Zumindest reine Zustände sind bei solchen Systemen nicht mehr realisierbar (das gilt schon für einfache thermodynamische Systeme).

Etwas problematischer ist die Frage, woher wir wissen, durch welchen Zustand ein physikalisches System zu repräsentieren ist. Wir haben oben gesagt, dass wir die Vergangenheit eines Systems - die Art wie es präpariert wurde - kennen müssen. Wir benötigen somit eine Vorschrift, wie wir aus der Kenntnis der Präparation eines Systems den Zustand erhalten, durch den wir das System beschreiben. Diese Vorschrift ist oftmals ein eigenes Postulat (in der Quantentheorie beispielsweise das sogenannte Kollaps- oder Projektionspostulat).

1.2.4 Die zeitliche Entwicklung eines Systems

Die bisherigen Axiome sind allgemeiner Natur und enthalten noch keinerlei Aussagen darüber, wie sich ein physikalisches System im Verlauf der Zeit verändert. Zunächst einmal muss überhaupt geklärt werden, was „zeitliche Entwicklung“ bedeutet. In fast allen physikalischen Theorien (eine Ausnahme bilden manche Modelle der Quantenkosmologie) wird die Zeit durch einen Parameter t dargestellt und als eindimensionales geordnetes Kontinuum gedacht. In solchen Fällen bedeutet „zeitliche Entwicklung“ meist die Angabe einer Bewegungsgleichung, entweder für die Zustände (in der Quantenmechanik spricht man dann vom Schrödinger-Bild) oder für die Observablen (das Heisenberg-Bild) eines Systems. In vielen Fällen hat die Bewegungsgleichung die Form einer Differentialgleichung. Es gibt aber auch Systeme, bei denen es sich um eine Integralgleichung handelt – meist Systeme mit einem Gedächtnis, d.h. die zeitliche Entwicklung hängt möglicherweise von Ereignissen ab, die in der ferneren Vergangenheit des Systems stattgefunden haben.

1.3 Die Postulate der Klassischen Mechanik

In der klassischen Mechanik beschreiben wir einen (reinen) Zustand durch einen Punkt $(x,p) \in P$ im Phasenraum P, also die Angabe eines Ortes x und eines Impulses p (oder, bei Vielteilchensystemen, die Angabe aller Orte und aller Impulse). Die mathematische Repräsentation einer Observablen ist eine Funktion $F : P \to \mathbb{R}$ über dem Phasenraum, also eine

Funktion von Ort und Impuls. Der Erwartungswert einer Observablen F in einem Zustand (x,p) ist einfach der Wert $F(x,p)$ dieser Observablen an dem Punkt im Phasenraum, der den Zustand beschreibt. Dieser Wert ist eindeutig und sollte (innerhalb der Fehlertoleranz der Messgeräte) immer derselbe sein.

Haben wir umgekehrt an einem System eine Observable $\mathcal{F}$ (mit zugehöriger mathematischer Repräsentation F) gemessen und einen Wert f erhalten, wissen wir, dass der Zustand ein Punkt im Phasenraum sein muss, der der Bedingung $F(x,p) = f$ genügen muss. Ein vollständiger Satz von Observablen $\{\mathcal{F}_1,...,\mathcal{F}_n\}$ legt einen Punkt im Phasenraum eindeutig fest. Misst man also diese Observablen und erhält Messwerte $\{f_1,...,f_n\}$, so ist der Punkt (x,p) durch die Bedingungen $\{F_1(x,p) = f_1,...,F_n(x,p) = f_n\}$ festgelegt und somit der reine Zustand des Systems bekannt. In einem minimalen vollständigen Satz von Observablen lässt sich auch keine Observable als Funktion der anderen Observablen ausdrücken. Hat der Phasenraum die Dimension $6N$ (für N Punktteilchen in 3 Raumdimensionen), so benötigt man im Allgemeinen auch $6N$ Observable, um einen Zustand eindeutig festzulegen.

Allgemein ist ein Zustand in der klassischen Mechanik eine Wahrscheinlichkeitsdichte $\omega(x,p)$ auf dem Phasenraum. Die Zuordnung eines Erwartungswerts für eine Observable mit mathematischer Repräsentation F ist dann

$$\langle F\rangle_\omega = \int_P F(x,p)\omega(x,p)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}p\,, \tag{1.1}$$

wobei das Integral über den gesamten Phasenraum P zu nehmen ist. Die reinen Zustände erhält man, indem man für ω speziell $\omega(x,p) = \delta(x - x_0)\delta(p - p_0)$ wählt. Der reine Zustand wird nun durch den Punkt (x_0,p_0) im Phasenraum beschrieben.

Damit sind für die klassische Mechanik die ersten vier Punkte unseres allgemeinen Schemas geklärt: (1) Observable sind Funktionen auf dem Phasenraum, (2) Zustände sind Wahrscheinlichkeitsdichten auf dem Phasenraum, (3) eine Wahrscheinlichkeitsdichte definiert zu einer Observablen einen Erwartungswert, und schließlich (4) können wir aus einem ausreichend großen Satz von Messwerten zu (unabhängigen) Observablen – beispielsweise Orts- und Impulsmessungen – auch auf den Zustand schließen, durch den ein System zu beschreiben ist. Das letzte Axiom, die Zeitentwicklung, wird dann beispielsweise durch die Newton'schen Axiome spezifiziert. Insbesondere das zweite Newton'sche Axiom gibt an, wie man eine Bewegungsgleichung aufstellen kann, wenn die Kräfte in einem System bekannt sind. Das erste (teilweise zusammen mit dem zweiten) Newton'schen Axiom gibt uns einen Hinweis, wie wir die Kräfte bestimmen können, und das dritte Newton'sche Axiom ist eine einschränkende Bedingung, die von Kräften erfüllt sein muss.

1.4 Die Postulate der Quantenmechanik

Observable werden in der Quantenmechanik durch selbst-adjungierte bzw. hermitesche Operatoren auf einem Hilbert-Raum dargestellt. Ein Zustand wird mathematisch durch einen Strahl (einen eindimensionalen Unterraum) in diesem Hilbert-Raum beschrieben. Meist wählen wir zur einfacheren Beschreibung einen auf eins normierten Vektor $|\psi\rangle$ auf diesem

Strahl als Repräsentanten, wir können einen Zustand aber auch durch die Angabe eines eindimensionalen Projektionsoperators P_ψ (der jeden Vektor in dem Hilbert-Raum auf diesen eindimensionalen Unterraum projiziert) darstellen. In der Quantenmechanik von Punktteilen verwenden wir zur Beschreibung eines Zustands oft eine sogenannte Wellenfunktion $\psi(x)$, die man aber als Vektor eines unendlich dimensionalen Hilbert-Raums (dem Raum der quadratintegrierbaren Funktionen) auffassen kann. Das Erwartungswertfunktional, d.h. die Vorschrift, nach der wir einer Observablen A eine Zahl $\langle A\rangle_\psi$ – ihren Erwartungswert in dem Zustand ψ – zuordnen, ist dann

$$\langle A\rangle_\psi = \langle\psi|A|\psi\rangle = \mathrm{Spur}\,(P_\psi A) = \int_V \psi(x)^* A\psi(x)\,\mathrm{d}x\,. \tag{1.2}$$

Dies sind drei Darstellungen des Erwartungswertfunktionals, je nachdem, ob man einen Zustand durch einen normierten Vektor, einen Projektionsoperator oder eine normierte Wellenfunktion über einem Volumen V repräsentiert.

Das Kollapspostulat bzw. das von Neumann-Lüders'sche Projektionspostulat gibt an, wie wir in der Quantenmechanik ein System in einem bestimmten Zustand präparieren können. Wurde eine Observable $\mathcal{R}$ an einem System gemessen und hat man den Messwert r erhalten, so ist das System durch einen Strahl zu beschreiben, der dem Eigenraum von R zu dem Eigenwert r entspricht. Ein vollständiger Satz kompatibler Observabler legt durch ihre Messwerte diesen Eigenraum auf einen eindimensionalen Strahl und damit einen reinen Zustand fest.

Ein allgemeiner Zustand wird in der Quantenmechanik durch eine Dichtematrix ρ beschrieben und der Erwartungswert einer Observablen A in einem Zustand ρ ist

$$\langle A\rangle_\rho = \mathrm{Spur}\,\rho A\,. \tag{1.3}$$

Eine Dichtematrix ist dabei durch folgende Bedingungen festgelegt:

$$\rho = \rho^\dagger \;\; (= (\rho^*)^T) \qquad \rho \geq 0 \;\; (\text{d.h. } \langle\psi|\rho|\psi\rangle \geq 0 \;\; \forall|\psi\rangle) \qquad \mathrm{Spur}\,\rho = 1\,. \tag{1.4}$$

Jede Matrix mit diesen Eigenschaften lässt sich als Linearkombination von paarweise orthogonalen Projektionsoperatoren P_i schreiben:

$$\rho = \sum_i p_i P_i \qquad \text{mit} \quad \sum_i p_i = 1 \;\; \text{und} \;\; p_i \geq 0\,. \tag{1.5}$$

Die orthogonalen Projektionsoperatoren $\{P_i\}$ beschreiben reine Zustände und die Koeffizienten $\{p_i\}$ lassen sich als die Wahrscheinlichkeiten interpretieren, mit der in dem gemischten Zustand ρ der reine Zustand P_i auftritt.

Die Festlegung des Hamilton-Operators bestimmt dann die zeitliche Entwicklung eines Systems, beispielsweise durch die Schrödinger-Gleichung oder die Heisenberg'schen Bewegungsgleichungen.

1.5 Die Postulate der Gleichgewichtsthermodynamik

In der Gleichgewichtsthermodynamik sind die Observablen die makroskopischen physikalischen Größen, die unter bestimmten Bedingungen kontrolliert bzw. konstant gehalten werden können. Neben der Energie E, der Teilchenzahl N (eventuell den Teilchenzahlen N_i von verschiedenen Substanzen oder Substanzen in verschiedenen Aggregatszuständen) und dem Volumen V sind das beispielsweise auch die Temperatur T, die Entropie S, der Druck p oder verschiedene chemische Potenziale μ_i.

Der sogenannte 0.te Hauptsatz der Thermodynamik besagt, dass es eine beobachtbare Größe T gibt, genannt Temperatur, die die Eigenschaft hat, dass sie für zwei Systeme, die eine ausreichend lange Zeit in Kontakt waren, gleich ist. Neben den aus der Mechanik bekannten Größen wie dem Volumen V oder der Teilchenzahl N wird durch den 0.ten Hauptsatz für die Gleichgewichtsthermodynamik eine weitere Observable postuliert, die sich nicht so einfach als Funktion über dem Phasenraum der N Teilchen darstellen lässt.

Zwischen diesen beobachtbaren (und kontrollierbaren) Größen bestehen Beziehungen, die für einen Gleichgewichtszustand charakteristisch sind. Beispielsweise lässt sich die Entropie als Funktion der Energie, des Volumens und der Teilchenzahlen ausdrücken. Das Gleiche gilt für die Temperatur oder den Druck. Umgekehrt kann man aber auch beispielsweise die Entropie als Funktion der Temperatur, des Volumens und der Energie schreiben. Je nach unabhängigem Variablensatz, den man betrachtet, unterscheidet man verschiedene Gesamtheiten. In der mikrokanonischen Gesamtheit betrachtet man meist die Energie als thermodynamisches Potenzial und die Entropie, das Volumen und die Teilchenzahlen als unabhängige Variable. Die Temperatur, der Druck und die chemischen Potenziale sind dann abhängige Variable. In der kanonischen Gesamtheit ersetzt man die Entropie als unabhängige Variable der mikrokanonischen Gesamtheit durch die Temperatur. Die Entropie wird dadurch zu einer abhängigen Variablen. Ähnlich kann man auch das Volumen durch den Druck als unabhängige Variable ersetzen, etc.

Als Postulat fordert man meist, dass reine Gleichgewichtszustände eine stückweise stetige Mannigfaltigkeit bilden. Ist der Gleichgewichtszustand als Punkt auf dieser Mannigfaltigkeit bekannt, kann man alle Observablen als Funktion dieses Punktes bestimmen. Dies ist ähnlich wie in der klassischen Mechanik. Der Unterschied zur klassischen Mechanik besteht im Wesentlichen darin, dass die Menge der reinen Gleichgewichtszustände eine allgemeine Mannigfaltigkeit bildet. In der klassischen Mechanik ist diese Mannigfaltigkeit der Phasenraum, d.h. ein (Ko)-Tangentialraum eines Konfigurationsraums, mit einer symplektischen Struktur (der Poisson-Klammer für Observable).

Literaturverzeichnis

[1] von Neumann, John; *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, Verlag von Julius Springer, Berlin 1935.

[2] Schrödinger, E.; *Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik*; Die Naturwissenschaften 23 (1935) 807–812, 823–828, 844-849.