

16 Erste Schritte in die Quantentheorie

Ein Raumschiff senkt sich auf die Oberfläche eines unbekanntes Planeten. Roboter schwärmen aus und bringen experimentelle Befunde herein. Die Menschen im Rumpf reden miteinander über die unglaublichen Vorgänge da draußen, prägen Begriffe, machen sich Bilder. Ja doch, Bilder! Sie versuchen, die Zusammenhänge quantitativ zu fassen. Manche Gleichungen festigen sich, andere werden unwichtig, weil herleitbar. Nach fünf Monaten „steht“ die Theorie und nach weiteren fünf Monaten ist sie durch Vorhersage und experimentelle Bestätigung zahlreicher weiterer Vorgänge gefestigt.

Auf den folgenden Seiten werden wir ein solches Luftlandeunternehmen versuchen. Die genannten „zehn Monate“ werden eingespart. Statt Details von Experimenten zu erklären, springen wir unverzüglich zu deren Idealisierung und Fazit. Und wir werden immer gleich die *r i c h t i g e n* Schlüsse ziehen, Begriffe einführen und in Bildern denken, die „gehen“. Wir betätigen uns also als geniale Erfinder. Auf einem solchen Weg lauern drei Gefahren.

1. Gefahr durch Nachahmungstäter. Nein, Leute, wir tun hier nur so genial. Von allen scheinbar so mutigen Aussagen ist bereits bekannt, dass und in welcher Weise sie auf Rechnung beruhen. Die Quantentheorie ist 80 Jahre alt. Sie stimmt. Sie stimmt, weil sie mit *a l l e n* Experimenten im Einklang steht. Auch in der heutigen Elementarteilchentheorie stimmt sie (lediglich werden wir hier nur die nichtrelativistische Variante bedenken). Ob die Physiker eine starre Lehrmeinung verteidigen? Oh nein: wer eine einzige reproduzierbare Abweichung findet, bekommt den Nobel-Preis. Es ist oft diese Einheit der Physik (die Geschlossenheit der einen Mathematik, der die Natur folgt), welche die „Einstein-Widerleger“ so gern vergessen.¹
2. Gefahr durch Ungeduld. Es wird ein Weilchen dauern. Wenn die Erfindung gemacht ist, braucht sie zunächst eine mathematische Formulierung. Die zugehörigen Postulate dürfen sich nicht widersprechen, sich nicht überlappen und nichts vorhersagen, was man gar nicht messen kann

¹ Es gibt einen Vortrag von Max Planck, gehalten am 17. 2. 1933 im Verein deutscher Ingenieure in Berlin, in welchem er die „Zuschriften“ kategorisiert und freundlich niedermacht. Eine Kopie der einschlägigen vier Seiten könnte auch heute noch Wirkung zeigen. „Wege zur physikalischen Erkenntnis“, Hirzel, Leipzig 1933.

(das überzählige Postulat der „Ideal-Messung“ findet sich leider in allerlei Lehrbüchern). Die neue Theorie wird zu erklären haben, weshalb die alte so gut funktionierte. Erst wenn schließlich die Anwendungen auf verschiedenste Situationen gut gehen (analytisch möglich sind, Sinn machen und sich im Experiment bestätigen) und erneut gut gehen usw., dann stellt sich Vertrauen ein: so ist sie wirklich, die Welt.

3. Gefahr durch die Penetranz falscher Vorbildung. „Mit der Quantenphysik betreten wir den Bereich der Modelle.“, sagt einer und lächelt schief, „Da darf man so denken, oder auch so. Hier beschreiben die Physiker nur. Und jetzt wird das alles mal wieder etwas anders beschrieben.“ Verdammt nochmal, wo kommt das her? Aus Schundromanen, manchen Schulbüchern nämlich. Nichts gegen Romane und Bilder, aber sie müssen doch bitte etwas mit der Wahrheit zu tun haben. Die Zeit der „Atom-Modelle“ ist längst vorüber. Das Thomson-Modell ist falsch. Die Bohr-Sommerfeld-Theorie ist falsch. Die Aufzählung historischer Irrungen verbildet, lenkt ab und vergeudet wertvolle Zeit. Liebe Lehrer am Gymnasium, falls etwa solche „Modell-Seiten“ im Schulbuch anstehen, dann lassen Sie diese doch herausreißen und gemeinsam feierlich verbrennen.

Wenn die Relativitätstheorie eine gewisse Erschütterung unserer Vorstellungswelt war, so ist wohl die Quantentheorie ein Erdbeben. Es wird ausgelöst durch die folgenden drei Worte.

Teilchen sind ausgedehnt

Diese erste Erkenntnis beruht auf einer Fülle von Experimenten. Statt eines auszuwählen, sei lieber darauf verwiesen, dass letzten Endes alle Experimente die Ausdehnung zeigen, wenn man nur jeweils genau genug hinsieht.

Kaum hat er obige drei Worte im Sinn, schon ruft der Analogrechner Mensch allerlei Bilder ab. Etwas Ausgedehntes hat eine Form, vielleicht die einer Vollkugel oder einer Hohlkugel, eines Autoreifens, einer Wolke oder einer Maus. Alles in Ordnung: jede gewünschte Form eines Teilchens kann man mit etwas Experimentierkunst qualitativ herstellen (wir werden sehen). Nur eines ist nicht erlaubt, nämlich sich die genannten Formen wiederum aus Teilchen aufgebaut zu denken. Abgelehnt. Ein Teilchen, ein Elektron ist ausgedehnt. Nun, dann ist es wohl eine Funktion mit Werten im Raum, ein Feld. Die Funktion möge den Namen $\psi(\vec{r}, t)$ bekommen. Das Elektron ist zur Zeit t im Zustand ψ .

Wenn das stimmt, die Sache mit der Ausdehnung, dann geht das Märchen vom Massenpunkt zu Ende. Die ehrwürdige Mechanik sagt die Zukunft $\vec{r}(t)$ von Punkten voraus. Wie sich aber die Form eines Teilchens im Laufe der Zeit verändert, das weiß sie nicht. Die Mechanik ist falsch. Auch die herkömmliche Elektrodynamik ist falsch. Wir werden uns hier jedoch vorrangig damit befassen,

die „erste Hälfte Theorie“ zu reparieren. Das Wort Quantenmechanik verweist auf diese erste Hälfte. Wie schon in der Mechanik seien Kräfte gegeben.



Bild 16–1. Eine Maus unter dem Teppich. Mitte: Zwei Höhenlinien von oben gesehen. Das rechte zeigt die Maus (Teilchen?) aus 100m Höhe.

Wie sehr oder „wie wenig falsch“ die Mechanik ist, das hängt nach Bild 16–1 von der Entfernung ab. Eine Maus sieht aus 100m Entfernung nur noch wie ein Punkt aus, der sich bewegt. Dies ist bereits eine erste Erklärung dafür, weshalb wir über Jahrhunderte nichts von der Ausdehnung eines Teilchens bemerkt haben. Wir waren stets zu weit von ihm weg. Im weit–weg–Grenzfall sollte (wird, siehe letzter Abschnitt) die Quantenmechanik wieder auf Newton’s Bewegungsgleichung führen. Für welches $\vec{r}(t)$? — für die Mitte * des Teilchens.

Ein zweiter Grund dafür, nie Teilchen–Interferenz oder einen Teilchen–Regenbogen gesehen zu haben, liegt darin, dass die Steinchen, mit denen wir werfen, immer gleich aus ca. 10^{23} Teilchen bestehen. Sie sind gebunden. Nun darf auch das ganze Steinchen ruhig als ein Teilchen angesehen werden, aber als solches hat es die 10^{23} fache Masse. Inwiefern große Masse zu geringer Ausdehnung (seines Schwerpunktes) führt, zeigt sich noch (allerdings nicht mehr in dieser Einführung). Einzelne freie Teilchen (z. B. jene in der kosmischen Strahlung) gehen wiederum unseren trüben Augen durch die Lappen.

Der oben erwähnte Analogrechner ruft auch noch andere Bilder ab, nämlich aus der Rubrik „Feld“. Räumlich ausgedehnt ist auch ein elektrisches Feld, etwa wenn es mit radialer Richtung um eine positive Ladung herum im Vakuum hängt. Um einen Magneten herum bündeln sich die geschlossenen Linien eines Magnetfeldes. Feld im Raum, das gibt es. Zu elektromagnetischen Feldern wissen wir alles. Es steckt alles in den Maxwell–Gleichungen. Zum Feld ψ wissen wir nichts. Darum ist Quantenmechanik so sehr neu, weil sie gleich am Anfang so viele Fragen aufwirft. Um darauf verweisen zu können, bekommen sie eine Gleichungsnummer:

1. Hat ψ eine innere Struktur? (es könnte wie \vec{E} ein Vektor sein)
2. Verändert sich ψ im Laufe der Zeit von ganz allein?
3. In welcher Form kann es in Ruhe bleiben? (16.1)
4. Wie reagiert der Feldklumpen auf gegebene äußere Potenziale?
5. Was passiert, wenn ein ausgedehntes Elektron Zählrohre erreicht?

Die Fragen zwei bis vier verlangen nach einer Bewegungsgleichung für ψ . Hätten sich solche Fragen nicht auch gestellt, wenn über elektrische Felder noch nichts bekannt gewesen wäre?! Allmählich wird der Blick auf Experimente unabweisbar.

Experiment 1: ein Elektron schläft

Seit etwa 1920 war klar, dass der schwere Kern eines Atoms nur einen winzig kleinen Teil des Volumens erfüllt. Der Vergleich Fußballstadion (Elektron) mit Erbse (Kern) ist hübsch. Zugleich ist fast die gesamte Masse des Atoms im Kern anzutreffen: Masse des Protons = 1836 mal jene des Elektrons. Rutherford's schwere α -Teilchen (2 Protonen, 2 Neutronen) bemerkten die leichte Hülle kaum und streuten sich fröhlich am fast-punktförmigen Kern der Goldatome. Nein, dies war noch nicht das in der Überschrift genannte Experiment.

Das Experiment, aus welchem wir jetzt etwas lernen wollen, besteht stark idealisiert (Erddanziehung bitte vernachlässigen) darin, dass wir ein Wasserstoff-Atom (Proton plus Elektron) vorsichtig in die Mitte eines großen Vakuumbereichs legen und dann warten. Experimenteller Befund: nichts. NICHTS passiert!! Es strahlt **nicht**! Das Elektron schläft. Sein Feldklumpen ruht still und starr wie der See.

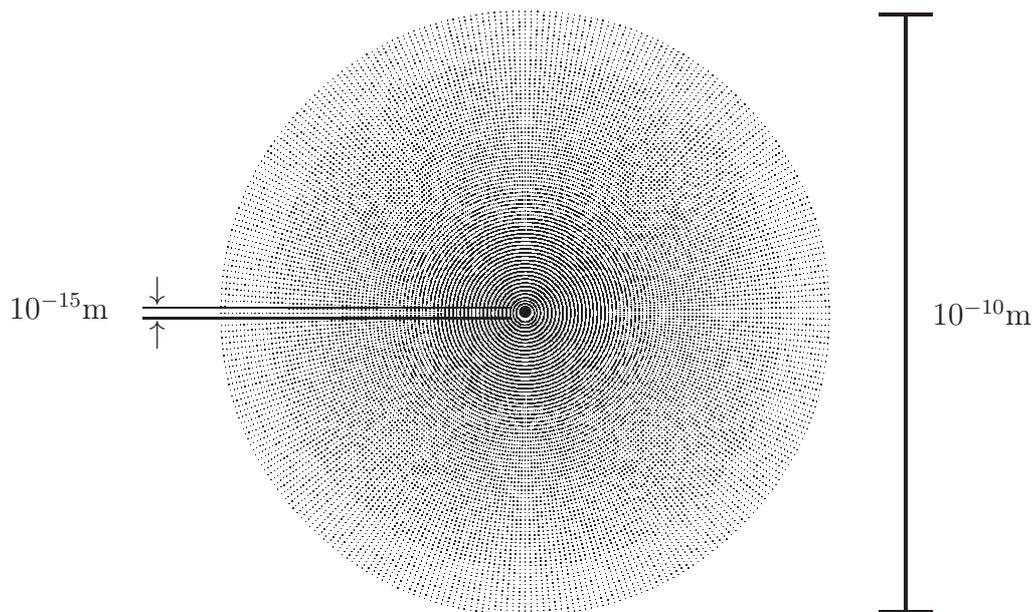


Bild 16–2. H-Atom im Grundzustand

Würde der Feldklumpen wackeln, dann wäre es zumindest sehr wahrscheinlich, dass seine Ladung wie eine Sendeantenne wirken und elektromagnetische Wellen aussenden würde. Wir kommen den weiter oben schon verprügelten „Modellen“ wieder gefährlich nahe. Neben diesen gibt es auch noch jene Embleme von Atomic Energy Commissions, auf welchen man Elektronen um den Kern kreisen sieht. Jaja, auch diese Embleme lassen an Idiotie nichts zu wünschen übrig. Aber wer glaubt schon dem hier tätigen Schreiberling. Mal sehen, was [Landau/Lifschitz] dazu sagen, Bd. III, Abschnitt 1, erster Absatz:

Bei dieser Bewegung müssten die Elektronen, wie bei jeder beschleunigten Bewegung von Ladungen, ununterbrochen elektromagnetische Wellen aussenden. Durch Strahlung müssten sie ihre Energie verlieren, was letzten Endes dazu führen müsste, dass sie in den Kern stürzen. Nach der klassischen Elektrodynamik wäre ein Atom also instabil; das entspricht in keiner Weise der Wirklichkeit.

Das Elektron in Bild 16–2 ist in seinem **Grundzustand**. Das H–Atom musste so behutsam in den Raum „gelegt“ werden, damit das Elektron nicht aufwacht (angeregte H–Atome können natürlich strahlen). Aber auch Rutherfords Goldatome befanden sich im Tiefschlaf. Ein wenig gesündigt haben wir beim Proton. Wir haben es uns kurzerhand weiterhin als klassisches Kügelchen vorgestellt. Aber es ist ein legitimes Vorgehen, sich den Weg in die Quantenphysik in kleine Schritte aufzuteilen: schwere Teilchen zuletzt. Dass das Atom als Ganzes wiederum ein Schwerpunkt–Feldklumpen ist, behandelt man besser später.

Fazit: es gibt **stationäre Zustände**, solche, welche sich zeitlich nicht verändern und nicht strahlen. Wie sich ein Elektron schlafen legen kann, das hängt vom Sofa ab, nämlich von der Form des Potentials. Hier war es das Coulomb–Potential des Protons. In der Mechanik reduziert sich Statik auf das Lösen von $0 = m\ddot{\vec{r}} = -\text{grad} V(\vec{r})$, d. h. auf die Suche nach dem Minimum von V . Quanten–Statik ist viel komplizierter, weil zur Bestimmung der Schlaf–Formen eine partielle Dgl zu lösen sein wird. Bei elektromagnetischen Feldern ist es allerdings ebenso: vom Form–Bestimmungs–Typ sind auch die beliebig biestigen Probleme der Elektrostatik oder der Magnetostatik. Statik ist dennoch nur ein kümmerlicher Spezialfall (eines jeden Gebietes). In der Natur (in der Physik) bewegt sich etwas. Quanten–Dynamik ist das eigentliche und viel interessantere (aber auch schwierigere) Anliegen.

Das Proton trägt die positive Elementarladung e . Das Atom als Ganzes ist elektrisch neutral. Es ist also recht verführerisch, in der Wolke von Bild 16–2 eine Ladungsdichte $\varrho(\vec{r})$ mit $\int \varrho = -e$ zu erblicken. Sobald man aber dafür den Nachweis antreten will, bekommt man es entweder mit Messprozess–Details zu tun (siehe unten) oder man muss weitere Teilchen in die Quantenmechanik des Systems einbeziehen. Fatal wäre, wenn jemand einen Teil der Wolke mit einem anderen Teil wechselwirken lassen und die elektrostatische Energie ausrechnen wollte. Das wird falsch.² Man darf Ladungs–Wahrscheinlichkeitsdichte sagen (siehe später). Aber „Wolke“ ist gar nicht so übel: eine aus ganz neuer Physik.

² Vorgriff: Energie der Wolke $= \int \psi^* H \psi = -1 \text{ a.u.}$ ($1 \text{ a.u.} = 13.6 \text{ eV}$), bestehend aus kinetischer $\int \psi^* T \psi = 1 \text{ a.u.}$ und potenzieller Energie $\int |\psi|^2 V = -2 \text{ a.u.}$. Das sind ψ^2 –Bildungen. Die elektrostatische Energie der Verteilung $\varrho = -e|\psi|^2$ wäre hingegen eine ψ^4 –Bildung und würde (abzüglich Proton allein) $-11/8 \text{ a.u.}$ geben. — Übrigens, Bild 16–2 illustriert ψ und *nicht* $|\psi|^2$. Sobald wir zur inneren Struktur mehr wissen, können wir die ψ –Phase per Farbgebung hinzufügen oder mittels winziger Zeiger an jedem Punkt.

Experiment 2: ein Elektron teilt sich

Wir Menschen sind zwar ausgedehnt, aber es gelingt uns nicht, ein Bein bei Oma zu lassen und den Kopf in der Uni. Mittels Brückenpfeiler ein Auto zu zerteilen, das könnte zur Not gehen. Ein Elektron macht so etwas ohne Wehklagen, ein Feldklumpen Licht übrigens auch. Thomson schoss 1927 einzelne Elektronen durch eine dünne Folie: deren Atomkerne waren die Brückenpfeiler. Davisson und Germer ließen Elektronen schräg gegen ein Waschbrett ballern (gegen eine Kristalloberfläche, ein atomares Waschbrett also). Aus diesem Experiment werden wir so gut wie alle erforderlichen Schlüsse ziehen, auch quantitative.

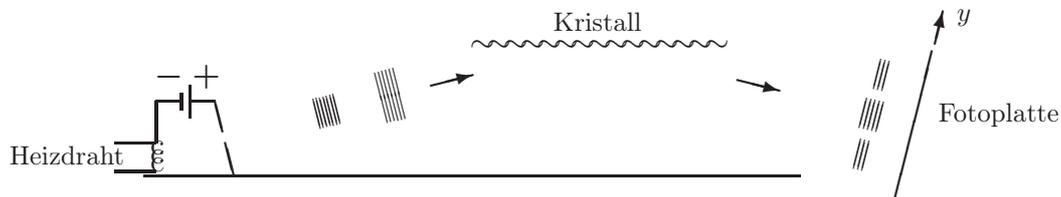


Bild 16–3. Ein gestreutes Elektron interferiert mit sich selbst

Zur Erklärung dessen, was in Bild 16–3 geschieht, ist vorweg eine Erkenntnis nützlich, die man sich am besten erst später aus der Schrödinger-Gleichung per Rechnung herleitet. Wenn ein Teilchen keine Potenziale spürt (keine Schlafmulde hat), dann verbreitert sich sein Feldklumpen ganz von allein, das **Wellenpaket zerfließt**. Das Elektron mag nach Austritt aus einem Heizdraht und nach Beschleunigung auf eine bestimmte (bekannte) Energie noch recht gut lokalisiert sein. Aber am Kristall-Waschbrett kommt die Wolke des (einen!) Elektrons bereits auf breiter Front daher. Vom Kristall entfernt sich das Elektron wie eine Wasserwelle von einer Wellblechwand. Die Teilwellen interferieren. Was sich dann der Fotoplatte nähert, das ist ein Elektron in einem mehr-buckligen Zustand (hilfreiches Wort!). Je nach Laune wandeln wir übrigens das Experiment etwas ab. Davisson-Germer's Zählrohre sind bereits durch die Körner der Fotoplatte ersetzt. Das eigentlich räumliche Kristallgitter sei waschbrettförmig, damit wir eben denken können. Das Wellblech sei einfach ein gegebenes periodisches Potenzial, unten Null, nach oben hin stärker werdend. Daraufhin erwartet man wohl, dass Streifen auf der Fotoplatte erscheinen (Fragezeichen). Langsam, langsam. Was die bösen Fotokörner dem Elektron abverlangen, das ist grauenhaft und wird erst im übernächsten Abschnitt aufgegriffen.

Das Teilchenfeld hat Struktur : $\psi \in \mathbb{C}$

Wenn sich Teile des Elektron-Feldes überlagern (addieren) können, um sodann Interferenz zu zeigen, dann muss dieses Feld in irgendeinem Sinne eine Welle

sein können, d. h. etwas, was periodisch vom Argument $\vec{k} \vec{r} - \omega t$ abhängt. Wir erinnern uns, was Schall und Licht sind. Schall kann interferieren:

$$\vec{k}_1 = (\kappa, \eta, 0), \quad \vec{k}_2 = (\kappa, -\eta, 0), \quad \frac{\vec{k}_1 + \vec{k}_2}{2} = (\kappa, 0, 0), \quad \frac{\vec{k}_1 - \vec{k}_2}{2} = (0, \eta, 0),$$

$$\cos(\vec{k}_1 \vec{r} - \omega t) + \cos(\vec{k}_2 \vec{r} - \omega t) = 2 \cos(\kappa x - \omega t) \cos(\eta y). \quad (16.2)$$

Überlagerung zweier leicht verkippter Wellen nach rechts gibt eine y -modulierte Rechts-Welle. Links von der Verkipplungsursache möge eine ebenwellige Luftdichte $\sim \cos(\vec{k} \vec{r} - \omega t)$ vorgelegen haben. Jetzt kommt das Problem. Zu einem einfachen in \vec{k} -Richtung fliegenden Elektron-Feld ist eine solche „Welligkeit vorher“ nie beobachtet worden, Betonung auf „solche“. Wenn sich z. B. der Kugelkumpen aus Bild 16-2 nach rechts bewegt, dann sollte wenigstens das ungewellt bleiben, was man als Ladungsdichte (Gefahrenzeichen) ansprechen möchte. Die folgende Zeile zeigt den Weg:

$$1 = c^2 + s^2 = |c + is|^2 = |e^{i(\vec{k} \vec{r} - \omega t)}|^2 = |\psi(\vec{r}, t)|^2. \quad (16.3)$$

Welligkeit in der Phase, aber nichts davon in der Ladungs(wahrscheinlichkeits)-dichte $-e|\psi|^2$. Von hier an halten wir daran fest, dass allgemein das Teilchen-Feld komplexe Werte hat. Es ist sozusagen „zweikomponentig“, denn man kann ja die Kunstzahl i auch als Matrix schreiben:

$$i = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \psi = \Re \psi + i \Im \psi \rightarrow \begin{pmatrix} \Re \psi & -\Im \psi \\ \Im \psi & \Re \psi \end{pmatrix}.$$

Das ist allerdings unpraktisch. Übrigens konnten auch die elektromagnetischen Felder zu einem $\vec{\psi} = \vec{E} + ic\vec{B}$ kombiniert werden. Erst in messbaren Größen darf kein i mehr erscheinen. Frage 1. in (16.1) ist beantwortet.

Nun sind wir darauf sehr gespannt, ob und wie wohl zwei verkippte solche e-hoch- i -Wellen interferieren. Mit den beiden \vec{k} -Vektoren aus (16.2) folgt

$$e^{i\vec{k}_1 \vec{r} - i\omega t} + e^{i\vec{k}_2 \vec{r} - i\omega t} = e^{i\kappa x - i\omega t + i\eta y} + e^{i\kappa x - i\omega t - i\eta y} = 2e^{i(\kappa x - \omega t)} \cos(\eta y). \quad (16.4)$$

Hurra. Die Kosinus-Modulation gibt dem Feld Nullstellen. Der Abstand zweier Nulllinien ist π/η . Also kann man η messen. Die Idealisierung, auf welche die Rechnung (16.4) zutrifft, wird üblicherweise das **Doppelspaltexperiment** genannt. Die überlagerten beiden Wellen können nämlich von zwei parallelen Linien (Spaltabstand a) auf einer zum Schirm parallelen Ebene (große Entfernung ℓ) ausgegangen und erst später quasi eben geworden sein (malen!). Die Komponenten z. B. von \vec{k}_1 stehen dann im Verhältnis der genannten Längen: $\eta/\kappa = (a/2)/\ell$. Kennt man a , so auch $k = |k| = \sqrt{\kappa^2 + \eta^2}$. Bei der Rückkehr

vom Doppelspalt zu Davisson–Germer, d. h. bei Übergang zu den vielen „Spalten“ am Wellblech von Bild 16–3, passiert nichts qualitativ Neues mehr. Kurz: aus der Gitterkonstanten des Kristalls und aus dem Bild am Schirm gewinnt man $k = |\vec{k}|$. Die Richtung von \vec{k} vor Erreichen des Kristalls ist natürlich die Flugrichtung des Teilchens.

Zur Beschleunigungsphase links im Bild 16–3 weiß man, welche Energie E das noch fast punktförmige (noch klassische) Elektron mitbekommen hat. Aus $E = p^2/(2m)$ lässt sich auf seinen Impuls \vec{p} schließen. Nun kann man verschiedene E herstellen und eine lange Messreihe verfolgen, stets mit \vec{p} in der ersten Spalte und \vec{k} in der zweiten. Was mag dabei auffallen? Experimenteller Befund:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad , \quad \hbar = 1.05 \dots \cdot 10^{-34} \text{Js} \quad . \quad (16.5)$$

Je höher die Energie des Teilchens, um so kürzer seine Wellenlänge $\lambda = 2\pi/k$. Darum also rufen Leute an den Beschleunigungsanlagen nach immer höherer Energie, weil sie dann mit dem „Teilchen–Licht“ immer kleinere Objekte auflösen können. Die Beziehung (16.5) gilt natürlich nur, wenn das Teilchen in einem $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ -Zustand ist. Wir werden noch sehen, dass ihm genau dann auch ein bestimmter Impuls \vec{p} zugeordnet werden kann ($\hbar\vec{k}$ nämlich).

Bei quantenmechanischen Vorgängen ist es mitunter wichtig (und mitunter gar nicht so einfach), das **System** zu benennen. Es besteht aus den quantenmechanisch zu behandelnden Teilchen, aus Potenzialen (den klassisch vorgegebenen Kräften also) und ggf. Anfangsbedingungen. **N i c h t** hinzu gehört der Messapparat, welcher dem Teilchen Übles aufzwingt (der nächste Abschnitt kommt ja gleich). Systeme sind in Zuständen ψ , welche sich im allgemeinen mit der Zeit t verändern. So ist es auch bei meiner Tochter. **Superposition** heißt, dass man Teile des Feldes eines Teilchens, wenn sie übereinander laufen, einfach addieren darf. Etwas gefährlich ist der oft zu lesende Spruch, mit ψ_1 und ψ_2 sei auch $\psi = \alpha\psi_1 + \beta\psi_2$ ein Zustand. Genauer bitte: wenn die ψ_1, ψ_2 mögliche Systemzustände sind, dann ist auch die Linearkombination ein **m ö g l i c h e r** Zustand, sofern man ihn nachträglich erneut **normiert**. Normieren heißt, $\int \psi^* \psi = 1$ zu verlangen. Mehr dazu steht unter (16.8) und alles in (16.30), (16.31).

Frage ist nicht Antwort

Wir sind immer noch bei Bild 16–3. Rechts fliegt also ein aus Wolkenfetzen bestehendes ausgedehntes Elektron durch den Raum und ist dabei ganz glücklich. Die zerfetzte Wolke trägt insgesamt noch immer die Elementarladung $-e$. Aber nun trifft sie auf einen Schirm aus Fotokörnern und jedes dieser Körner stellt eine sehr unanständige Frage „Elektron, bist Du da?“. Um sich schwärzen zu können, braucht ein Korn die ganze Ladung $-e$. Ja oder Nein! Nun kann einem das arme Elektron leid tun. Es ist weder da noch dort, sondern eben ausgedehnt. Es kann nicht reden, um seinen Zustand zu erklären. Naja, also sagt es

halt bei irgendeinem Korn ja, damit wenigstens eines zufriedengestellt ist. Frage \neq Antwort. Der Frage A entspricht eine makroskopische Apparatur und dieser ein Operator (?!). Die Antwort a , der Messwert, ist hingegen eine ganz konkrete reelle Zahl. Eigentlich sind es am Schirm zwei Operatoren „Hast Du meine x -Koordinate, hast Du meine y -Koordinate“, und die sporadische Antwort ist ein Zahlen-Paar. Am besten fokussieren wir das Elektron noch auf die Papierebene von Bild 16-3. Der Schirm ist dann eine Linie und a ein sporadischer y -Wert. Eindimensional denkt es sich leichter.

Die Quelle im Davisson-Germer-Experiment möge jede Minute ein Elektron auf die Reise schicken. Am Abend waren wir ungeduldig, haben nach 10 Minuten die Fotoplatte durch eine neue ersetzt und die alte entwickelt. Sie zeigt 10 schwarze Punkte, willkürlich verteilt. Enttäuscht gehen wir zu Bett. Aber am nächsten Morgen ist etwas Wunderbares zu sehen. Die 500 Punkte haben sich zu parallelen schwarzen Streifen gruppiert. Jetzt, ja jetzt können wir die Größe η ablesen — oder auch noch bis nächste Woche warten, der größeren Genauigkeit wegen. Die Frage 5. in (16.1) hat eine erste Antwort bekommen.

Es ist eine sehr nützliche Anstrengung, zu jedem Teilgebiet der Physik in wenigen Worten sagen zu wollen „was es ist“. Speziell zur Quantenmechanik sind wir jetzt dazu in der Lage. In einer groben Weise sind wir zum ersten Male „durch“. Was in der folgenden Gleichung (16.6) zu lesen steht, ist zum einen die Zusammenfassung des Bisherigen. Zum anderen sind aber auch ein paar Neuigkeiten eingearbeitet. (16.6) ist also auch ein Ausblick, eine längliche Überschrift sozusagen. Wenn man die Formeln zur rechten erst einmal ignoriert (einem späteren Rückblick vorbehält), dann folgt nun eine

Quantenmechanik in Worten :

Ein quantenmechanisches System ist in einem Zustand. Eine Bewegungsgleichung, gegebene Potenziale enthaltend, regiert die zeitliche Veränderung des Zustandes, gibt aber auch seine möglichen statischen Formen.

$$\begin{aligned} \psi(\text{VARIABLE}, t) \\ \in \mathbb{C} \\ i \hbar \dot{\psi} = H \psi \\ H \varphi = E \varphi \end{aligned}$$

Die Frage (makroskopisch klassischer Messapparat, Observable, A) ist im allgemeinen etwas anderes als die Antwort (Messwert, a). Bei (bezüglich Zustand) unpässi-ger Frage kann man nur noch eine Wahrscheinlichkeit d a f ü r angeben (berechnen und per vielfacher Experiment-Wiederholung messen), dass ein bestimmter reeller Messwert erhalten wird.

$$\begin{aligned} (16.6) \\ A \varphi_a = a \varphi_a \\ P_a = |\int \varphi_a^* \psi|^2 \end{aligned}$$

Physikalisch-anschaulich zerfallen obige Aussagen in zwei sehr unterschiedliche Strukturen. Über dem horizontalen Strich ist die Rede von der eindeutigen und vollständigen Zukunftsregie eines Feldes, einer Art Elektrodynamik. Warum nur genügt das nicht — eine über 50 Jahre verdrängte Frage, welche heute

wieder aktuell zu werden scheint. Unter dem Strich steht DAS Mysterium der Quantentheorie. Es teilt die Physiker in zwei Lager. Die einen sagen, so ist es und fertig (Kopenhagener Schule). Wer heute noch nach „verborgenen Parametern“ sucht, der habe nichts verstanden. Im anderen Lager wird erwogen, dass die Bewegungsgleichung auch das Verhalten des Messapparates als Vielteilchen-Quantensystem restlos erfasst (Everett-Postulat). Die untere Hälfte gelte, sagt Bell, nur FAPP: *for all practical purposes* (mehr hierzu in den Zitaten am Kapitelende).

Eigenartigerweise hat der überwältigende Erfolg der Quantentheorie (eine Übereinstimmung von Experiment mit analytischem Resultat nach der anderen) fast ausschließlich nur mit der oberen Hälfte zu tun (mit dem Lösen der Schrödinger-Gleichung): Atomspektren, chemische Bindung, Bänder im Festkörper, Tunnel-effekt, Phononen, Magnetismus, statistische Physik, Kerne und so fort. Ob nun „Krückstock“ oder nicht, die untere Hälfte wird uns jetzt entscheidend helfen, unsere Worte-Quantenmechanik in Formelsprache zu übersetzen.

Messwerte sind die Eigenwerte von A

Es wird jetzt wirklich unausweichlich, Erfindungen zu machen (und erst nachträglich zu testen). In (16.6), untere Hälfte, ist von unpässlichen Fragen die Rede. Vielleicht gibt es auch pässliche. Dazu haben wir unverzüglich eine Idee: wenn man durch Potenziale das Elektron auf $y = a$ an der Fotoplatte fokussiert, dann wird mit Sicherheit das Fotokorn bei $y = a$ geschwärzt: Messung von y gibt Messwert a mit Wahrscheinlichkeit 1. Zustand und Frage können also zueinander passen. Wenn passend, wollen wir einen Zustand mit φ (statt ψ) bezeichnen. Sollte ein Leistungskurs bis hierher vordringen, dann mögen dem Lehrer allerlei Geschichten aus dem täglichen Leben einfallen. Ah, Schüler X hat mal wieder seinen Grundzustand erreicht: da wackelt nichts mehr. Die Nachbarin Y lärmt wieder, man sollte es ihr mit Fotokörnern stopfen. Würden Sie zu meiner Frage bitte endlich einen Eigenzustand annehmen?! Der Alltag lässt sich auch manipulieren, z. B. dadurch, dass ein Befragter nur ein Gerät mit Ja- und Nein-Knopf bedienen darf. Es können auch 3 Knöpfe sein, oder ein Klavier. Dem Wolkenfetzen-Elektron von Bild 16-3 steht ein Klavier mit unendlich vielen infinitesimal dünnen Tasten zur Verfügung.

Ein Operator A sei gegeben. Wir variieren Zustände ψ (in Gedanken und experimentell) so lange, bis ein solcher „passt“, bis also im wiederholten Experiment A -Messung stets ein und denselben Messwert a ergibt. Diesen zu A passenden und a gebenden Zustand φ_a nennen wir **Eigenzustand von A zum Messwert a** . Jetzt tasten wir in unseren Erinnerungen herum, ob wir nicht eine Struktur kennen, welche einem Operator zugleich Werte und je dazu gehörige Funktionen zuordnet. Natürlich, derartiges kennen wir. Es ist das Eigenwertproblem. $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ hat Eigenwerte $+1$ und -1 , und die je zugehörigen Eigenvektoren sind $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ bzw.

($\begin{smallmatrix} 1 \\ -1 \end{smallmatrix}$). Auch im Funktionenraum kennen wir z. B. die Eigenfunktionen $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ des Laplace-Operators Δ mit Eigenwerten $-k^2$ (siehe Fourier-Transformation und Diffusionsgleichung).

Versuchsweise, aber völlig allgemein, postulieren wir nun, dass die möglichen Messwerte bei A -Messung aus

$$\overbrace{A\varphi_{a\nu}(x)}^{\downarrow} = a\varphi_{a\nu}(x) \quad (16.7)$$

zu erhalten seien. Der Pfeil soll deutlich machen, worauf (auf welche Abhängigkeit) A wirkt. Die Indizes a, ν können erst nach Lösung von $A\varphi = a\varphi$ angebracht werden. Der Index $\nu = 1, \dots, \eta$ ist nur dann erforderlich, wenn es zu einem Eigenwert a mehr als eine Lösung gibt. η heißt **Entartungsgrad** von a . Als Lösung wird nur eine „normierbare“ Funktion anerkannt, und als andere Lösung nur eine zu bisherigen Lösungen „orthogonale“. Wenn A Matrix ist, sind uns solcherlei Worte aus Kapitel 4 (Hauptachsentransformation) wohlbekannt. Bei der Variablen x ist natürlich an die Koordinate in 1D gedacht. Aber man darf, und das ist ein sehr angenehmer Umstand, sich x auch als Index für Vektorkomponenten denken ($A\varphi_j = A_{jk}\varphi_k$), oder als \vec{r} in 3D (oder als Variablen-Satz \vec{r}, σ für ein Teilchen mit Spin).

Eigenvektoren mit endlicher Anzahl von Komponenten sind selbstverständlich normierbar. Die Eigenwerte liegen „diskret“. Aber bei unendlich vielen Komponenten ist die Normierbarkeit eine echte Forderung. Sie verwirft nicht-normierbare Vektoren. Bei Eigenfunktionen (kontinuierlicher Komponentenindex) ist es ebenso. Die Eigenwerte a können in jeder erdenklichen Weise auf der a -Achse angeordnet sein. Sie können diskret bleiben (Drehimpuls), halbseitig kontinuierlich liegen (Energie eines freien Teilchens), Lücken bilden (Energiebänder) oder auch artig die ganze Achse ausfüllen (Ort und Impuls). Die Anordnung der Eigenwerte auf einer Achse nennt man das **Spektrum** des Operators A .

Wahrscheinlichkeit = Betragsquadrat

In diesem Unterabschnitt erleichtern wir uns das Leben ein wenig, indem wir nur Operatoren A zulassen, deren Eigenwerte a diskret liegen und nicht entartet sind. $A\varphi_a = a\varphi_a$ sei gelöst, alle a, φ_a also bekannt. Zu Wahrscheinlichkeiten beim Würfeln war in Kapitel 14 alles gesagt. Ist ein System in einem Eigenzustand $\psi = \varphi_a$ von A , dann wird a mit Wahrscheinlichkeit 1 gemessen. Interessanter ist der Fall $\psi \neq \varphi_a$ (ψ ist in keinem der φ_a). Bei Davisson-Germer wurden die Streifen auf der Platte dort besonders schwarz, wo besonders viel Wolke auftraf. Irgendwie sollte die Wahrscheinlichkeit für a damit zusammenhängen „wie viel Anteil“ ψ „in Richtung“ von φ_a hat. Anteil, Anteil — so könnte man bei einem Vektor $\vec{\psi}$ reden und seine Projektionen auf Basisvektoren meinen. Vielleicht sollten wir ψ entwickeln nach den (aufspannen durch die) A -Eigenfunktionen φ_a . Diese bilden, wie wir wissen, jedenfalls im Vektorfall

ein VONS. Die a -ten Koeffizienten einer solchen Entwicklung sind im allgemeinen komplex und darum nicht direkt mit der gesuchten Wahrscheinlichkeit P_a identifizierbar. Überdies muss die Summe über alle P_a eine 1 geben. Aber das Koeffizienten-Betragsquadrat hat eine Chance. Mal sehen:

$$\psi = \sum_a c_a \varphi_a \quad , \quad P_a = |c_a|^2 \quad . \quad (16.8)$$

Wenn wir im Funktionenraum ein Skalarprodukt „ \bullet “ definieren, mit diesem die Basis per $\varphi_b^* \bullet \varphi_a = \delta_{ba}$ orthonormieren (können) und auch den Systemzustand ψ gemäß $\psi^* \bullet \psi = 1$ normieren, dann funktioniert (16.8) tatsächlich, denn dann ist

$$1 = \psi^* \bullet \psi = \sum_{b,a} c_b^* c_a \varphi_b^* \bullet \varphi_a = \sum_a |c_a|^2 = \sum_a P_a \quad , \quad (16.9)$$

und der Interpretation von $|c_a|^2$ als Wahrscheinlichkeit, a zu erhalten, steht nichts im Wege. Ob auch die Natur mitspielt, das muss sich natürlich erst noch erweisen.

Experiment 3: ein Photon

Newton soll geglaubt haben, dass das Licht ein Strahl von kleinen Körnchen sei. Vermutlich hat man darüber im vorigen Jahrhundert gelächelt: „es ist doch ein Feld!“. Heute wissen wir, dass beide, Elektron und Photon, Feldklumpen sind, welche beim Messprozess Portionen-Charakter zeigen. Photon und Elektron sind nahe Verwandte.

Es ist etwas sehr Schönes, was die Quantenexperimente zutage gefördert haben: eine *unification*. Es gibt überhaupt nur Felder, Quantenfelder nämlich. Das Elektron kann am Zählrohr nur seine ganze Ladung $-e$ abgeben. Das Photon, eine elektromagnetische (e.m.) Welle mit Frequenz ω , kann am Zählrohr nur eine ganze Energieportion $\hbar\omega$ abgeben. Es ist nur eine Kuriosität der menschlichen Historie, dass wir von zwei extrem verschiedenen Seiten gekommen sind, bei Teilchen vom Körnchen-Glauben, beim Lichtquant von der klassischen Feldvorstellung.

Wir streifen diese Dinge hier nur kurz, weil man aufgrund der Polarisierung von e.m. Wellen die etwas waghalsige Erfindung (16.8) sehr schön experimentell bestätigen kann. Im Bild 16-4 läuft eine e.m. Welle nach rechts (x -Achse) auf ein Nicolsches Prisma zu. Sie ist in einer bestimmten Richtung \vec{e} polarisiert, was sich bestens experimentell so einrichten lässt. \vec{e} liegt in der yz -Ebene. Für Begrenzung der Welle in y - und z -Richtung sorgen geeignete Randbedingungen.

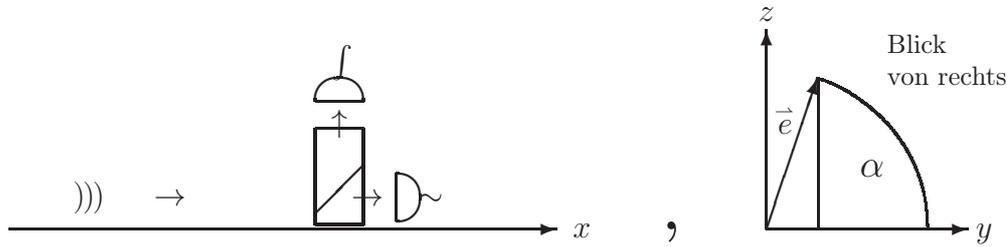


Bild 16-4. Ein Photon unter Antwort-Zwang

Das Prisma zerlegt in den in z -Richtung polarisierten und den in y -Richtung (d. h. senkrecht zur Bildebene) polarisierten Anteil. Der erstere geht durch, der zweite wird nach oben gelenkt. Die einlaufende Welle habe genau die Energie $\hbar\omega$ (Feld-Energie siehe Kapitel 11). Die unpässlich fragenden Subjekte sind *photo multiplier*, denn sie sind nur zufrieden, wenn sie die ganze Portion $\hbar\omega$ zu schlucken bekommen. Gibt nämlich der rechte Zähler ein Signal, dann tut es der obere nicht und umgekehrt.

Wie beim Davisson-Germer Experiment wird die Sache erst nach 500-facher Wiederholung spannend. Der Einheitsvektor $\vec{e} = (0, \cos(\alpha), \sin(\alpha))$ ist bekannt. Die Entwicklung (16.8) hat jetzt nur zwei Koeffizienten: $c_{\text{oben}} = \cos(\alpha)$ und $c_{\text{durch}} = \sin(\alpha)$. Nun raten Sie mal, wie der experimentelle Befund aussieht:

$$P_{\text{oben}} = \cos^2(\alpha) \quad , \quad P_{\text{durch}} = \sin^2(\alpha) \quad , \quad P_{\text{oben}} + P_{\text{durch}} = 1 \quad . \quad (16.10)$$

Perfekt! Zur Begründung von (16.8) lässt sich also das Verhalten von Photonen zu Rate ziehen. Allerdings haben dann die armen erstmals-Lernenden arg an der Ungeheuerlichkeit „Elektron ähnlich Photon“ zu kauen. Analoges gilt zu der Versuchung, mit der diskreten Spin-Variablen des Elektrons zu beginnen. Ja-ja, wir hadern mit der gängigen einführenden Literatur zur Quantenmechanik. Dort findet sich auch gern allerlei Philosophisches, Historisches und Pseudoanschauliches zur Unschärferelation. Wir kennen sie aus dem Fourier-Kapitel 12: $\Delta k \Delta x \geq \frac{1}{2}$. Na und? So wenig Bedeutung, wie diese Ungleichung innerhalb der Elektrodynamik hat, so wenig hat sie auch in der Teilchen-Feld-Dynamik.

„Herleitung“ der Schrödinger-Gleichung

Die Bewegungsgleichung der Quantenmechanik kann man natürlich nicht wirklich herleiten (woraus denn?). Aber es gibt einen heuristischen Weg, der einen wahren Erfinder vom Stuhl reißt. Wir reihen sechs Gedanken aneinander, und dann steht die Schrödinger-Gleichung auf dem Papier.

1. Die uns bekannten Bewegungsgleichungen für Felder (Diffusionsgleichung, zweite und vierte Maxwell-Gleichung) enthalten nur erste Zeitableitungen. Ist also zur Zeit $t = 0$ alles über einen Feldklumpen bekannt, dann liegt seine

Zukunft bereits fest. Eine Momentaufnahme genügt. Auch für ψ (eines Teilchens zunächst) soll derartige gelten. Also schreiben wir

$$\psi(\vec{r}, dt) = \psi(\vec{r}, 0) + dt \cdot \text{////} = \psi(\vec{r}, 0) + dt \mathcal{H} \psi(\vec{r}, 0) \quad (16.11)$$

auf. //// ist eine Funktion von \vec{r} , welche irgendwie aus $\psi(\vec{r}, 0)$ bestimmbar sein muss. Wir dürfen also rechts in (16.11) sagen, dass //// durch Anwendung eines Operators aus $\psi(\vec{r}, 0)$ hervorgehe. \mathcal{H} wirkt auf die \vec{r} -Abhängigkeit.

2. Aus der Interferenz von Anteilen ψ_1, ψ_2 eines Teilchenfeldes schließen wir, dass jeder Anteil seine eigene Zukunftsregie hat: $\psi_j(\vec{r}, dt) = \psi_j(\vec{r}, 0) + dt \mathcal{H} \psi_j(\vec{r}, 0)$ ($j = 1, 2$). Mit $\psi = \psi_1 + \psi_2$ hat also auch $\mathcal{H}\psi = \mathcal{H}\psi_1 + \mathcal{H}\psi_2$ zu gelten. \mathcal{H} muss folglich ein linearer Operator sein. In (16.11) schaffen wir den Term $\psi(\vec{r}, 0)$ nach links und teilen durch dt . Zwischenresultat:

$$i\hbar \dot{\psi} = \mathcal{H}\psi, \quad \mathcal{H} \text{ ist ein linearer Operator.} \quad (16.12)$$

ψ ist komplexwertig, das unbekannte \mathcal{H} ebenfalls. Also durften wir einen Faktor $i\hbar$ abspalten und dadurch den Operator \mathcal{H} ein wenig umdefinieren.

3. Auch die Antwort einer Bewegungsgleichung hängt von der Fragestellung ab. Angeregt durch unser H-Atom-Bild 16-2 (und wie schon bei der Diffusionsgleichung) fragen wir, ob (16.12) formstabile Lösungen erlaube, d. h. solche, die im Laufe der Zeit ihre \vec{r} -Abhängigkeit behalten. Wir setzen also an (**Separationsansatz**) — und in (16.12) ein —

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= \chi(t) \varphi(\vec{r}) \quad \leadsto \quad i\hbar \dot{\chi} \varphi = \chi \mathcal{H} \varphi, \quad \frac{i\hbar \dot{\chi}(t)}{\chi(t)} = \frac{\mathcal{H} \varphi(\vec{r})}{\varphi(\vec{r})} =: \mathcal{E} \\ i\hbar \dot{\chi} &= \mathcal{E} \chi \quad \left(\leadsto \chi = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{E} t} \right), \quad \mathcal{H} \varphi = \mathcal{E} \varphi. \end{aligned} \quad (16.13)$$

Die beiden Brüche in der oberen Zeile rechts zeigen, dass der linke Bruch (und ebenso der rechte) weder von \vec{r} noch von t abhängen kann (eine Folge der speziellen Fragestellung). Die Konstante wurde mit \mathcal{E} bezeichnet. Formstabile Lösungen gibt es, falls $\mathcal{H}\varphi = \mathcal{E}\varphi$ Lösungen hat.

4. Ein Quantensystem (in zeitunabhängigem Potenzial) strahlt solange Energie ab, bis es einschläft. In einem stationären Zustand höherer Energie (oben im Doppelbett) kann es zwar vergleichsweise lange verweilen. Dort befindet es sich aber nur in einem labilen Gleichgewicht (Sattel). Also schießen wir dem System von Zeit zu Zeit ein „schwarzes Stäubchen“ in die Nase, um es aufzuwecken.³ Nun ist sichergestellt, dass es den Grundzustand erreicht. Es muss wohl stets

³ Eine winzige Erschütterung genügt, um eine Ameise, die genau in der Mitte eines ideal glatten Sattels sitzt, ins Gleiten zu bringen. Die Erschütterung darf nicht gerade genau in Pferderücken-Richtung verlaufen: „schwarz“ heißt, alle Freiheitsgrade ansprechend. Wird auch das Strahlungsfeld quantisiert, dann sorgt dieses bereits für „spontane Emission“ — notfalls von Gravitationswellen (s.a. nächste Fußnote).

einen solchen energetisch tiefsten Zustand geben, denn sonst bräuchten wir keine Kraftwerke: ein Stäubchengewehr würde genügen. Der Grundzustand muss ein Eigenzustand zur Energie-Frage sein. Energie ist Messgröße, Observable, also entspricht ihr ein Operator. Er wird traditionell **Hamilton-Operator** genannt und mit H bezeichnet: $H\varphi_0 = E_0\varphi_0$. Weil Grundzustand liefernd, spielt H unter den Observablen eine besondere Rolle.

Der Grundzustand φ_0 strahlt nicht, ist formstabil und eine der Lösungen φ von (16.13). Weil mit Latein am Ende, blicken wir nun auf eine ganze Reihe weiterer Experimente mit dem Befund, dass ein System in *a l l e n* H -Eigenzuständen φ_n nicht-strahlend und formstabil ist.⁴ Mit $H\varphi_n = E_n\varphi_n$ gilt also auch $\mathcal{H}\varphi_n = \mathcal{E}_n\varphi_n$.⁵ Die Zuordnung E_n zu \mathcal{E}_n sollte unabhängig vom speziellen System sein (Prinzip der Einfachheit):

$$\mathcal{E}_n = \mathcal{E}(E_n) \quad , \quad \mathcal{H} = \mathcal{E}(H) = \sum_{\nu} \frac{1}{\nu!} \mathcal{E}^{(\nu)}(0) H^{\nu} \quad . \quad (16.14)$$

Die Taylor-Reihe zeige, wie man sich generell eine Funktion von einem Operator definiert.

5. Ein Quantensystem bestehe aus zwei weit entfernten Teilen, welche keine Notiz mehr voneinander nehmen. Dann ist einerseits $H = H_1 + H_2$ (H_1 wirke nur im linken Teil, H_2 nur im rechten). Andererseits muss auch der Form-Operator \mathcal{H} additiv zerfallen, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2$, und es folgt

$$\mathcal{E}(H_1 + H_2) = \mathcal{E}(H_1) + \mathcal{E}(H_2) \quad \curvearrowright \quad \mathcal{H} = \mathcal{E}(H) = \lambda \cdot H \quad . \quad (16.15)$$

6. Welchen Wert nun der in (16.15) verbliebene Zahlenfaktor λ hat, tschja, dazu müssen wir die Natur befragen. Sie ist ja eigentlich schon mannigfaltig befragt, nämlich in der klassischen Mechanik. Quantenmechanik muss Newton als Grenzfall enthalten. Wenn man die zugehörige Rechnung (siehe unten) unter Offenhalten des Zahlenwertes von λ durchführt, dann folgt $\lambda = 1$. Fertig:

$$i \hbar \dot{\psi} = H \psi \quad . \quad (16.16)$$

Die Fragen 2. und 3. aus (16.1) sind beantwortet. Damit ist die Erfindung im wesentlichen abgeschlossen. Das ist sie, die Quantenmechanik, siehe auch (16.6). Vielleicht erscheint sie vorerst noch als ein heilloses Durcheinander von Argumenten, Denkweisen und noch nicht im Detail untersuchten Formeln. Beispiele

⁴ Es ist so im Mechanik-Teil der Quantentheorie. Erst wenn man auch die e.m. Felder quantisiert, werden Übergänge zu tieferen φ_n möglich. Bei einem solchen Übergang geht es übrigens ganz gemächlich zu auf der Zeitachse. Das Märchen vom „Quantensprung“ ist eine weitere dieser gängigen Lügen.

⁵ Wie wir wissen, ist ein linearer Operator wohldefiniert, wenn bekannt ist, wie er auf alle Elemente eines VONS wirkt. Kennt man die \mathcal{E}_n , so kennt man \mathcal{H} . Dies war Vorgriff auf den Abschnitt zum Hilbert-Raum.

und Anwendungen fehlen. So kann das nicht bleiben. Als erstes nehmen wir diese 12 Seiten und schaffen sie zu einem Patentanwalt. Der nimmt den Auftrag an: nächste Woche wiederkommen. In welchen juristischen Jargon er die Sache dann übersetzt haben wird, das steht im Abschnitt Postulate.

Von den offengebliebenen Fragen notieren wir uns vorsichtshalber einige. Gibt es erlaubte/unerlaubte Operatoren? Wie ist das Skalarprodukt „ \bullet “ zu definieren? (siehe folgender Abschnitt). Bleibt die Norm $\psi^* \bullet \psi = 1$ im Laufe der Zeit erhalten? Wie sieht der Hamilton-Operator H für konkrete Systeme aus, wie der Operator des Ortes, des Impulses und überhaupt aller Observablen?

Auf eine spezielle Frage sei die Antwort sofort gegeben. Sie wird mitunter von Studenten geäußert, welche schon mittendrin stecken: woher ψ ? Woher bekommen wir die Anfangsbedingung $\psi(\vec{r}, 0)$, zu welcher dann die Bewegungsgleichung (16.16) alle Auskunft bereithält? Dazu denken wir an die Mechanik zurück: woher bekamen wir dort $\vec{r}(0)$ und $\dot{\vec{r}}(0)$, woraufhin dann Newton wusste, was er zu tun hat? Wir nehmen einen Massenpunkt zwischen die Finger, warten bis er sich ausgezappelt hat und werfen ihn (Kräfte von Finger auf Masse wirken lassend, d. h. Newton ausnutzend) bei $\vec{r}(0)$ mit $\dot{\vec{r}}(0)$ davon. Nun ist er im gewünschten Zustand gleichförmiger Bewegung. Völlig analog hierzu ist auch in der Quantenmechanik zu antworten:

Woher ψ ? — System aufstellen, warten bis es im Grundzustand ist, Potenziale so verändern, dass sich zu einem bestimmten Zeitpunkt t_1 aufgrund der Schrödinger-Gleichung ein gewünschter Zustand $\psi(t_1)$ ergibt. (16.17)

Ein Zustand ψ ist also *reproduzierbar* (wenigstens im Prinzip), d. h. beliebig oft erneut herstellbar. Sein Wahrscheinlichkeitsgehalt ist folglich messbar, ganz im Sinne von Kapitel 14. Übrigens ist der Informationsträger ψ auch aus Messungen *rekonstruierbar* (aus vielen und zu verschiedenen, ggf. nicht kommutierenden Operatoren). In mindestens diesem Sinne ist ψ „wirklich“, objektiv vorhanden, tatsächlich da — so wirklich wie ein elektromagnetisches Feld.

Der Hilbert-Raum

Dieser Abschnitt kann eventuell fürs erste übersprungen werden. Wir gönnen uns etwas Erholung vom ständigen Rätselraten über die Natur. Kennern der Teile I und II (Kapitel 1, 4, 12) sei die Freude bereitet, zu sehen, „wozu das damals alles gut war.“ Dass sich umgekehrt auch die mehr mathematischen Strukturen der Quantenmechanik bereits bei anderer Natur-Mathematik finden, ist weiter kein Wunder: es gibt nur eine.

Zu einem gegebenen Quantensystem bilden alle seine möglichen Zustände einen Raum. Er heißt Hilbert-Raum, kurz HR. Er hat Elemente (die Zustände eben), ein Skalarprodukt, eine Norm-Definition, und Operatoren rotieren (und

strecken) die Zustände in ihm. Der endlich-dimensionale HR ist nichts weiter als der bekannte Vektorraum, allerdings mit komplexwertigen Komponenten. Abgesehen von dieser Raffinesse ist lediglich Bekanntes über Vektoren und Matrizen zusammenzustellen. Danach lässt sich zwanglos alles Wesentliche in den unendlich-dimensionalen HR hinüberretten. Und das ist eine feine Sache.

Endlich viele Komponenten: diskreter Fall. Vektoren $\vec{\varphi}, \vec{\chi}, \vec{\psi}, \dots$ mögen n komplexe Komponenten haben. Damit das Skalarprodukt die reelle Norm als Spezialfall enthält, definieren wir es mit c.c.-Sternchen:

$$\vec{\varphi}^* \vec{\chi} := \sum_{j=1}^n \varphi_j^* \chi_j = \sum_{\sigma=1}^n \varphi^*(\sigma) \chi(\sigma) = \varphi^* \bullet \chi = \chi \bullet \varphi^* \quad , \quad (16.18)$$

wobei rechts aus dem Index ein Funktionsargument σ wurde (eine **diskrete Variable**) und daraufhin der Vektorpfeil entfallen konnte. Ansonsten ist es bei Funktionen ja üblich, sich das Argument nur zu denken. ψ heißt normiert genau dann, wenn $\psi^* \bullet \psi = 1$ ist. Ein Operator B heißt linear genau dann, wenn $B(\alpha\varphi + \beta\chi) = \alpha B\varphi + \beta B\chi$ gilt (für beliebige zwei Elemente φ, χ des HR). Folglich ist B , sofern linear, eine Matrix aus $n \times n$ komplexwertigen Elementen.

Als Observable können wir nur Matrizen A gebrauchen, deren Eigenwertgleichung $A\varphi = a\varphi$ nur reelle Eigenwerte a liefert und deren zugehörige Eigenfunktionen φ_a zu verschiedenen Eigenwerten a, b automatisch orthogonal sind (letzteres wegen (16.9)), somit ein VONS bilden. Wir unterstellen all dies und fragen danach, was dann die A 's wohl für Matrizen sein müssen. Man lese als eine einzige lange Zeile:

$$\begin{aligned} \varphi_b^* \bullet A\varphi_a &= \varphi_b^* \bullet a\varphi_a = a\delta_{ab} = (a\delta_{ab})^* = (b\delta_{ba})^* = (\varphi_a^* \bullet A\varphi_b)^* \\ &= ([A^T \varphi_a^*] \bullet \varphi_b)^* = \varphi_b^* \bullet A^{T*} \varphi_a \quad \curvearrowright \quad A \stackrel{!}{=} A^{T*} =: A^\dagger \quad . \end{aligned} \quad (16.19)$$

Und dazu sagt man, A sei **hermitesch**. Zuletzt hatten wir das linke mit dem rechten Ende der Gleichungskette verglichen und bemerkt, dass sie für alle a, b zu gelten hat (2 Operatoren sind gleich \iff sie bei Anwendung auf alle Elemente des Raumes gleiches geben. Bei linearen Operatoren genügt Basis). Der Kreuz-Index \dagger steht für T^* oder auch $*T$, denn Sternen und Transponieren sind vertauschbare Manipulationen. Ist eine Matrix B nicht hermitesch (d. h. $B \neq B^\dagger$), dann nennt man B^\dagger die hermitesch-adjungierte Matrix (oder den hermitesch-adjungierten Operator). In (16.19) haben wir den dicken Boller stehen gelassen, weil dann im Funktionenfall gar nichts mehr zu tun sein wird.

Der Rückschluss ist hübsch. Ist A hermitesch, dann folgen obige Voraussetzungen:

$$\begin{aligned} a \varphi_a^* \bullet \varphi_a &= \varphi_a^* \bullet A\varphi_a = (A^\dagger \varphi_a)^* \bullet \varphi_a = (A\varphi_a)^* \bullet \varphi_a = a^* \varphi_a^* \bullet \varphi_a \\ \curvearrowright \quad a \text{ ist reell} \quad , \quad 0 &= \varphi_b^* \bullet (A\varphi_a - a\varphi_a) = (b - a) (\varphi_b^* \bullet \varphi_a) \\ \curvearrowright \quad \text{bei } a \neq b \text{ sind die } \varphi\text{'s orthogonal} \quad . \end{aligned} \quad (16.20)$$

Bei $a = b$ sind die φ 's orthogonalisiert (wie in Kapitel 4, Abschnitt 4.3). Hiermit ist klar, dass die $\varphi_{a\nu}$ ein VONS bilden. „ON“ steht für die

$$\text{Orthonormierungsrelation :} \quad \varphi_{a\nu}^* \bullet \varphi_{b\mu} = \delta_{ab} \delta_{\nu\mu} . \quad (16.21)$$

Jede hermitesche Matrix A generiert eine (ihre) Basis des HR. Bezüglich einer Basis kann man entwickeln. Es gilt der

$$\text{Entwicklungssatz :} \quad \psi = \sum_{a\nu} c_{a\nu} \varphi_{a\nu} \quad \curvearrowright \quad c_{a\nu} = \varphi_{a\nu}^* \bullet \psi , \quad (16.22)$$

wobei wir ψ von links mit $\varphi_{a\nu}^*$ skalar multipliziert hatten. Hat ψ Norm 1, so hat auch der Satz der Koeffizienten die Norm 1:

$$1 = \psi^* \bullet \psi = \sum_{a\nu b\mu} c_{a\nu}^* c_{b\mu} \varphi_{a\nu}^* \bullet \varphi_{b\mu} = \sum_{a\nu} |c_{a\nu}|^2 . \quad (16.23)$$

Zur Orthonormierungsrelation (16.21) (Summe über Variable gibt Kronecker der Indizes) gibt es eine Art Umkehrung (Summe über Indizes gibt Kronecker der Variablen),

$$\psi(\sigma) = \sum_{a\nu} c_{a\nu} \varphi_{a\nu}(\sigma) = \sum_{\sigma'} \left[\sum_{a\nu} \varphi_{a\nu}^*(\sigma') \varphi_{a\nu}(\sigma) \right] \psi(\sigma') \quad \curvearrowright \quad [\quad] = \delta_{\sigma'\sigma} ,$$

d. h. die

$$\text{Vollständigkeitsrelation :} \quad \sum_{a\nu} \varphi_{a\nu}^*(\sigma') \varphi_{a\nu}(\sigma) = \delta_{\sigma'\sigma} . \quad (16.24)$$

Bis auf ein paar Sternchen war es wirklich nur Vektorrechnung. Das einfachste VONS ist $\varphi_a(\sigma) = \delta_{a\sigma}$ (das sind die \vec{e}_a ($a = 1, 2, 3$)). (16.21): $\varphi_a^* \bullet \varphi_b = \sum_{\sigma} \delta_{a\sigma} \delta_{b\sigma} = \delta_{ab}$ ($= \vec{e}_a \cdot \vec{e}_b$). (16.22): $\psi(\sigma) = \sum_a c_a \delta_{a\sigma}$ ($\vec{a} = a_j \vec{e}_j$). $\psi(\sigma) = \sum_a c'_a f_a(\sigma)$ ($\vec{a} = a'_j \vec{f}_j$). Ein Hilbert-Vektor h mit Komponenten $\psi(\sigma) =: \langle \sigma | h \rangle$ bezüglich der Kronecker-Basis hat also die Komponenten $c_{a\nu} =: \langle a\nu | h \rangle$ bezüglich der anderen Basis $\varphi_{a\nu}(\sigma) =: \langle \sigma | a\nu \rangle$. Mit diesen drei neckischen Definitionen kann $c_{a\nu} = \varphi_{a\nu}^* \bullet \psi$ (unüblich) recht elegant als $\langle a\nu | h \rangle = \langle a\nu | \sigma \rangle \langle \sigma | h \rangle$ (üblich) aufgeschrieben werden.

Unendlich viele Komponenten, kontinuierlich mit x nummeriert: Funktionen-Fall. Die Summe über diskrete Indizes ist durch ein Integral über x zu ersetzen. Der Produkt-Boller verweist jetzt auf ein voranzustellendes $\int dx$. Alle Boller-Gleichungen bleiben richtig. Übung: (16.18) bis (16.24) mit $\int dx$ und bollerfrei schreiben. Auch Matrix-Anwendung enthielt eine σ -Summe. Wenn man die Elemente einer Matrix A im kontinuierlichen Fall mit $K(x, y)$ bezeichnet, dann haben wir insgesamt

$$\varphi^* \bullet \chi = \int dx \varphi^*(x) \chi(x) , \quad A \psi = \int dy K(x, y) \psi(y) . \quad (16.25)$$

Wer $\langle x|\hat{A}|y\rangle$ statt $K(x, y)$ schreibt, behält den Bezug zu einem konkreten Operator im Auge („Dirac–Notation“, s.a. (16.28)). Zwei Umstände sind neu. Erstens müssen die Integrale in (16.25) existieren. Normierbarkeit ist jetzt eine echte Einschränkung. Die Vollständigkeitsrelation lautet nun

$$\sum_{a\nu} \varphi_{a\nu}^*(y) \varphi_{a\nu}(x) = \delta(y - x) . \quad (16.26)$$

Der Leser, welcher natürlich ein Analogdenker ist, möchte bitte (16.26) selbst herleiten. Zweitens können nun Eigenwerte und Entartungsindizes kontinuierlich liegen. Die entsprechende Summe ersetzt sich dann durch Integral — woraufhin für diesen Fall (16.26) noch einmal hergeleitet werde.

Im Funktionenfall ist $\delta(x - a)$ die triviale Basis (und a ihr Index). Zu dieser Basis gibt (16.22) $c_a = \psi(a)$. Und (16.21), (16.24) lauten $\int dx \delta(x - a) \delta(x - b) = \delta(a - b)$ bzw. $\int da \delta(x' - a) \delta(x - a) = \delta(x' - x)$.

Fertig. Ein Operator ist hermitesch genau dann, wenn sein Kern $K(x, y) = K(x, y)^{T*} = K(y, x)^*$ erfüllt. Seine Eigenfunktionen bilden ein VONS. Jeder lineare Operator hat seinen Kern. Der Kern von ∂_x ist $K(x, y) = \delta'(x - y)$. Der Kern des Translationsoperators T_a ist $K(x, y) = \delta(x + a - y)$. Der Kern des Paritätsoperators P ist $K(x, y) = \delta(x + y)$. Wie wirkt also P auf eine Funktion? Er dreht ihr im Argument das x -Vorzeichen um. Ist ∂_x hermitesch? Nein, denn beim Transponieren wechselt δ' das Vorzeichen (aber $i\partial_x$ ist hermitesch). Ist P hermitesch? Ja. Ist T_a hermitesch? Nein, aber $T_a + T_{-a}$ und $i(T_a - T_{-a})$ sind es. Woher nur kommt uns das alles so bekannt vor? Von der Fourier–Transformation (insbesondere Bild 12–5. (16.23) ist Parsevals Theorem (12.19), (12.25), (12.50)). Bemängelte doch ein Kritiker der ersten Auflage, sie enthalte keine Quantenmechanik. Nanu. Davon wimmelte es darin.

Letzte Frage: ein B mit bekannter Wirkungsweise ist gegeben, wie erhalte ich seinen Kern? Dann ist auch das Resultat $\chi_{a\nu}$ der B -Anwendung auf alle Elemente einer Basis $\varphi_{a\nu}$ bekannt:

$$\chi_{a\nu}(x) := B \varphi_{a\nu}(x) = \int dz K(x, z) \varphi_{a\nu}(z) .$$

Multiplizieren wir dies mit $\varphi_{a\nu}^*(y)$, summieren über a, ν und nutzen die Vollständigkeitsrelation aus, dann folgt

$$K(x, y) = \sum_{a\nu} \chi_{a\nu}(x) \varphi_{a\nu}^*(y) = \langle x|\hat{B}|a\nu\rangle \langle a\nu|y\rangle = \langle x|\hat{B}|y\rangle . \quad (16.27)$$

Mehr, als bisher vorkam, gibt es zur Dirac–Stenografie eigentlich gar nicht zu sagen:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{Index}}(\text{Variable}) &=: \left\langle \text{Variable} \left| \text{Index} := \begin{array}{l} \text{alle Angaben zur Spezifi-} \\ \text{kation des Zustandes } \psi \end{array} \right. \right\rangle \\ A \left\langle \text{Variable} \left| \text{Index} \right. \right\rangle &=: \left\langle \text{Variable} \left| \text{„abstrakter Operator“ } \hat{A} \left| \text{Index} \right. \right. \right\rangle \\ \text{und} \quad |any\rangle \langle any| &= 1 , \end{aligned} \quad (16.28)$$

wobei über *any* zu summieren (integrieren) ist.

Um auch die Spektraldarstellung eines hermiteschen Operators allgemein und abstrakt aufzuschreiben, gehen wir in (4.57), d. h. in $A = \sum_{\ell} \vec{f}_{\ell} \circ \lambda_{\ell} \vec{f}_{\ell}^*$, von ℓ zu a, ν über. λ_{ℓ} ist dann a . Also ergibt sich

$$\hat{A} = \sum_{a, \nu} |a\nu\rangle a \langle a\nu| \quad . \quad (16.29)$$

Man benutze die Dirac-Notation nur dann, wenn wirklich sinnvoll — und der Anschaulichkeit wegen so selten wie möglich: wir leben in 3D.

Sieben Postulate

I.

Die vollständige Information über ein Quantensystem ist in einer einwertigen Funktion $\psi(x, t) \in \mathbb{C}$ enthalten (der Informationsträger). x ist ein Satz von Variablen, je eine für jeden Freiheitsgrad. In der Regel darf man $x = 1, 2, \dots$ schreiben mit $1 :=$ Variablensatz des Teilchens 1 und so fort.

II.

Jeder Observablen ist ein linearer hermitescher Operator A zugeordnet. Eine Tabelle solcher Zuordnungen ist Bestandteil dieses Postulates:

klass. Größe	Name in der Q.	Buchstabe	Raum	Wirkungsweise
Ort (1D)	Ort	X	$\psi(x)$	$X = x$
Impuls (1D)	Impuls	p	$\psi(x)$	$p = \frac{\hbar}{i} \partial_x$
Impuls (3D)	Impuls	\vec{p}	$\psi(\vec{r})$	$\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$
Drehimpuls	Drehimpuls	\vec{L}	$\psi(\vec{r})$	$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla$
—	Parität (3D)	P	$\psi(\vec{r})$	$P \psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$
—	Spin (1. Komp.)	σ^x	2-komponentig	$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
Energie	Hamilton-Op.	H	z. B. : $\psi(\vec{r})$	z. B. : $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t)$
.
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

III.

Mögliche Messwerte sind die Eigenwerte von A , zu erhalten durch Lösen von $A\varphi_{a\nu} = a\varphi_{a\nu}$ unter Forderung nach Einwertigkeit (s. I.) und Normierbarkeit (s. IV).

(Warnung: nach einer Messung mit Resultat a ist das System im allgemeinen *n i c h t* im Zustand φ_a , siehe [Landau/Lifschitz, III], Abschnitt 7. Ausnahme ist Ortsmessung. Nebelkammerspuren gibt es.)

IV.

Man normiere die Eigenzustände von A gemäß

$$\int dx \varphi_{a\mu}^*(x) \varphi_{b\nu}(x) = \delta_{ab} \delta_{\mu\nu} \quad , \quad \delta(a-b) \delta_{\mu\nu} \quad ,$$

bzw. $\delta_{ab} \delta(\mu - \nu) \quad , \quad \delta(a-b) \delta(\mu - \nu) \quad ,$ (16.30)

je nachdem, ob ein Index in einem diskreten oder kontinuierlichen Bereich des A -Spektrums liegt. Den tatsächlichen Zustand ψ des Systems normiere man stets auf Eins:

$$\int dx |\psi(x)|^2 = 1 \quad . \quad (16.31)$$

Anmerkung: einem Deltafunktions-normierten Eigenzustand φ_a (a kontinuierlich) darf der Systemzustand ψ beliebig nahe kommen. Erst seine etwaige δ -Normierung würde mit (16.32) in Konflikt geraten (z. B. $P \sim |\delta|^2$ geben). (16.31) ist per Einbettung stets erreichbar, wie z. B. durch unendlich hohe Wände weit weg vom System.

V.

Die Wahrscheinlichkeit für Erhalt eines diskret liegenden Messwertes a und die Wahrscheinlichkeitsdichte für kontinuierlich liegende Messwerte a folgen der gleichen Formel

$$P(a, t) = \sum_{\nu} |c_{a\nu}|^2 = \sum_{\nu} \left| \int dx \varphi_{a\nu}^*(x) \psi(x, t) \right|^2 \quad . \quad (16.32)$$

Liegt ν kontinuierlich, so ist \sum_{ν} in (16.32) durch $\int d\nu$ zu ersetzen.

VI.

Die Bewegungsgleichung der Quantenmechanik ist

$$i \hbar \dot{\psi} = H \psi \quad , \quad \equiv (16.16)$$

wobei der Operator H der Tabelle in II. zu entnehmen ist. (16.16) gilt auch dann, wenn H von der Zeit abhängt (etwa wegen $V(\vec{r}, t)$, siehe Tabelle).

VII.

Pauli-Prinzip: Unter Vertauschung der Variablenätze zweier identischer Teilchen ist

$$\psi(1, 2, \dots) = \mp \psi(2, 1, \dots) \quad (16.33)$$

zu verlangen: negatives Vorzeichen für Fermionen, positives für Bosonen.

Beim ersten Überfliegen dessen, was der Anwalt hier geschneidert hat, sind wir recht zufrieden. Einige unserer Formulierungen waren offenbar bereits in Ordnung. Die Tabelle im Postulat II. antwortet auf eine unserer restlichen Fragen. Aber woher mögen die Details in die Tabelle gekommen sein. Sie gehen sicherlich auf erneute heuristische Überlegungen zurück (nächster Abschnitt). Es gibt Operatoren, welche kein klassisches Gegenstück haben. Wie schön, dass der Vektor-Fall (σ^x) dabei ist. In V. ist die Entartungsmöglichkeit berücksichtigt. Die Wahrscheinlichkeit, a zu erhalten, setzt sich additiv aus η Anteilen zusammen: richtig, gute Arbeit. Sind nämlich alle Eigenwerte a verschieden, gibt es keine \sum_ν . Rücken aber zwei a 's aufeinander, dann erhält man das kombinierte a mit Wahrscheinlichkeit = Summe der ehemaligen P 's.

Ob mit den Normierungen in IV. alles gut geht, wird noch zu studieren sein. Unsere Trennung (16.6) in zwei Strukturen ist nicht mehr zu sehen. Naja, das hat der Anwalt wohl nicht ganz verstanden. Aber das Postulat VII, was ist denn das? Hat er doch glatt (Frechheit!) bei einem gewissen Herrn Pauli angerufen. Hier sind garantiert noch einmal die Befunde von Experimenten im Spiel. Und aus der Realität rückschließen wollen Juristen meist leider nicht (teilbar mögen Gewalten sein, aber nicht Vernunft).

Wer erstmals die Maxwell-Gleichungen erblickt, der beginnt mit ersten kleinen Untersuchungen auf Stimmigkeit. So haben wir es in Kapitel 11 getan. Und so tun wir es jetzt mit den Postulaten.

1. Test: Zur Forderung nach Einwertigkeit in Postulat I. Wir lassen einen Operator vom Himmel fallen, $L_z := (\hbar/i)\partial_\varphi$ (φ = Polarwinkel, ein ebenes Ringelrum-Problem),⁶ und fragen nach seinen Eigenfunktionen $\chi(\varphi)$. Die Idee $\chi \sim e^{im\varphi}$ ($m \in \mathbb{C}$, unbekannt) liegt auf der Hand. Wenn der Winkel φ über 2π läuft, muss χ , falls einwertig, wieder die alten Werte ab $\varphi = 0$ annehmen. $e^0 \stackrel{!}{=} e^{im2\pi} \curvearrowright m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Der Drehimpuls $A = L_z$ hat ein diskretes Spektrum $a = \hbar m$ — aufgrund der Forderung nach Einwertigkeit.

2. Test: Zur Forderung nach Normierbarkeit in Postulat III. Der einfachste Hamilton-Operator aus Tabelle ist $H = -\partial_x^2$ (1D, $V = 0$, Vorfaktor 1 gesetzt). Ansatz $\varphi \sim e^{\lambda x}$ gibt $E = -\lambda^2$, aber das Normierungsintegral $\int dx e^{2\lambda x}$ existiert nicht für reelle λ . Also $\lambda = ik$, $\varphi \sim e^{ikx}$, $E = k^2$. Das kontinuierliche Spektrum eines freien Teilchens ist nach unten beschränkt (sonst könnten wir ja die Kraftwerke abschaffen).

3. Test: Die in (16.32) angegebene Wahrscheinlichkeit(sdichte) muss bei Über-

⁶ L_z ist die dritte Komponente des in der Tabelle angegebenen Drehimpulses, wenn man sie auf Polarkoordinaten umrechnet. Ist ein Elektron an einen Kreisring (R) gebunden, dann hat das System den Hamilton-Operator $H = L_z^2/(2\theta)$ und die Energie-Eigenwerte $E = \hbar^2 m^2/(2\theta)$.

summation (bzw. Integration) Eins geben. Wir üben den Fall kontinuierlicher a :

$$\begin{aligned} \int da P(a, t) &= \int da \sum_{\nu} \int dx dy \psi^*(x) \varphi_{a\nu}(x) \varphi_{a\nu}^*(y) \psi(y) = \int dx |\psi|^2 = 1. \quad (16.34) \\ &= \int da \sum_{\nu} \int db \sum_{\mu} c_{a\nu}^* c_{b\mu} \int dx \varphi_{a\nu}^*(x) \varphi_{b\mu}(x) = \int dx |\psi|^2 = 1. \end{aligned}$$

In der oberen Zeile wurde die Vollständigkeitsrelation benutzt. In der unteren Zeile sind wir von rechts nach links gegangen, haben ψ entwickelt und Ortho-normierung benutzt.

4. Test: Wie die Bewegungsgleichung dafür sorgt, dass die Norm (16.31) ein-
b l e i b t, wenn das System mit (16.16) allein und sich selbst überlassen ist:

$$\partial_t \int dx |\psi|^2 = \int dx (\dot{\psi}^* \psi + \psi^* \dot{\psi}) = \frac{1}{i\hbar} \int dx (-[H\psi]^* \psi + \psi^* H\psi) = 0, \quad (16.35)$$

weil H hermitesch ist.

5. Test: Phasenfaktoren. Eine bestimmte Frage wurde ständig verdrängt (es überläuft uns siedend heiß). Die Eigenwertgleichung $A\varphi_{a\nu} = a\varphi_{a\nu}$ lässt einen komplexwertigen Vorfaktor unbestimmt. Er darf sogar von der Zeit t abhängen (aber nicht von \vec{r} , weil A auf \vec{r} -Abhängigkeit wirkt). Die Normierung (16.30) legt aber nur dessen Betrag fest. Also darf man allen unseren $\varphi_{a\nu}$ einen beliebigen Faktor $e^{i\vartheta(t)}$ anhängen. Soso. Wehe, es hängen physikalische Aussagen von diesem Phasenfaktor ab. Die Koeffizienten $c_{a\nu}$ enthalten ihn, aber in Wahr-scheinlichkeiten (16.32) fällt er heraus: a 's ohne i , P 's ohne i . Na also! Bei Suche nach stationären Zuständen (wie in (16.13), aber zu $\mathcal{H} = H$) behält ψ den Vorfaktor $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$: auch dieser fällt in a, P heraus. Aber auch beim Lösen von $H\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$ bleibt etwas, nämlich ein konstanter Phasenfaktor. Jetzt haben wir wohl Farbe zu bekennen und zu sagen: Zustände, welche sich nur um einen konstanten Phasenfaktor unterscheiden, sind g l e i c h. Bei Rechnungen wähle man eine bestimmte Phase (und bleibe dann dabei).

Die wichtigsten Operatoren

Wir fallen noch einmal zurück in heuristische Betrachtungen (einmal mehr sol-che, wie sie in Lehrbüchern nur schwerlich zu finden sein dürften). Die Angaben in der Tabelle zu Postulat II. verlangen nach „Herleitung“.

Ort X (1D): Die Messwerte a des 1D Ortes sollten kontinuierlich auf der ganzen reellen Achse liegen (die Foto-„Linie“ fragt überall). Extreme Sicher-heit (a zu erhalten) sollte bei extremer Lokalisierung des Zustandes eintreten: $\varphi_a(x) = \delta(x - a)$ (bereits richtig normiert). Ein linearer Operator (hier X) liegt fest, wenn bekannt ist, wie er auf alle Elemente einer Basis wirkt, hier $X\delta(x - a) = a\delta(x - a)$. Und nun überintegrieren wir diese Gleichung mit

beliebigem Gewicht $\psi(a)$:

$$\int da \psi(a) X \delta(x-a) = \int da \psi(a) a \delta(x-a) \rightsquigarrow X \psi(x) = x \psi(x) . \quad (16.36)$$

Damit ist die Wirkungsweise von X erhalten worden (die Eigenwertgleichung ist hingegen $(x-a)\varphi_a(x) = 0$ und gibt $\varphi_a(x) = C \cdot \delta(x-a)$). Um die **Wahrscheinlichkeitsdichte für Ortsmessung** zu erhalten, bestücken wir (16.32) mit $\varphi_a(x) = \delta(x-a)$:

$$P(a) = \left| \int dx \delta(x-a) \psi(x) \right|^2 = |\psi(a)|^2 , \quad (16.37)$$

$$\rightsquigarrow \begin{array}{l} \text{die Wahrscheinlichkeit, ein} \\ \text{Teilchen in } (a, b) \text{ nachzuweisen} \end{array} = \int_a^b dx |\psi(x)|^2 .$$

Diese Weisheit (oft am Beginn anderer Abhandlungen stehend) haben wir uns hier eigentlich erst jetzt erarbeitet. Die Verallgemeinerung auf 3D ist harmlos und lautet: $\vec{R} \psi = \vec{r} \psi$, $P(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$ und $\varphi_{\vec{a}}(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{a})$.

Impuls p (1D) : Bei Deutung der linken Hälfte von Bild 16–3 (links vom Wellblech, links vom Doppelspalt) hatten wir uns durchgerungen bis zu Zuständen $\varphi_q(x) \sim e^{ikx}$, gehörig zu scharfem Impuls $q = \hbar k$ (wir schreiben q statt p , weil p für den gesuchten Operator vergeben ist). „Scharfer Impuls“, das heißt inzwischen, dass wir zu Eigenwert q die Eigenzustände kennen: $p e^{ikx} = \hbar k e^{ikx}$. Wie beim Ort ist nun nur noch geschickt überzuintegrieren, diesmal mit beliebiger Fourier-Transformierter :

$$\int \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k) p e^{ikx} = \int \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k) \hbar k e^{ikx} = \frac{\hbar}{i} \partial_x \int \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k) e^{ikx}$$

$$\rightsquigarrow p \psi(x) = \frac{\hbar}{i} \partial_x \psi(x) . \quad (16.38)$$

Da beliebig, kann man $\psi(x)$ beidseitig weglassen. Übrig bleibt die in der Tabelle angegebene Operator-Identität. Auf 3D umzusteigen, die Impuls-Eigenfunktionen richtig, nämlich auf $\delta(q' - q)$, zu normieren und die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(\vec{q})$ zu notieren, das erklären wir jetzt als außerhalb dieser Abhandlung liegend.

Potenzial $V(\vec{r})$: Das ist die Funktion eines Operators \vec{R} , in welcher bereits seine Wirkungsweise $\vec{R} = \vec{r}$ eingearbeitet wurde. Folglich hat V die Eigenfunktionen $\delta(\vec{r} - \vec{a})$ zu Eigenwerten $V(\vec{a})$. Der Operator V wirkt also auf beliebiges ψ , indem er es mit $V(\vec{r})$ multipliziert. Etwas billig, zugegeben, aber V wird allseits immer so stiefmütterlich behandelt.

Kinetische Energie T (1D) : Auch diese ist Funktion eines Operators, nämlich $p^2/(2m)$. Zumindest ist diese Sicht eine sehr nahe liegende Erfindung (er-neute Erinnerung an Davisson-Germer) :

$$T = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 , \quad \text{Eigenwerte} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} . \quad (16.39)$$

Der Buchstabe k rechts in (16.39) verweist natürlich darauf, dass er in den T -Eigenfunktionen per e^{ikx} als Zählindex verwendet wurde. T hat positiv-halbseitiges kontinuierliches Spektrum, in 3D ebenfalls. Zum Drehimpuls verweisen wir schlapp auf die Tabelle. Dass der Hamilton-Operator additiv aus T und V zusammengesetzt werden darf, das ist eigentlich eine erneute Mutprobe. Der Leser lasse sich Argumente einfallen. **DER Hamilton-Operator H** , mit welchem die gesamte nicht-relativistische Quantenmechanik auskommt (wozu „Quantisierungsregeln“, wenn sie nur eine einzige Anwendung haben?), enthält nicht nur $V = q\phi$ (in realitas sind die V 's so gut wie immer elektrostatische Potenziale), sondern auch das Vektorpotenzial \vec{A} eines Magnetfeldes.

Zitat :

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + q\phi(\vec{r}, t) . \quad (16.40)$$

Wie sich (16.40) herleitet steht u. a. in [Schulz, §§ 1.3 und 10.1]

Für Systeme mit mehreren Teilchen bekommt obiges H einen Teilchen-spezifischen Index (m, q, \vec{r} ebenfalls). Der Hamilton-Operator des gesamten Systems ist dann eine Summe solcher indizierter H 's plus Wechselwirkungs-Potenziale $V(i, j)$ zwischen den Teilchen. Aber „philosophisch“ ist solcherlei nichts Neues.

Grenzfall Newton

„Newton gilt (im Grenzfall) für die Mitte des Teilchens“, haben wir in Erinnerung. „Mitte“ dürfte mittlerer Ortsmesswert heißen. Zum mittleren Messwert a (an einem System im Zustand ψ , darum als Index angehängt) lässt sich eine sehr allgemeine Aussage gewinnen. Wir bedienen wieder den Fall kontinuierlich liegender a 's:

$$\begin{aligned} \langle a \rangle_\psi &= \int da \, a P(a, t) = \int da \sum_\nu \int dy dx \, \varphi_{a\nu}(y) \psi^*(y, t) \varphi_{a\nu}^*(x) A \psi(x, t) \\ &= \int dx \, \psi^*(x, t) A \psi(x, t) =: \langle A \rangle_\psi . \end{aligned} \quad (16.41)$$

Den reellen Faktor a hatten wir an $\varphi_{a\nu}^*$ geschoben, per $a\varphi_{a\nu}^* = (A\varphi_{a\nu})^*$ in A verwandelt und dann im x -Integral Hermitezität von A ausgenutzt. Das in der zweiten Zeile entstandene *sandwich* nennt man **Erwartungswert** von A . Der Index ψ wird meist weggelassen — aber wehe dem, der ihn dann nicht im Hinterkopf behält.

Die Zeit t war in (16.41) nur Parameter. Aber nun differenzieren wir danach, benutzen die Bewegungsgleichung und erhalten **Ehrenfests Theorem** :

$$\begin{aligned} \partial_t \langle A \rangle_\psi &= \int dx \, \dot{\psi}^* A \psi + \int dx \, \psi^* A \dot{\psi} + \int dx \, \psi^* \dot{A} \psi \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle HA - AH \rangle_\psi + \langle \dot{A} \rangle_\psi . \end{aligned} \quad (16.42)$$

Der letzte Term berücksichtigt den seltenen Fall, dass sich der Operator mit der Zeit ändert wie etwa $V(\vec{r}, t)$. Aber z. B. X weiß von t nichts: $\dot{X} = \dot{x} = 0$. Eine Operator-Kombination $AB - BA =: [A, B]$ nennt man **Kommutator**. Wer ihn umformt („ausrechnet“), denkt oder schreibt sich am besten ein allgemeines Element ψ des Raumes rechts daneben.

Und damit folgt nun Newton. Auf dass man mehr sieht, bleiben wir eindimensional und betrachten ein System mit $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(x)$. Etwas Rechnerei gibt die Kommutatoren $[H, x] = Hx - xH = \frac{\hbar}{im} p$ und $[H, p] = Hp - pH = i\hbar V'$. Und mit diesen kommen wir an bei

$$\begin{aligned} m \langle x \rangle^\bullet &= \frac{m\dot{i}}{\hbar} \langle Hx - xH \rangle = \langle p \rangle \\ m \langle x \rangle^{\bullet\bullet} &= \langle p \rangle^\bullet = \langle -V'(x) \rangle = \langle K(x) \rangle \neq K(\langle x \rangle) . \end{aligned} \quad (16.43)$$

Die Mitte ist $\langle x \rangle$. Newton für die Mitte hätte $m \langle x \rangle^{\bullet\bullet} = K(\langle x \rangle)$ bedeutet. Das ist nicht herausgekommen. Das Resultat (16.43) ist trotzdem wunderschön. Es zeigt, in welchem Grenzfall alles gut geht, nämlich im Lokalisierungs-Grenzfall: Breite Δx von ψ klein gegen Längen, auf welchen $K(x)$ merklich variiert. Es gibt einen gesunden Spezialfall, zu welchem das \neq Zeichen in (16.43) entfällt: der harmonische Oszillator hat $K(x) = -\kappa x$ und folglich $\langle -\kappa x \rangle = -\kappa \langle x \rangle$. Jaja, die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ treibt verrücktes Zeug, aber $\langle x \rangle$ schwingt eisern harmonisch hin und her.

Der Meilenstein (16.43) sollte unbedingt noch erreicht werden mit dieser „ersten Hälfte einer Einführung“. Es ist recht klar, was nun ansteht: Beispiele, Anwendungen, Erarbeitung und Ausarbeitung der gesamten zugehörigen Physik. Hannover (da ohne Hochenergie-Beschleuniger) ist ganz nicht-relativistisch quantenmechanisch (und quanten-statistisch). Aber ehe Hannover verstanden ist, da fließt noch viel Wasser die Leine hinab.



Als diese Seiten entstanden, war von vornherein an Leser mit sehr unterschiedlicher Vorbildung gedacht. Voraussetzung ist allemal ein brennendes Interesse daran, wie die Natur ist. Sehr verehrte Hausfrauen und Rentner, Ihnen waren die verschiedenen „Bilder“, die Umgangssprache und die Alltagsbezüge gewidmet. Mit Formeln wurde es eigentlich erst beim Hilbert-Raum schlimm und in den letzten beiden Abschnitten. Wem all dies gut verständlich war, der kann von hier aus eine rein quantenmechanisch begründete Statistische Physik [Schulz] in Angriff nehmen.

Ein Lehrer am Gymnasium wird sich in diesem Kapitel bestens zurechtfinden (falls etwa nicht: hinsetzen und arbeiten!). Vielleicht bringt es ihn auf Ideen für schöne w a h r e Märchen. Die jungen Leute sind gar nicht so. Sie wollen es wissen, möglichst sofort (so wie Unmögliches erledigt wird, Wunder dauern etwas länger).

Ein erstes Mal (Quantenphysik) gibt es auch beim Studium, da, wo sich die Geister scheiden.⁷ Nicht selten steigen die Studierenden leichten Fußes in Formalismen herum, rechnen alle Übungen, und alles scheint in Ordnung. Wirklich? Es gibt da jene wichtige (keineswegs boshaft gemeinte) Weisheit zum Studium: Was ich wirklich verstanden habe, das kann ich auch erklären, mir selbst, meiner kleinen Schwester (wenn sie will) und — und nun sind wir wieder bei den Hausfrauen.

W. Heisenberg [*Der Teil und das Ganze*,
(dtv Taschenbuch No. 903, 9. Aufl. München 1985)] :

... Einstein war dann etwas beunruhigt, aber schon am nächsten Morgen hatte er beim Frühstück ein neues Gedankenexperiment bereit, komplizierter als das Vorhergehende, das nun die Ungültigkeit der Unbestimmtheitsrelation wirklich demonstrieren sollte. Diesem Versuch ging es freilich am Abend nicht besser als dem ersten, und nachdem dieses Spiel einige Tage fortgesetzt worden war, sagte Einsteins Freund Paul Ehrenfest, Physiker aus Leyden in Holland: „Einstein, ich schäme mich für dich; denn du argumentierst gegen die neue Quantentheorie jetzt genauso, wie deine Gegner gegen die Relativitätstheorie.“ Aber auch diese freundschaftliche Mahnung konnte Einstein nicht überzeugen.

Wieder wurde mir klar, wie unendlich schwer es ist, die Vorstellungen aufzugeben, die bisher für uns die Grundlage des Denkens und der wissenschaftlichen Arbeit gebildet haben. Einstein hatte seine Lebensarbeit daran gesetzt, jene objektive Welt der physikalischen Vorgänge zu erforschen, die dort draußen in Raum und Zeit, unabhängig von uns, nach festen Gesetzen abläuft. Die mathematischen Symbole der theoretischen Physik sollten diese objektive Welt abbilden und damit Voraussagen über ihr zukünftiges Verhalten ermöglichen. Nun wurde behauptet, dass es, wenn man bis zu den Atomen hinabsteigt, eine solche objektive Welt in Raum und Zeit gar nicht gibt und dass die mathematischen Symbole der theoretischen Physik nur das Mögliche, nicht das Faktische, abbilden. Einstein war nicht bereit, sich — wie er es empfand — den Boden unter den Füßen wegziehen zu lassen. Auch später im Leben, als die Quantentheorie längst zu einem festen Bestandteil der Physik geworden war, hat Einstein seinen Standpunkt nicht ändern können. Er wollte die Quantentheorie zwar als eine vorübergehende, aber nicht endgültige Klärung der atomaren Erscheinungen gelten lassen. „Gott würfeln nicht“, das war ein Grundsatz, der für Einstein unerschütterlich feststand, an dem er nicht rütteln lassen wollte. Bohr konnte darauf nur antworten: „Aber es kann doch nicht unsere Aufgabe sein, Gott vorzuschreiben, wie Er die Welt regieren soll.“

R. Penrose [*Computerdenken* (Originaltitel *The Emperor's New Mind*),
(Spektrum-Verlag Heidelberg 1991, § 6)] :

Wenn wir ψ als Beschreibung der „Wirklichkeit“ auffassen, zeigt sich nichts von dem Indeterminismus, der angeblich ein Wesenszug der Quantentheorie ist – solange ψ der deterministischen Schrödinger-Entwicklung gehorcht. Diesen Entwicklungsvorgang wollen wir **U** nennen. Doch jedes Mal, wenn wir „eine Messung ausführen“ und Quanteneffekte auf die klassische Ebene vergrößern, ändern wir die Regeln. Dann verwenden wir *nicht* **U**, sondern wenden stattdessen

⁷ Literatur gibt es zur Quantenmechanik wie Sand am Meer. [Landau/Lifschitz, III] ist für Beginner wohl zu schwer. Eine hübsch kurze Einführung (S.412–432) geben [Margenau/Murphy] in Bd. I. Alt geworden, aber gut geblieben ist [Schiff], *quantum mechanics*. Es solle aber nicht Englisch sein: [Schwabl, 1] oder (etwas älter) [Becker/Sauter, II]. — „Aber das ist doch eine *Theorie der Elektrizität* ?!“ — Sehr wohl, und im Band II wird die Sache richtig gemacht mit den Elektronen, welche sich (a) quantenmechanisch verhalten und (b) die Coulomb-Wechselwirkung im Hamilton-Operator stehen haben.

ein völlig anderes Verfahren an, das ich **R** nenne: Wir bilden Absolutquadrate von Quantenamplituden, um klassische Wahrscheinlichkeiten zu erhalten! Es ist somit *ausschließlich* das Verfahren **R**, welches Unbestimmtheiten und Wahrscheinlichkeiten in die Quantentheorie einführt.

Der deterministische Prozess **U** scheint derjenige Teil der Quantentheorie zu sein, der die Physiker bei ihrer Arbeit vor allem interessiert; doch die Philosophen sind mehr von **R** fasziniert, der nicht-deterministischen *Reduktion des Zustandsvektors* (oder, wie man manchmal anschaulicher sagt, vom *Kollaps der Wellenfunktion*). Ob wir nun **R** einfach als eine Veränderung des zugänglichen „Wissens“ über ein System betrachten oder (wie ich) als etwas „Wirkliches“ – in jedem Fall stehen wir vor zwei völlig *verschiedenen* mathematischen Methoden, die zeitliche Veränderung des Zustandsvektors eines physikalischen Systems zu beschreiben. Denn **U** ist vollkommen deterministisch, während **R** ein Wahrscheinlichkeitsgesetz ist; **U** erhält die komplexzahlige Quantenüberlagerung aufrecht, aber **R** verletzt sie krass; **U** wirkt auf kontinuierliche Weise, aber **R** ist geradezu skandalös diskontinuierlich. Aus den Standardverfahren der Quantenmechanik geht überhaupt nicht hervor, wie **R** etwa als ein komplizierter Einzelfall von **U** „herzuleiten“ wäre. Es handelt sich einfach um ein von **U** verschiedenes Verfahren, das die andere „Hälfte“ der Interpretation für den Quantenformalismus liefert. Der gesamte Nicht-Determinismus der Theorie stammt von **R** und nicht von **U**. *Sowohl U als auch R* sind für all die wunderbaren Übereinstimmungen erforderlich, welche die Quantentheorie mit den Beobachtungstatsachen aufweist.

M. Tegmark und J. A. Wheeler [*100 Jahre Quantentheorie*,
(in *Spektrum der Wissenschaft*, April 2001)]:

... rechtfertigen diese Schlussfolgerungen die seit langem geübte Praxis, das Lehrbuch-Postulat vom Kollaps der Wellenfunktion als pragmatisches Rezept – nach der Devise „Halt den Mund und rechne“ – zu benutzen: berechne Wahrscheinlichkeiten so, als würde die Wellenfunktion kollabieren, wenn das Objekt beobachtet wird. Oblgleich von Everetts Standpunkt aus die Wellenfunktion streng genommen niemals kollabiert, stimmen die Dekohärenz-Forscher im Allgemeinen darin überein, dass die Dekohärenz eine Wirkung hat, die einem Kollaps zum Verwechseln ähnlich sieht.

... es an der Zeit ist, die Lehrbücher der Quantenmechanik zu aktualisieren. Obwohl diese Bücher in einem der ersten Kapitel unweigerlich den nicht-unitären Kollaps als fundamentales Postulat anführen, zeigt die Umfrage, dass heute viele Physiker – zumindest auf dem brandneuen Gebiet der Quantencomputer – dieses Postulat nicht mehr ernst nehmen. Der Begriff Kollaps wird zweifellos seinen Nutzen als Rechenrezept behalten. Aber ein warnender Kommentar, der verdeutlicht, dass es sich dabei wahrscheinlich nicht um einen fundamentalen Vorgang handelt, der die Schrödinger-Gleichung verletzt, könnte klugen Studenten stundenlanges Grübeln ersparen.