

# Zum Geleit

Im akademischen Jahr 1980/1981 hielt Hans Primas an der ETH Zürich zwei Vorlesungen Statistische Mechanik I und II im Rahmen der Doktorandenfortbildung am Laboratorium für Physikalische Chemie. Abgesehen von den üblichen Kursen in Molekülstatistik, in welchen es um die Berechnung thermodynamischer Stoffdaten aus spektroskopischen Moleküldaten geht, fehlte ein entsprechendes Angebot in der Ausbildung der physikalischen Chemiker an der ETH. In den darauf folgenden Jahren wurden diese Vorlesungen dann unter der Bezeichnung „Physikalische Chemie A“ für Studierende nach dem Vordiplom in das physikalisch-chemische Fachstudium integriert.

Die Vorlesungen vermitteln eine *allgemeine* Einführung in die Spektroskopie. Im Laufe der 1950er Jahre war das Laboratorium für Physikalische Chemie der ETH zu einem der Weltzentren der Molekülspektroskopie geworden, an welchem eine Vielzahl von spektroskopischen Methoden gepflegt und weiterentwickelt wurde. Jede dieser Methoden hatte ihre eigene Theorie, so dass im Unterricht das Bedürfnis nach einer allgemeinen, von den Einzelheiten der jeweiligen Spektroskopie unabhängigen theoretischen Einführung entstand – damit nicht für jede Methode das weitgehend Gleiche stets aufs Neue vorgetragen werden musste.

Das theoretische Rahmenkonzept dafür bildete, was man als „Signaltheorie thermischer Quantensysteme“ bezeichnen könnte: Ein Eingangssignal für die elektromagnetische Anregung wird mit einem Ausgangssignal in Beziehung gesetzt, das in Form von Spektren die Reaktion des untersuchten Quantensystems fixiert, welches sich mit seiner Umgebung im Wärmegleichgewicht befindet. Es ist dies die Theorie, wie sie in den Kapiteln vier, fünf und sechs dargestellt wird.

Eine Besonderheit der Vorlesungen lag darin, dass für die Vermittlung der thermodynamischen Grundlagen der damals unübliche, elegante informationstheoretische Zugang nach E. T. Jaynes gewählt wurde. Auf diese Weise wurden viele der mathematischen und begrifflichen Schwierigkeiten umgangen, die die statistische Mechanik seit ihren Anfängen vor über hundert Jahren belasten. Darüber hinaus enthielt die Primassche Darstellung zahlreiche kürzere und längere Einschübe zu umstrittenen oder verdrängten, jedenfalls aber offenen Fragen der berührten Gebiete. Die Ausarbeitungen etwa über das Verhältnis von mechanischen und thermodynamischen Theorien, über das Wesen der Entropie, über die Herleitung von Fermi's

Golden Rule oder zu der Frage: „Gibt es Quantensprünge?“ boten überraschende Einsichten und haben bis heute nichts von ihrer Frische verloren.

Zum Zeitpunkt ihres Entstehens hatte Primas gerade sein theoretisches Hauptwerk „Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism“ fertiggestellt.<sup>1</sup> Nach einer Berufslehre als Chemielaborant und anschliessendem Technikumsabschluß hatte er auf Grund herausragender Leistungen eine Anstellung bei Prof. Hans Heinrich Günthard an der ETH erhalten. 1953 entschloß sich Günthard, den wenige Jahre zuvor von Edward Purcell und Felix Bloch entdeckten kernmagnetischen Resonanzeffekt aufzugreifen und zusammen mit seinem jugendlichen Mitarbeiter hochauflösende NMR-Spektrometer für chemische Anwendungen zu konstruieren.

In den darauf folgenden zehn Jahren entwickelte sich Primas zum anerkannten Experten für Analogelektronik und den Bau spezieller Magnete. Er löste zahlreiche ingenieurtechnische, physikalisch-chemische und mathematische Probleme der frühen Kernresonanz. Einer seiner damaligen Doktoranden, der nur fünf Jahre jüngere spätere Nobelpreisträger Richard Ernst, hat Jahre später diese Arbeiten in einem aufschlußreichen Essay porträtiert.<sup>2</sup> Sie führten u.a. zu 30 Patenten, einer Reihe kommerziell erfolgreicher NMR-Geräte und 1961 zu einer zunächst ausserordentlichen Professur an der ETH. Danach verlagerten sich Primas' Forschungsinteressen von der experimentellen zur theoretischen Chemie, wobei quantenmechanische Grundlagenprobleme immer mehr in den Vordergrund traten.

Die Vorlesungen entstanden 1980 im Rückblick auf eine fast zwanzig Jahre zurück liegende Forschungszeit. Sie belegen, wie Primas sich mit der Theorie spektroskopischen Experimentierens zu einer Zeit auseinandersetzte, als es noch kaum kommerzielle Spektrometer gab und physikalisch-chemische Doktorarbeiten vor allem in der Konstruktion neuer Geräte bestanden. Die hier vorliegende Überarbeitung beruht auf maschinengeschriebenen Unterlagen, die an die Studierenden abgegeben wurden, sowie auf handschriftlichen Vorlesungsnotizen. Die Herausgeber sind die Rechnungen durchgegangen, haben die Formeln kontrolliert und die Texte sprachlich bereinigt. Soweit irgend möglich wurde dabei die oft eigenwillige Ausdrucksweise beibehalten, die Primas' Vorlesungen den unverwechselbaren Ton gab.

In Inhalt und Perspektive richten sich die Lectures vor allem an Doktorierende der physikalischen Chemie und verwandter Fächer. Sie gehen zurück auf eine Zeit, als Macs und PCs noch wenig verbreitet waren. Um den Text als Lehr- und Lernbuch für den heutigen Gebrauch zu aktualisieren, haben die Herausgeber die Originalübungen durch zusätzliche Übungsaufgaben ergänzt, die mit Programmen wie MATLAB bearbeitet werden können. Die Lösungen können unter `quantum.voc-research.at` eingesehen werden.

---

<sup>1</sup> *Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism. Perspectives in Theoretical Chemistry* (with a foreword by Paul Feyerabend), Springer, Berlin, 1981.

<sup>2</sup> R. R. Ernst, Hans Primas and nuclear magnetic resonance, in H. Atmanspacher et al. (eds.), *On Quanta, Mind and Matter. Hans Primas in Context*, Kluwer, Dordrecht (1999).

Das Anspruchsniveau der Darstellung schwankt. Während die ersten Abschnitte der Einführung in die Informationsthermostatik so elementar gehalten sind, dass sie auch auf Gymnasialstufe vermittelt werden könnten, entspricht das sonstige Niveau im allgemeinen dem, was mathematisch und chemisch-physikalisch von einem Doktoranden anfangs der 1980er Jahren erwartet wurde. Gelegentlich aber gehen die mathematischen und begrifflichen Ansprüche doch darüber hinaus – vor allem dann, wenn Primas' eigene Forschungsinteressen berührt werden. In der Regel sind solche Abschnitte durch eine hinweisende Raute <sup>#</sup> („Kann beim ersten Studium überschlagen werden“) gekennzeichnet.

Wir danken Hans Primas, dass er das Material, das für ihn abgesunken im historischen Sediment liegt, zur Aufarbeitung frei gegeben hat. Besonderer Dank gilt auch seinem letzten Doktoranden, Prof. Dr. Pierre Funck, der die Abbildungen des vorliegenden Buches gestaltet, sowie Dr. Harald Atmanspacher, der das Personen- und Sachverzeichnis zusammengestellt hat.

Innsbruck und Zürich, den 1. Mai 2010

Anton Amann  
Ulrich Müller-Herold



<http://www.springer.com/978-3-642-05186-9>

Offene Quantensysteme

Die Primas Lectures

Amann, A.; Müller-Herold, U.

2011, X, 239 S. 15 Abb., Softcover

ISBN: 978-3-642-05186-9