

Universität

Potsdam



series of un-authorized lecture notes
volume 6

theoretische physik III

Quantenmechanik I

martin wilkens



Inhalt

I	Vorkurs	17
1	Quantenhypothesen	19
1.1	Übersicht	19
1.2	Die Geburt von \hbar	22
1.3	Bohrsches Atommodell	27
1.4	Wellenmechanik	30
1.5	Matrizenmechanik	32
1.6	Ausblick – das Gerüst der Quantentheorie	38
2	Wahrscheinlichkeit	41
2.1	W'keitsraum	41
2.2	Binomialverteilung	45

II	Hauptkurs	49
1	Die ψ-Funktion des Massepunktes	51
1.1	Definition Massepunkt	51
1.2	Zustandspostulat und Superpositionsprinzip	52
1.3	Schrödingergleichung des freien Teilchens	56
1.4	Impulsdarstellung	58
1.5	Freie Wellenpakete zerfließen	60
2	Die ψ-Funktion in der Energiedarstellung	65
2.1	Zeitentwicklungspostulat und Hamiltonoperator	65
2.2	Kontinuitätsgleichung und W'keitserhaltung	67
2.3	Der Massepunkt im unendlich tiefen Potentialtopf	68
2.4	Mathematischer Exkurs: Hilbertraum	72
2.5	...und Operatoren	75
3	Observable und Messprozess	87
3.1	Operatoren und Korrespondenzprinzip	87
3.2	Observablenpostulat und Messprozess	91
3.3	Unschärferelation	93
3.4	...and their (mis)interpretations	95
3.5	Kompatible Observable	97

3.6	Übung: Ehrenfest'sches Theorem	98
3.7	Übung: Der Massepunkt im konstanten Kraftfeld	100
4	1D Potentialprobleme	103
4.1	Gebundene und Streuzustände	103
4.2	Streuung an der Potentialstufe	104
4.3	Allgemeine Eigenschaften der S-Matrix	109
4.4	Ergänzung: Wronski and all that	114
5	Harmonischer Oszillator	139
5.1	Erzeuger und Vernichter	139
5.2	Spektrum	140
5.3	Ergänzung: Sturm-Liouville	144
5.4	Übungen	146
5.5	Ergänzung: Bras and Kets and Rock'n Roll	153
6	Drehimpuls	159
6.1	Bahndrehimpuls und Korrespondenzprinzip	159
6.2	Drehimpuls algebraisch	160
6.3	Bahndrehimpuls in Kugelkoordinaten	165
6.4	Ergänzung: Legendre-Polynome und zugeordnete Legendrefunktionen	172

7	Das Coulombproblem	177
7.1	Skalenhierarchie	178
7.2	Differentialgleichung	180
7.3	Verwandte Zwei-Teilchen Probleme	185
7.4	Ergänzung: Laguerrsche Polynome	188
8	Elektromagnetische Wechselwirkung	195
8.1	Minimale Kopplung	195
8.2	Eichinvarianz	198
8.3	Ergänzung: Aharonov-Bohm Effekt	203
8.4	Ergänzung: Diracs Monopol und die Quantisierung der elektrischen Ladung	203
8.5	Übung: Normaler Zeemaneffekt	206
8.6	Übung: Quanten-Hall Effekt	207
9	Spin und Drehimpuls	209
9.1	Spin- $\frac{1}{2}$	210
9.2	Magnetsische Moment und Spinpräzession	211
9.3	Spinresonanz – Nutation	213
9.4	Stern-Gerlach Effekt	216
9.5	Pauligleichung	218

10 Drehungen	221
10.1 Bahndrehimpuls und Drehungen	221
10.2 Skalar, Vektor, Tensor	224
10.3 Spin und Drehungen	226
10.4 Ergänzung: Drehungen im Raum	229
10.4.1 Die Drehgruppe	230
10.4.2 Eine dreidimensionale Darstellung der Drehgruppe und die $SO(3)$	232
10.4.3 Eulerwinkel	236
10.4.4 Infinitesimale Drehungen und Liealgebra $so(3)$	238
10.5 Erinnerung: Starrer Körper	240
10.6 Ergänzung: Der quantenmechanische starre Körper	242
10.7 Anwendung: Der quantenmechanische Kreisel	247
10.8 Endliche Drehungen und $D^j(\alpha\beta\gamma)_{m'}^m$	248
11 Addition von Drehimpulsen	251
11.1 Gesamtdrehimpuls	251
11.2 Addition zweier Spin-1/2	252
11.3 Clebsch-Gordan and all that	254
11.4 Übung: Addition Bahndrehimpuls und Spin-1/2	257
12 Stationäre Störungstheorie	259

12.1 Nichtentartetes Niveau	260
12.2 Quadratischer Stark-Effekt	263
12.3 Entartetes Niveau	264
12.4 Linearer Stark-Effekt	265
12.5 Ergänzung: Variationsmethoden, WKB	266
12.6 Übung: Das H_2^+ -Molekül	268
13 Elemente der Atomphysik	273
13.1 Feinstruktur	274
13.2 Hyperfeinstruktur	279
13.3 Anormaler Zeemaneffekt	281
13.4 Übung: Paschen-Back Effekt	282
14 Mehrteilchensysteme	285
14.1 Zusammengesetzte Systeme	285
14.2 Gleichartige Teilchen	287
14.3 Identische Teilchen	289
14.4 Symmetrisierungspostulat	292
14.5 Spin-Statistik Theorem und Pauli-Verbot	294
14.6 Besetzungszahldarstellung	296
14.7 Fermikugel	298

14.8 Bose-Kondensat	301
15 Dynamik	303
15.1 Heisenbergbild	303
15.2 Zeitabhängige Störungen – Wechselwirkungsbild	306
15.3 Emission und Absorption	310
15.4 Fermis Goldene Regel	313
15.5 Ergänzung: Streuquerschnitt in Bornscher Näherung	315
16 EPR Paradoxon und Bellsche Ungleichungen	317
16.1 EPR	319
16.2 Bellsche Ungleichungen	323

Vorwort

Vorgelegt werden hier Notizen zur Vorlesung “Quantenmechanik I” die als Kursvorlesung “Theoretische Physik III” mit einem Umfang von 4SWS (+2SWS Übungen) in Potsdam im 4. Semester angeboten wird.

Die Notizen spiegeln den Gang der Vorlesung wieder. An manchen Stellen sind sie ausführlicher, anderes ist in die Übungen verwiesen.

Die Vorlesung folgt der Standard-Route “Wellenmechanik - Quantenmechanik”. Verglichen mit der Alternativ-Route über Polarisation (bzw. Spin-1/2) und endliche Hilberträume müssen auf dieser Route gleich zu Beginn unbeschränkte Operatoren und kontinuierliche Spektralscharen eingeführt werden. Dieser Kulturschock wird meiner Erfahrung nach jedoch besser abgefangen als manche glauben.

Der Vorlesung ist ein sog Vorkurs vorgeschaltet. Thema im Vorkurs sind eine historische Überblick, ein paar erläuternde Bemerkungen zur Wahrscheinlichkeitstheorie und – falls ich mich nicht verplappere – partielle Differentialgleichungen, Fourieranalyse und was man so braucht. Man sollte der Kursvorlesung aber auch folgen können wenn man den Vorkurs schwänzt



Die Notizen erheben keinerlei Anspruch auf Originalität. Lehrbücher zur Quantenmechanik gibt es zuhauf, mehr als etwa zur klassischen Mechanik

oder zur Elektrodynamik. Eine kurze kommentierte Auswahl:

Standardtänze – zumindest einen sollte man beherrschen ...

- Messiah QM I und QM II. Der Klassiker der 70'er. Nach wie vor empfehlenswert.
- Schwabl QM I und QM II. Bei Springer neu aufgelegt. Solide. Empfehlenswert.
- Rollnik QT I und QT II. Bei Springer neu aufgelegt. Wie Schwabl, aber etwas moderner. Eingeschränkt empfehlenswert.
- Cohen-Tannoudji et al. QM I und II. Etwas ungewöhnliche Darstellung mit Hauptteilen, Komplementen (Ergänzungen), Anhängen, Übungen zum Hauptteil, Übungen zum Komplement, Lösung von Übungen, Aufgrund seines Umfangs sehr beliebt ("So dick? Da muss doch wohl alles drin sein ..."). Etwas non-chalant bei der Mathematik. Eingeschränkt empfehlenswert.
- Basdevant & Dalibard QM. Beaucoup discursive, beaucoup originale, tres Francais. Die beste Auswahl von Kopfnoten (Zitaten), die ich kenne. Schön ergänzt um ein weiteres Buch *The Quantum Mechanics Solver – How to Apply Quantum Theory to Modern Physics*. Wer hier bohrt, kann unter Umständen für die Übungsaufgaben profitieren ...
- Galindo Pascual QM I und QM II. Für Aficionados einer mathematisch formulierten QM die noch vor der vollen Dröhnung (Thirring) zurückschrecken, sich aber trotzdem für die filigranen Feinheiten der Funktionalanalysis begeistern können. Bei meinen Mitarbeitern und Kollegen aus der Theorie sehr geschätzt.

Reihen gibt es viele. Manche so, manche la la ...

- Greiner. Kommt mit zahlreichen durchgerechneten Aufgaben ergänzt um historischen Anmerkungen zu den Gründervätern der QM. Mütter scheint sie leider nicht gehabt zu haben ...
- Noltig. Wie Greiner, ergänzt durch zahlreichen Verständnisfragen.
- Fließbach. Etwas dünner als Greiner oder Noltig. Nebenfachstudenten mit Hauptfach Mathematik sollten hier die Finger von lassen ... oder gerade nicht.
- Scheck. Formal ambitioniert, zwar nicht wirklich erhellend, trotzdem ok. Ärgerlich (dafür kann der Autor nichts) sind die matschigen Halbtonboxen und ähnlicher didaktischer Krimskrums, der nur das Auge (und den Verstand) beleidigt. Springer will halt "modern wirken". Immerhin nicht ganz so schlimm wie Wiley-VCH ...

Unikate sind eine Bereicherung. Ohne Sie wäre die Welt ärmer ...

- Sakurai *Modern Quantum Mechanics*. Unorthodoxer Aufbau; beginnt mit Polarisation von Licht/Photonen bzw. Spin-1/2. Erfrischend. Sein Umgang mit Dirac's Bra-Ket Formalismus ist allerdings ein Alptraum.
- Leisi *Quantenmechanik*, gerade bei Springer erschienen. Ehrenwerter Versuch, den Stoff der Theoretischen Physik und Experimentalphysik zu integrieren. Da keinerlei roter Faden erkennbar leider grandios gescheitert. Trotzdem – Chapeau! Lieber groß scheitern als klein durchkommen :-)
- Thirring *Quantum Mathematical Physics*. Nur was für Junkies. Konzentrierter Stoff allererster Sahne. Kann erst im dritten Durchgang voll genossen werden. Und das auch nur in homöopathischen Dosen ...
- Landau-Lifschitz, Bd III (Quantenmechanik). Der Goethe unter den Lehrbüchern. Das einzige Werk zur QM das kein einziges mal den Begriff "Hilbertraum" erwähnt.

- Ludwig *Einführung in die Grundlagen der Theoretischen Physik III*. Der Hegel unter den Lehrbüchern. Vielschichtig, zuweilen etwas verschwurbelt (jedes dritte Wort erscheint in Anführungszeichen). Bemüht sich um wissenschaftstheoretische Begriffsanalyse bei gleichzeitiger Abhandlung der Quantenmechanik. Stark gewöhnungsbedürftig, allerdings für einen zweiten Durchgang durchaus empfehlenswert. Skandalös ist das Fehlen eines Schlagwortregisters.

Favoriten sind nicht unbedingt für die Vorlesung geeignet, haben bei mir aber einen Ehrenplatz auf dem Regal . . .

- Haake “Einführung in die Theoretische Physik”. Enthält eine Kurzfassung der QM (<100 Seiten) die von allen Kurzfassungen die Beste ist. Verzichtet weitgehend auf mathematischen Rahmen, ohne ungenau zu sein. Eignet sich hervorragend für einen ersten Durchgang. Der Autor behauptet für Lehramtskandidaten geschrieben zu haben. So wünscht man sich die LehrerInnen seiner Töchter! Beim Verlag leider vergriffen. Liegt aber als gezipptes .ps auf http://www.theo-phys.uni-essen.de/tp/ags/haake_dir/h
- Keith Hannabuss “Introduction to Quantum Theory”. Kurz und bündig. Dabei umfassend und präzise. Sehr Empfehlenswert.
- Leslie Ballentine. Rigoros ohne unlesbar zu sein. Ein Kreuzritter der “Ensemble-Interpretation”. Prentice Hall, bei World-Scientific neu aufgelegt. Empfehlenswert.
- Feynman Band III (QM). Für alle, die mit der Mathematik auf Kriegsfuß stehen, wird hier ein guter Einstieg vermittelt. Trotzdem – intellektuell anspruchsvoll, bloß nicht unterschätzen! Autor der sprichwörtlichen Zeile, wonach das Phänomen der Beugung am Doppelspalt “in sich den Kern der Quantenmechanik birgt. In Wirklichkeit enthält es das *einzig*e Geheimnis”.

- Straumann. Mathematisch orientiert aber nicht übermäßig pretentiös. Schweizer Präzisionsarbeit. Enthält die beste Zusammenfassung und Würdigung der Planck'schen Arbeiten. die ich kenne.
- Gernot Münster *Quantentheorie*, de Gruyter (2006). Enthebt mich der Pflicht, mein Vorlesungsskript ordentlich ins Netz zu stellen. Ergänzt um ein weiterführendes Lehrbuch (etwa Schwabl) hätte man alles was man braucht.
- Silvia Arroyo Camejo *Skurrile Quantenwelt*. Populärwissenschaftlich gehaltene Auseinandersetzung mit der QM. Gerade bei Springer erschienen. Hinreißend. Frau Arroyo Camjo ist die wohl jüngste Autorin, die sich an die QM gewagt hat. Sie studiert Physik an der HU Berlin – im Grundstudium. Mit ihrem klaren Bekenntnis zur Mathematik hebt sie sich von anderen populärwissenschaftlichen Darstellungen der QM wohltuend ab.

Russen haben viele Lehrbücher verfasst, nicht nur LL ...

- Blochinzew.
- Davydov.

Schliesslich sei auf das WWW hingewiesen, das eine Unzahl ausgearbeiteter Vorlesungsnotizen (wie diese) bereit hält. Darunter gibt es wahre Horrorszenarien (URL hab' ich zum Glück vergessen), und wahre Perlen (beispielsweise das Skriptum von R.F. Werner, Univ. Braunschweig).

Ach ja – die Mathematik. Da empfehle ich die Lehrbücher von Klaus Jänich. Wärms- tens. Die sind nämlich genau richtig. Und für die Funktionalanalysis das einschlägige Lehrbuch von Siegfried Grossmann.

Zu guter Letzt – Philosophie. Gehört ja eigentlich mit zur Grundausbildung ei- ner Physikers. Vielleicht Poppers' *Logik der Forschung* – auch wenn der heutzutage

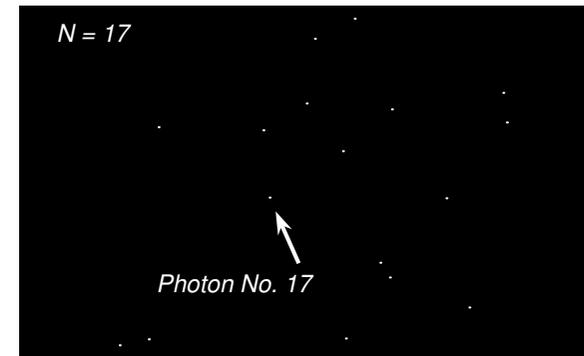
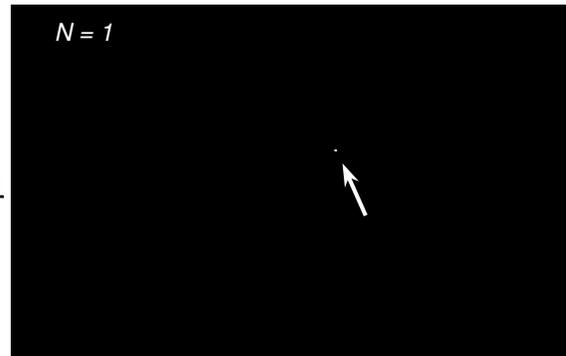
etwas aus der Mode ist. Oder – als Gegendroge – Feyerabend *Probleme des Empirismus*. Meine Empfehlung: Henning Genz *Wie die Naturgesetze Wirklichkeit schaffen – Über Physik und Realität*, Hanser (2002). Noch besser: ein Seminar in der Philosophischen Fakultät zur Erkenntnis- und Wissenschaftstheorie . . .

Teil I

Vorkurs

Kapitel 1

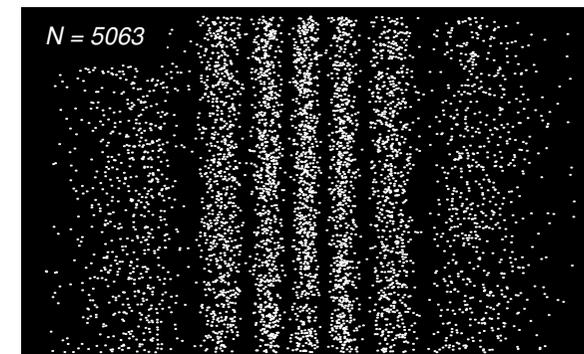
Quantenhypothesen

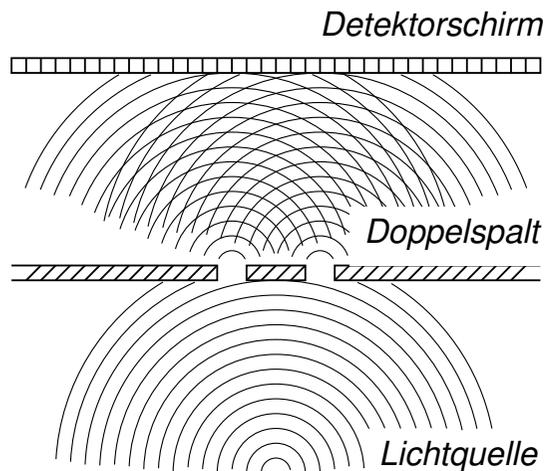
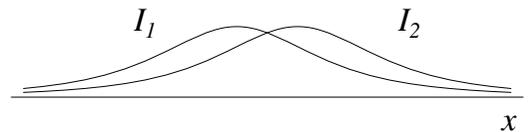
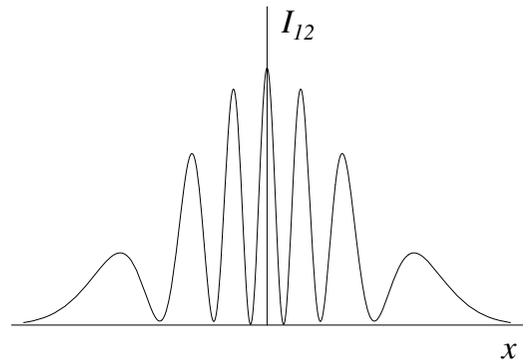


1.1 Übersicht

Die Quantenmechanik entstand als man Anfang des 20 Jhdts experimentell in Bereiche vorstieß, deren Längen-, Energie- und andere -Skalen sich nicht nur einer unmittelbaren Anschauung entzogen – das taten die meisten Experimente des 19Jhdts auch – sondern sich darüberhinaus selbst gegenüber den schon damals hoch-artifiziellen Erklärungsmustern und Begriffssystemen der Physik als resistent erwiesen: kleine Sachen verhielten sich irgendwie nicht so, wie man es aufgrund einer gedanklichen Verkleinerung großer Sachen erwartet hätte.

Insbesondere wiesen Dinge, die man eigentlich für Teilchen bzw Teilchenschwärme hielt, unter bestimmten Bedingungen Eigenschaften auf, die man eher bei Wellen





vermutet hätte (Interferenz, Beugung) während sie sich unter anderen Bedingungen genauso verhielten, wie man es von einem Teilchenschwarm gewohnt war. Auch Licht gab unter bestimmten Bedingungen zu Erscheinungen Anlass, die besser mit einem Teilchenschwarm zu erklären waren (Hohlraumstrahlung, Photoeffekt), unter anderen Bedingungen aber weiterhin hervorragend zu einer Wellenvorstellung passten.

Da nun aber “Welle” und “Teilchen” sich einander ausschließende Begriffe sind geriet mit diesen Befunden die ganze schöne Einteilung physikalischer Gegenstände in “Welle” und “Teilchen” in eine gewisse Unordnung.

Teilchen	Welle
lokalisiert auf Bahn	ausgedehnt in Raum und Zeit
unteilbar	teilbar
Ort und Impuls	Amplitude und Phase

Als besonders irritierend erwies sich dabei die Tatsache, dass individuelle Messergebnisse an kleinen Dingen nicht immer reproduzierbar waren, sondern von Zufallselementen beeinflusst schienen, die selbst unter Bedingungen höchster Präzision nicht elimierbar waren. Beispielsweise ist es schlicht unmöglich, beim Photoelektrischen Effekt vorauszusagen, wann das nächste Elektron herausgeschlagen wird.

Es folgte eine intensive Debatte, bei der die Physik erstmals auch die Beziehung von Experiment und Theorie genauer unter die Lupe nahm: wenn denn das Elektron ein Teilchen ist, wie können wir uns von seiner Bahn vergewissern? Und wenn es eine Welle ist – welches Experiment gäbe denn Auskunft über seine Phase und seine Amplitude? Im Laufe dieser Debatte gelangte man zur Einsicht, dass ein sog *nai-ver Realismus* – das Elektron “ist” Teilchen mit Bahn und allem was dazugehört – sich für physikalische Erklärungen auf der atomaren und sub-atomaren Skala nicht eignet. An die Stelle der Welle-Teilchen Dichotomie trat alsbald die Vorstellung von einem sog *Welle-Teilchen Dualismus*: Teilchen und Welle sind verschiedene,

sich ergänzende Aspekte ein-und-derselben Entität “Elektron”. In der freien Propagation, aber auch im Interferenzmuster, offenbart sich sein Wellencharakter. Im individuellen Nachweis – dem “Click” – aber auch dem Stoß, offenbart sich sein Teilchencharakter.

Die größte Erschütterung, die die Quantenmechanik bewirkte, betraf jedoch den sog *klassischen Determinismus*. Die Auffassung “Gib mir die Newtonschen Gesetze nebst Anfangsbedingungen, und ich sage Dir was der Fall sein wird” erwies sich als ebenso unhaltbar wie die Einteilung der Welt in Welle und Teilchen. An die Stelle des klassischen Determinismus trat der sog *Probabilismus* demzufolge zwar die W’keiten des Ausgangs einer Messung vorausgesagt werden können, nicht aber der Messwert einer individuellen Messung. Das Streifenmuster im Interferenzexperiment ist demnach nicht die Intensitätsverteilung einer klassischen Welle, sondern Häufigkeitsverteilung räumlich lokalisierter Schwärzungen die ihre natürliche Erklärung in den Einschlägen von teilchenartigen Dingen findet.

Mit der probabilistischen Interpretation der Quantenmechanik hatte der Welle-Teilchen Dualismus, verstanden als (Quanten-)Eigenschaft eines konkreten Individuums, eigentlich ausgedient. Interferenzmuster sind Häufigkeitsverteilungen, und die charakterisieren ein statistisches Ensemble und nicht ein Individuum. Dass der Welle-Teilchen Dualismus trotzdem munter fortlebt – schauen Sie nur mal in Ihr Schulbuch oder Ihr Lehrbuch – verdankt er vermutlich seiner gleichnishaften Bildlichkeit.

Für die Belange der Physik gilt die Debatte um die Grundlagen der Quantenmechanik größtenteils abgeschlossen – alles “ist” (Quanten-)Feld, und Teilchen sind die Anregungen dieser Felder – aber in der Philosophie, hier insbesondere Erkenntnistheorie und Wissenschaftstheorie wird sie munter fortgeführt. Eigentlich sollte jede(r) PhysikerIn einmal ein Seminar bei den Philosophen zu diesen Themenkreisen besuchen ...

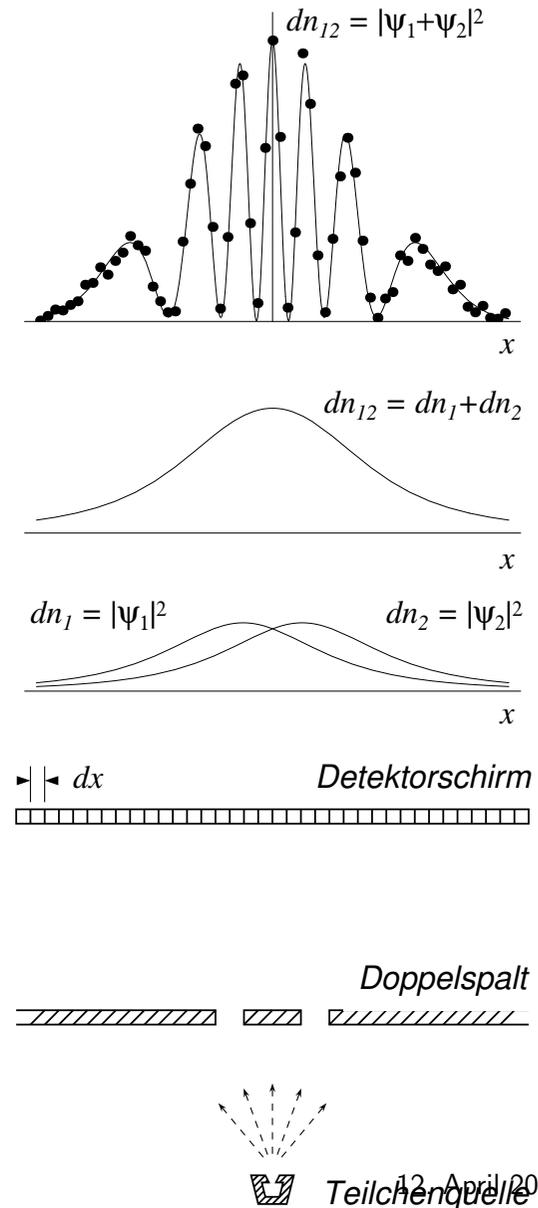




Abb 1.1 *Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858–1947); Nobelpreis für Physik 1918 “in recognition of the services he rendered to the advancement of Physics by his discovery of energy quanta”*

1.2 Die Geburt von \hbar

Geboren wurde die Quantenmechanik auf einer Sitzung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft am 14. Dezember anno 1900 zu Berlin. Hier hält Max Planck seinen Vortrag *Zur Theorie des Gesetzes der Energieverteilung im Normalspektrum*.¹ Hinter dem etwas sperrigen Titel verbirgt sich die Lösung eines Puzzles – das Strahlungsspektrum eines schwarzen Körpers – bei dem sich Theorie und Experiment bis dato heftig widersprachen. Vorhang auf:

Max Planck (1900): Die Schwarzkörperstrahlung ist spektral so verteilt *als ob* Materie elektromagnetische Strahlung in granularer Form emittiert und absorbiert – die Energie einer elementaren Portion Strahlung der Frequenz ω ist $E = \hbar\omega$ mit²

$$\hbar \approx 10^{-34} \text{ J sec} \quad \text{PLANCK'SCHES WIRKUNGSQUANTUM.} \quad (1.1)$$

In der älteren Literatur wird häufig $h = 2\pi\hbar$ als Wirkungsquantum bezeichnet und \hbar (sprich: h-quer; engl: aitsch-bar) als reduziertes Wirkungsquantum. Statt $E = \hbar\omega$ liest man dann $E = h\nu$, von Planck genannt *Energieelement*.

Unter einem schwarzen Körper versteht man einen Körper, der Strahlung zwar absorbiert und emittiert, nicht aber reflektiert. Im thermodynamischen Gleichgewicht halten sich Emission und Absorption natürlich die Waage. Im Falle eines idealen

¹Abgedruckt in: Verhandlungen d. Deutschen physikal. Gesellschaft **2**, p. 237 (1900). Eine detaillierte Ausarbeitung findet sich in: *über das Gesetz der Energieverteilung im Normalspektrum*, Drudes Annalen (Annalen der Physik) p. 553 (1901). Die Planckschen Arbeiten zum Strahlungsgesetz im Faksimile: *Ostwalds Klassiker der Exakten Wissenschaften*, Band **206**, Verlag Harri Deutsch (1997), ISBN 3-8171-3206-9.

²Genauer $\hbar \approx (1.05457266 \pm 0.00000063) \times 10^{-34} \text{ J sec}$.

schwarzen Körpers hängt das Emissionsspektrum – das sog *Normalspektrum* – definitionsgemäß ausschließlich von der Temperatur des Körpers ab, nicht aber seiner materiellen Beschaffenheit. Nahezu perfekte schwarze Körper lassen sich durch einen Hohlkörper realisieren, dessen Wände auf konstanter Temperatur gehalten werden. Ein kleines Loch in einer der Wände macht es möglich, das Strahlungsfeld, das sich im Inneren einstellt, zu analysieren. Viele Dinge in Ihrer Umgebung, angefangen von einem Ofen bis hin zum Universum (Mirowellenhintergrund!) kommen dem idealen schwarzen Körper übrigens recht nahe.

Das Puzzle, dessen Lösung Planck mit seiner Hypothese gelang,³ lässt sich kurz zusammenfassen: Nach der Elektrodynamik ist das elektromagnetische Feld in einem Hohlraum eine abzählbar unendliche Menge von harmonischen Oszillatoren. Nach dem Gleichverteilungssatz der klassischen Thermodynamik hat jeder Oszillator im Mittel die Energie $k_B T$ (k_B ist die Boltzmannkonstante, und T ist die Temperatur der Wände). Das Strahlungsfeld hätte demzufolge unendliche Energie. Hat es aber nicht – schließlich ist bislang noch niemand beim Öffnen seiner Ofenklappe instantan verdampft. Statt dessen ist die Energie im Hohlraum (Volumen V) gegeben $\propto VT^4$, sog Stefan-Boltzmann-Gesetz (Stefan 1879; Boltzmann 1884).

Planck hatte sich schon lange mit dem Problem auseinandergesetzt – er war gewissermaßen ein Experte der Hohlraumstrahlung. Ein entscheidender Durchbruch gelang ihm einige Monate vor der denkwürdigen Dezember-Sitzung. Bereits am Abend des 7. Oktober war es ihm gelungen, die bereits länger bekannten Hochfrequenzdaten mit den vergleichsweise neuen Daten für kleine Frequenzen in einer Formel zu vereinen. Unter dem Titel *Über eine Verbesserung der Wienschen Spektralgleichung*⁴

³... und dessen Lösung insbesondere auch für die Glühbirnenfertigung von technologischem Interesse war, die angesichts der zunehmenden Elektrifizierung um die Jahrhundertwende an Bedeutung gewann: wie hängen Lichtausbeute und Spektrum eines Glühfadens von dessen Temperatur ab?

⁴Verhandlungen d. Deutschen physikal. Gesellschaft **2**, p. 202 (1900)

In Raumbereichen wo sich keine Ladungen und Ströme befinden genügt das elektromagnetische Feld den Maxwell'schen Gleichungen $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0$, $\vec{\nabla} \times \vec{B} = c^{-2} \dot{\vec{E}}$, $\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\dot{\vec{B}}$, $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$, und die in einem Volumen V gespeicherte elektromagnetische Energie berechnet sich zu

$$U = \frac{\epsilon_0}{2} \int_V [\vec{E}^2 + c^2 \vec{B}^2] d^3x. \quad (1.2)$$

Für eine stehende elektromagnetische Welle, $\vec{E}(\vec{x}, t) = E(t)\vec{e}_y \cos(kx)$, $\vec{B}(\vec{x}, t) = B(t)\vec{e}_z \sin(kx)$ impliziert M'wll Bewegungsgleichungen für die Amplituden $\dot{E} = \omega cB$, $c\dot{B} = -\omega E$, wobei $\omega = ck$. Mit der Bezeichnung $Q := cB/A$, $P := E/A$, worin $A = \sqrt{2\omega/(\epsilon_0 V)}$, lesen sich die Bewegungsgleichungen

$$\dot{Q} = \omega P, \quad \dot{P} = -\omega Q, \quad (1.3)$$

und es ist $U \equiv H(P, Q)$ mit

$$H(P, Q) = \frac{\omega}{2} (P^2 + Q^2) \quad (1.4)$$

Hamiltonfunktion zu (1.3)! Verallgemeinert: jeder Mode des Strahlungsfeldes entspricht ein harmonischer Oszillator dessen Frequenz durch die Frequenz der Mode gegeben ist. Die Auslenkung Q entspricht der magnetischen Feldamplitude der jeweiligen Mode und der kanonisch konjugierte Impuls entspricht ihrer elektrischen Feldamplitude. 12. April 2008

präsentiert er seine Interpolationsformel auf der Oktober-Sitzung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft am 19. Okt. 1900. In der heutzutage gebräuchlichen Notation

$$\rho(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \left(\frac{\hbar\omega}{\exp\{\frac{\hbar\omega}{k_B T}\} - 1} + \frac{\hbar\omega}{2} \right). \quad (1.5)$$

Der Vorfaktor ist die Zahl der Moden (wegen Polarisation 2 für jede Wellenzahl $\vec{k} = \frac{2\pi}{V^{1/3}}(n_x, n_y, n_z)$, $n_i = 0, \pm 1, \dots$) pro Volumen V und Frequenzintervall $d\omega$. Für kleine Frequenzen $\hbar\omega \ll k_B T$ erhält man das Rayleigh-Jeans Gesetz $\rho \approx \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_B T$ das, der klassischen Physik zufolge, eigentlich für alle Frequenzen gelten sollte. Für große Frequenzen erhält man das *Wiensche Gesetz* (Wien 1896), das empirisch bereits gut gesichert war, für das es jedoch bis dato keine Erklärung gab. Das Integral $u := \int_0^\infty \rho(\omega, T) d\omega$ (ohne Nullpunkts-Energie)⁵ berechnet sich zu $u = bT^4$, in Übereinstimmung mit Stefan-Boltzmann-Gesetz (Stefan 1879; Boltzmann 1884). [Benutze $\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$.]

Planck wollte die Formel aber nicht nur aufstellen, sondern sie auch physikalisch interpretieren. Das war ihm im Dezember schließlich auch gelungen, aber so recht anfreunden konnte er sich mit seinem eigenen Kustgriff nicht. Noch 30 Jahre später bezeichnet er seine Arbeit als “Akt der Verzweiflung . . . , dass ich unter allen Umständen, koste es was es wolle, ein positives Resultat herbeiführen müsste.”

Einstein erkannte wohl als Erster die Tragweite der Planckschen Arbeit und die “neue Physik” die darin aufblitzte. In seiner Arbeit *Über eine die Erzeugung und Verwandlung des Lichts betreffenden heuristischen Gesichtspunkt*⁶ interessiert er

⁵Der Term $\frac{\hbar\omega}{2}$ in der Klammer, die sog *Nullpunktsenergie*, wurde von Planck erst später gefunden (1912). Seine Begründung für den Term gilt aus heutiger Sicht als “falsch”, der Term selber als korrekt.

⁶Ann. Phys. **17**, 132 (1905); die Einsteinschen Annalen Arbeiten sind als Sammelwerk erschienen: *Einstein's Annalen Papers – The Complete Collection 1901–1922*, Herausgegeben von Jürgen

sich insbesondere für den Hochfrequenzlimes der Planckschen Strahlungsformel – das Wiensche Gesetz – in dem sich die “neue Physik” am deutlichsten manifestiert. Einstein stellt fest, dass die Thermodynamik des entsprechenden Strahlungsfeldes von der Thermodynamik eines idealen Gases nicht zu unterscheiden ist.

Monochromatische Strahlung von geringer Dichte (innerhalb des Gültigkeitsbereichs der Wienschen Strahlungsformel) verhält sich im wärmetheoretischer Beziehung so, wie wenn sie aus voneinander unabhängigen Energiequanten von der Größe $h\nu$ bestünde.

In einer heutzutage gebräuchlichen Formulierung:

Albert Einstein (1905): Plancks elementare Energieportion einer Feldmode mit Wellenvektor \vec{k} und Frequenz $\omega = ck$ kann als ein Teilchen (“Lichtteilchen”=Photon) mit Energie E und Impuls \vec{p} aufgefasst werden,

$$\begin{aligned} E &= \hbar\omega \\ \vec{p} &= \hbar\vec{k} \end{aligned} \quad \text{PLANCK-EINSTEIN BEZIEHUNG.} \quad (1.6)$$

Begründung: Die spezielle Relativitätstheorie sagt $E^2 = m^2c^4 + c^2p^2$; für ein Teilchen der Masse $m = 0$ also $E^2 = c^2p^2$. Nach Planck ist aber $E = \hbar\omega$, und mit der Dispersionsrelation $\omega = ck$ ergibt sich $p = \hbar k$.⁷

Zwar bleibt auch Einstein wie schon Planck hier beim *als ob* (das ist das heuristische Prinzip). Im Gegensatz zu Planck aber erweiter er das “als ob” und schreibt

Renn, Wiley-VCH Weinheim (2005), ISBN-10: 3-527-40564-X

⁷Obwohl die Identifikation der Photonen bei Einstein zunächst auf den Hochfrequenzlimes eingeschränkt wurde, gilt sie heutzutage als universell – also unabhängig vom Frequenzbereich. Die universelle Gültigkeit verdanken wir einer weiteren Erkenntnis über die Lichtteilchen – ihre prinzipielle Ununterscheidbarkeit.



Abb 1.2 Albert Einstein (1879–1955); Nobelpreis für Physik 1921 “for his services to Theoretical Physics, and especially for the discovery of the law of the photoelectric effect”

dem Strahlungsfeld selber eine granulare Struktur zu, und nicht nur dem Energieaustausch zwischen Materie und Feld, und er erkennt die Bedeutung für andere physikalische Probleme, wie beispielsweise den *photoelektrischen Effekt* (Hertz 1887, Lenard 1902).

Bestrahlt man Metall mit Licht, erwartet man dass die kinetische Energie der herausgelösten Elektronen mit der Intensität des Lichts zunimmt. Tut sie aber nicht. Zwar wächst die Zahl der herausgelösten Elektronen proportional der Intensität – die im Experiment ermittelte kinetische Energie eines jeden Elektrons ist jedoch unabhängig von der Intensität, stattdessen inhomogen linear in der Frequenz, $E_{\text{kin}} = \hbar\omega - W$, worin W eine materialabhängige sog *Austrittsarbeit* und \hbar eine materialunabhängige Konstante, von Einstein in der zitierten Arbeit mit dem Planck'schen Wirkungsquantum identifiziert.

Eine weitere Bestätigung findet (1.6) im *Compton-Effekt* (1922/23). Bei der Streuung von Licht an Elektronen erwartet man im Rahmen der klassischen Elektrodynamik elastische Streuung. Stattdessen beobachtet man eine inelastische Streuung, die mit der Teilchenvorstellung von Licht einfach erklärt werden kann.

Die Teilchenvorstellung von Licht liefert zwar eine schöne Erklärung für die Hohlraumstrahlung und den photoelektrischen Effekt, versagt allerdings kläglich bei der Erklärung von Beugung, Interferenz und anderen Phänomenen die bis dato auf die Wellennatur des Lichts zurückgeführt wurde. Die alte Frage “Was ist Licht – Welle (Huygens) oder Teilchen (Newton)” war damit wieder offen. Einstein war sich dessen sehr wohl bewußt.

Deshalb ist es meine Meinung, dass die nächste Phase der Entwicklung der Theoretischen Physik uns eine Theorie des Lichtes bringen wird, welche sich als eine Art Verschmelzung von Undulations- und Emissionstheorie des Lichtes auffassen lässt.

Auf diese Verschmelzung musste Einstein lange warten. Erst Ende der 1920er Jahre war es so weit. Der Streit Welle vs Teilchen geht erst mal in die Pause. Der Vorhang senkt sich – auf der Bühne bereitet man den nächsten Akt vor: die Quantenphysik des Atoms.

1.3 Bohrsches Atommodell

Auch wenn es verwunderlich klingt, die Überzeugung, dass die Materie aus Atomen (im heutigen Sinne) aufgebaut ist, hat sich vergleichsweise spät durchgesetzt. Ein wichtiger Schritt war hier die Entdeckung des Elektrons durch J.J. Thomson im Jahr 1897. Aus heutiger Sicht markiert diese Entdeckung den Beginn der Elementarteilchenphysik und der Atomphysik. Und sie nimmt die Quantenhypothese vorweg, auch wenn das nicht sofort erkannt wurde: schließlich ist mit der Entdeckung der elektrischen Elementarladung jede beliebige Ladungsmenge quantisiert, $Q = ne$ mit n ganze Zahl.⁸

In dem von Thomson entwickelten Atommodell ist die positive Ladung ein kugelförmiges Kontinuum, in dem die Elektronen eingebettet sind wie die Rosinen in einem Rosinenkuchen (engl.: Muffin). Das Thomsonsche Atommodell geriet allerdings in eine Krise, als Rutherford im Jahr 1911 in einer Reihe von Streuexperimenten feststellte, dass das Atom im wesentlichen leer ist, und die positive Ladung in einem winzig kleinen Kern konzentriert ist. An die Stelle des statischen Modells von Thomson trat ein dynamisches Modell bei dem die Elektronen den Kern umkreisen wie die Planeten um die Sonne. Nun strahlen beschleunigte Ladungen allerdings Energie ab – innerhalb kürzester Zeit sollte also das Elektron im Rutherford'schen Atommo-

⁸Quarks haben "Drittel-Ladungen". Sie sind zwar isoliert noch nie beobachtet worden, wer aber will kann ein Drittel der Elektronenladung als Elementarladung bezeichnen.



Abb 1.3 *Niels Henrik David Bohr (1885–1962); Nobelpreis für Physik 1922 “for his services in the investigation of the structure of atoms and of the radiation emanating from them”*

dell ins positiv geladene Zentrum stürzen. Tut es aber nicht. Materie, davon zeugt unsere Existenz, ist immun gegen Strahlungsinstabilität.

Um dieser Anomalie Herr zu werden beauftragte Rutherford seinen jungen Assistenten, Niels Bohr, sich der Sache anzunehmen. Inspiriert durch Vorarbeiten von Arnold Sommerfeld bestand Bohrs Ansatz im wesentlichen darin, die Quantenhypothesen von Planck und Einstein mit einer Reihe von ad-hoc Annahmen auf das Rutherfordsche Atommodell zu übertragen:

Niels Hendrik David Bohr (1914): Erlaubte Bahnen im Rutherford’schen Modell von Wasserstoff sind Kreisbahnen für die

$$\oint_{H=E} \vec{p} \cdot d\vec{q} = 2\pi n\hbar, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.7)$$

wobei $H = H(\vec{p}, \vec{q})$ die Hamiltonfunktion des Wasserstoffatoms bezeichnet.

Die Gleichung (1.7) formuliert eine Bedingungen an die Energie E . Die erlaubten Energien sind demzufolge diskret, $E = E_n$, mit

$$E_n = - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{me^4}{2n^2\hbar^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.8)$$

Emission von Licht findet nur statt, wenn das Leuchtelektron von einer erlaubten Bahn auf eine andere erlaubte Bahn in einem sog. *Quantensprung* (engl.: quantum jump) wechselt. Die diskreten Frequenzen des emittierten Lichts

$$\omega_{mn} = |E_m - E_n|/\hbar \quad (1.9)$$

genügen dem *Ritzschen Kombinationsprinzip (1908)*. Die Lage der entsprechenden Spektrallinien befinden sich bei atomarem Wasserstoff in ziemlich guter Übereinstimmung mit dem Experiment. Bei Atomen mit mehreren Elektronen, oder gar Molekülen, ist die Übereinstimmung allerdings mehr als miserabel.

Das Bohrsche Atommodell liefert auch eine schöne Erklärung für den *Franck-Hertz Versuch (1913)*: Schießt man Elektronen auf ein atomares Gas, erwartet man dass die Zahl der gestreuten Elektronen mit deren Energieverlust aufgrund inelastischer Streuung monoton abnimmt. Tut sie aber nicht. Statt dessen beobachtet man ausgeprägte Maxima bei bestimmten, diskreten Werten, die durch die diskreten Energien im Bohrschen Atommodell ihre natürliche Erklärung finden.

Die Theorie (1.7) wurde von Sommerfeld und anderen weiter ausgebaut (Bohr-Sommerfeldsche Quantisierungsbedingungen); sie firmiert heutzutage unter dem Stichwort “Semiklassik” und spielt weiterhin eine gewisse Rolle, etwa bei der Analyse von Quantenchaos.

Auf Bohr geht auch der Name “Quantenmechanik” für die neu entstehende Physik zurück, und er ist der Erfinder des sog. *Korrespondenzprinzips* wonach die Quantenmechanik im Grenzfall grosser Quantenzahlen asymptotisch in die klassische Physik übergehen sollte. In den Übungen zeigen Sie, dass für große Quantenzahlen n , die Bohrsche Übergangsfrequenz $\omega_{n+1,n}$ mit der Winkelgeschwindigkeit des klassischen Elektrons vergleichbarer Energie näherungsweise übereinstimmt.

Das Bohrsche Atommodell hatte mit der endgültigen Formulierung der Quantenmechanik Mitte der 1920er Jahre eigentlich ausgedieht: seine “diskreten Kreisbahnen” lassen sich selbst mit größter Anstrengung quantenmechanisch nicht rechtfertigen. Trotzdem hat das Bohrsche Atommodell (gepaart mit dem Welle-Teilchen Dualismus) bis heute überlebt – schauen Sie nur mal in Ihr Schulbuch. Als angehende PhysikerIn dürfen Sie das Modell auch weiterhin benutzen – etwa um ihren Eltern etwas über die Quantenmechanik zu erzählen. Für Ihr Vordiplom oder Ihren weitem Berufsweg in der Physik sollten Sie es aber ganz schnell vergessen. Schließlich wollen Sie nicht durchfallen oder sich gar lächerlich machen . . .



Abb 1.4 *Prince Louis-Victor Pierre Raymond de Broglie (1892–1987); Nobelpreis für Physik 1929 “for his discovery of the wave nature of electrons”*

1.4 Wellenmechanik

Dank der Bohrschen Hypothese der quantisierten Wirkung kann das Elektron im Wasserstoff nicht ins Zentrum fallen weil die entsprechende Bahn schlicht verboten ist. Warum das allerdings so ein sollte, warum also die Wirkung bei gebundener Bewegung quantisiert sein sollte, blieb jedoch lange Zeit unbeantwortet. Mitte der '20 Jahre wurde diese Frage allerdings schlagartig beantwortet.

Die Pause ist zu Ende, der Vorhang hebt sich wieder. Auftritt ein Prinz ...

Louis Victor Prince de Broglie (1924): Freie Teilchen mit Impuls \vec{p} und Energie $E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ werden durch eine ebene Welle beschrieben,

$$\Psi(\vec{x}, t) \propto e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(k)t)}, \quad (1.10)$$

wobei Wellenvektor \vec{k} und Frequenz ω in Umkehrung der Planck-Einstein Beziehung (1.6)

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}, \quad \omega(k) = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (1.11)$$

Zu Ehren des Prinzen heißt die Wellenlänge von Materiewellen,

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \quad \text{DE BROGLIE WELLENLÄNGE.} \quad (1.12)$$

De Broglies Modell “erklärt” die Bohr-Sommerfeld’schen Quantisierungsbedingung – den erlaubten Bahnen entsprechen stehende Wellen – und behauptet die Interferenz von Teilchen. Davisson und Germer haben Interferenzerscheinungen bei der Elektronenbeugung an Kristallen 1927 erstmals beobachtet.

Allerdings selbst vor Beobachtung der Interferenz von Materiewellen war die De Brogliesche Analogie (wenn –nach Einstein – eine Lichtwelle ein Teilchenschwarm, dann doch wohl auch – Symmetrie Symmetrie! – ein Teilchenschwarm eine Welle) verführerisch genug, um sich damit zu beschäftigen.

Erwin Schrödinger – so die Anekdote – wurde von Einstein auf die DeBroglie'sche Arbeiten aufmerksam gemacht. Als er darüber Ende 1925 in Zürich vorträgt, fällt Frank Debye ihm mit der Bemerkung ins Wort "Aber Wellen genügen einer Wellengleichung – was ist denn nun die Wellengleichung?". Weihnachten 1925 verbringt Schrödinger mit einer Freundin in Arosa. Beim Skifahren auf der Piste findet er die Antwort, die er kurze Zeit später in einer Serie von Arbeiten *Quantisierung als Eigenwertproblem I–IV* in den *Annalen der Physik* veröffentlicht.⁹



Erwin Schrödinger (1926): De Broglies Wellenfunktion $\Psi(\vec{x}, t)$ eines nicht-relativistischen Teilchens im Potential $V(\vec{q}, t)$ genügt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}, t) \right] \Psi(\vec{x}, t)$$

SCHRÖDINGERGLEICHUNG . (1.13)

Abb 1.5 Erwin Schrödinger (1887–1961); Nobelpreis für Physik 1933 (geteilt mit Paul Adrien Maurice Dirac) "for the discovery of new productive forms of atomic theory"

Die Schrödingergleichung bringt die De Broglie Hypothese und die Bohrsche Atomphysik unter ein Dach: ist V das Coulombpotential, sind die Eigenwerte des Differentialoperators $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x})$ genau die diskreten Energiewerte im Bohrschen Atommodell, und für freie Teilchen $V = 0$ ist die De Broglie Welle (1.10) eine Lösung der Schrödingergleichung (1.13).

Unklar blieb allerdings die Bedeutung von Ψ . Schrödinger ging zunächst davon aus, dass $|\Psi|^2$ die Dichteverteilung des Elektrons bedeutet. Diese Interpretation wurde kurze Zeit später verworfen, und durch eine Welleninterpretation ersetzt.

⁹Ann. Phys. (4) **79** 361, 489; **80** 437; **81** 109 (1926).



Abb 1.6 *Max Born (1872–1970); Nobelpreis für Physik 1954 “for his fundamental research in quantum mechanics, especially for his statistical interpretation of the wavefunction”*

Max Born (1926) Das Differential

$$|\Psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x \quad (1.14)$$

ist die Wahrscheinlichkeit, bei einer Ortsmessung das Teilchen in einer d^3x -Umgebung bei \vec{x} zu finden.

Kurze Zeit später haben Pauli und Heisenberg eine ähnliche Formulierung für Impulsmessungen gefunden (die involviert die Fouriertransformierte der Ortswellenfunktion). Was zu tun blieb, war die entstehende Quantenmechanik mathematisch sauber zu formulieren, mit Axiomen, Sätzen, Lemmata und was sonst noch so dazugehört.

John von Neumann (1932): Präzisierung der mathematischen Struktur der Quantenmechanik und erste Problematisierung des “Messprozesses”. Die Funktion $\Psi(\vec{x}, t)$ ist demnach Element eines linearen Raumes (Funktionsraum mit der Struktur eines Hilbertraumes). Messgrößen wie Ortskoordinaten \hat{q}_i oder Impulskomponenten \hat{p}_i , $i = x, y, z$, sind lineare Operatoren in diesem Raum. Ihr jeweiliges Spektrum wird mit den möglichen Messwerten identifiziert.

1.5 Matrizenmechanik

Die Gleichung (1.13) ist das Herzstück der sog. *Wellenmechanik*. Die Wellenmechanik ist ein guter Ausgangspunkt für die Abhandlung der Quantenmechanik – aber nicht der Einzige. Ein paar Monate bevor Schrödinger seine Gleichung aufstellt, wird die Quantenmechanik von einem anderen Ende aufgerollt – von einem Ende das zunächst eher an die klassische Mechanik erinnert.

Wir erinnern uns. In der klassischen Mechanik ist der Zustand eines Massepunktes (Elektron) zu einem beliebigen Zeitpunkt durch die Angabe seiner verallgemeinerten

Koordinaten $\vec{q} = (q_x, q_y, q_z)$ und Komponenten des kanonisch konjugiertem Impulses $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ vollständig festgelegt. Die Koordinaten und kanonisch konjugierten Impulskomponenten sind *dynamische Variable*; ihre Festlegung geschieht durch Messung. Die Messwerte der Koordinaten (Ortsmessung) werden mit $\vec{x} = (x, y, z)$ bezeichnet, die des Impulses mit $\hbar\vec{k}$, $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ ¹⁰ Werden am Massepunkt zum Zeitpunkt t_0 die Messwerte \vec{x}_0 und $\hbar\vec{k}_0$ gemessen, so sind entsprechend $\vec{q}(t_0) = \vec{x}_0$ und $\vec{p}(t_0) = \hbar\vec{k}_0$ als Anfangswerte für die Lösung $\vec{q}(t)$ bzw. $\vec{p}(t)$ der klassischen Bewegungsgleichungen zu setzen. Werden zu einem späteren Zeitpunkt $t \geq t_0$ Ort und Impuls gemessen so verspricht die klassische Mechanik, dass bei einer idealen störungsfreien Messung mit Sicherheit die Werte $\vec{x} = \vec{q}(t)$ und $\hbar\vec{k} = \vec{p}(t)$ gefunden werden. Insbesondere, da t beliebig, verspricht die klassische Mechanik, daß die *Bahn* $\vec{q}(t)$ des Teilchens prinzipiell beobachtbar ist ohne die Bewegung durch die Messung zu beeinflussen.

Ein derartiges Versprechen kann die Quantenmechanik nicht machen. In Heisenbergs Worten “. . . auch bei den einfachsten quantentheoretischen Problemen kann an eine Gültigkeit der klassischen Mechanik nicht gedacht werden.” Das Zitat ist aus *der Arbeit Heisenbergs*, deren zentrale Idee – die Partialamplituden eines anharmonischen Oszillators als Übergangsamplituden $q(m, n)$ zwischen Bohr’schen Orbits zu deuten – bei einem Heuschnupfen-bedingten Aufenthalt auf Helgoland im Juni 1925 ihre endgültige Gestalt annahm. Auf seiner Rückfahrt nach Göttingen trifft Heisenberg in Hamburg auf Pauli. Heisenberg skizziert seine Ideen. Pauli ist begeistert. Er wird noch im gleichen Jahr das Wasserstoffproblem im Heisenberg’schen Formalismus lösen.¹¹ Danach werden die meisten Physiker von der Matrizenmechanik überzeugt sein . . . aber noch ist es nicht so weit. Noch steht der Sommer vor der Tür, und der

¹⁰ \hbar ist in diesem Paragraphen eine beliebig gewählte Konstante mit der physikalischen Dimension einer Wirkung. Die Messgröße ist demnach k , wobei $k = |\vec{k}|$ die Dimension $[\text{Laenge}]^{-1}$ hat.

¹¹W. Pauli *Über das Wasserstoffspektrum vom Standpunkt der neuen Quantenmechanik*, Z. Phys. **36**, 336 (1926).



Abb 1.7 Werner Karl Heisenberg (1901–1976); Nobelpreis für Physik 1932 “for the creation of quantum mechanics, the application of which has, inter alia, led to the discovery of the allotropic forms of hydrogen”



Abb 1.8 Wolfgang Pauli (1900–1958); Nobelpreis für Physik 1945 “for the discovery of the Exclusion Principle, also called the Pauli principle”

entwickelt sich zum echten Knaller.¹²

9. Juli: Heisenberg reicht sein Manuskript zur Veröffentlichung ein.¹³ Der wesentliche Gedanke (in Born’scher Formulierung)

$$\text{dynamische Variable } q_i, p_j \longrightarrow \hat{q}_i, \hat{p}_j \text{ Matrizen, } \quad i, j = x, y, z. \quad (1.15)$$

11. Juli: Heisenberg gibt Born die endgültige Version des Manuskripts. Born ist tief beeindruckt, fragt sich aber, welche mathematische Struktur da eigentlich durchschimmert. Noch ist der Heisenberg’sche Kalkül schliesslich in 2-fach indizierten Grössen formuliert, die Identifikation mit “Matrixelementen” ist eben noch nicht vollzogen.

15. Juli: Born in einem Brief an Einstein “...Heisenberg’s neue Arbeit, die bald erscheint, sieht sehr mystisch aus, ist aber sicher richtig und tief ...”.¹⁴

19. Juli: Zug Kopenhagen–Hannover (Tagung der Physikalischen Gesellschaft). Born stellt fest dass (i) \hat{p} und \hat{q} Matrizen sind, die jedoch (ii) nicht kommutieren. Auf der Strecke Göttingen – Hannover trifft Born auf Pauli, erzählt von seinen Einsichten und schlägt Zusammenarbeit vor. Pauli lehnt brüsk ab. Er findet, man müsse Heisenbergs geniale Idee “...noch etwas mehr vom Göttinger formalen Gelehrsamkeitsschwall befreien [...]” (aus einem Brief an Kronig vom 9. Oktober 1925). Gemeint sind damit u.a. Kapazitäten wie Hilbert, Born, Jordan

¹²Der folgende Abschnitt ist maßgeblich inspiriert von *Sources of Quantum Mechanics*, B. L. van der Waerden (Hrsg.), Dover, New York (1968).

¹³Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen, Z. Phys. **33**, 879 (1925).

¹⁴Im Gegensatz zur Heisenberg’schen Arbeit, wo in der Tat mit einem gewissen Pathos ziemlich im Dunkeln gestochert wird, sind die Schrödinger’schen ’26er Arbeiten von luzider Klarheit. Unbedingt im Original lesen!

20. Juli: Hannover. Born bittet seinen Schüler Jordan ihm zu helfen. Jordan macht sich ans Werk und hat nach einigen Tagen eine Antwort parat: der Kommutator von \hat{p} und \hat{q} ist eine zeitlich erhaltene Diagonalmatrix. In heutiger Notation¹⁵

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}. \quad (1.16)$$

Born und Jordan setzen sich daran, eine Arbeit zu schreiben in der neben (1.16) auch die Quantisierung des Strahlungsfeldes mal eben so mit erledigt wird.¹⁶

28. Juli: Cambridge, Kapitza Club. Heisenberg hält einen Vortrag “Termzoologie und Zeemanbotanik”. Fowler erzählt Dirac davon und gibt ihm die Korrekturfahnen der Heisenberg’schen Arbeit. Dirac, der die entstehende Arbeit von Born und Jordan nicht kennt, findet (1.16), und darüberhinaus das bis heute gültige Rezept der “kanonischen Quantisierung”,¹⁷

$$\text{Poisson-Klammern } \{ , \} \longrightarrow \frac{i}{\hbar} [,] \text{ Kommutator.} \quad (1.17)$$

12. Sept: Kopenhagen. Heisenberg erhält einen Brief von Jordan mit dem Born-Jordan Manuskript. Beginn einer intensiven Zusammenarbeit von Heisenberg, Jordan und Born die schließlich zur “Dreimännerarbeit” führt.¹⁸ Diese Arbeit enthält die erste logisch konsistente Ausarbeitung der Matrizenmechanik.

¹⁵Die Verallgemeinerung auf mehrere Freiheitsgrade wurde erstmals in der Dreimännerarbeit, und unabhängig davon von Pauli, Weyl und Dirac angegeben.

¹⁶M. Born und P. Jordan *Zur Quantenmechanik*, Z. Phys. **34**, 858 (1925).

¹⁷P.A.M. Dirac *The Fundamental Equations of Quantum Mechanics*, Proc. Roy. Soc. **A109**, 642 (1926).

¹⁸M. Born, W. Heisenberg und P. Jordan *Zur Quantenmechanik II*, Z. Phys. **35**, 557 (1926).



Abb 1.9 *Paul Adrien Maurice Dirac (1902–1984); Nobelpreis für Physik 1933 (geteilt mit Erwin Schrödinger) “for the discovery of new productive forms of atomic theory”*

Neben Begriffen wie Hauptachsentransformationen, Eigenwerten und Eigenvektoren hält hier auch die Drehimpulsalgebra Einzug in die Quantenmechanik

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar\hat{l}_z, \quad (xyz \text{ zyklisch}). \quad (1.18)$$

Das folgende Jahr 1926 ist die Zeit der Ernte. Die Dreimännerarbeit, die Arbeit von Pauli und die Arbeit von Dirac erscheinen. Heisenberg erarbeitet seine Aussage, wonach Ort und Impuls nicht gemeinsam mit beliebiger Genauigkeit vorhersagbar sind; stattdessen (veröffentlicht 1927)

$$\delta q_i \delta p_j \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{ij} \quad \text{HEISENBERG'SCHE UNSCHÄRFERELATION} \quad (1.19)$$

und Erwin Schrödinger weist die Äquivalenz von Matrizenmechanik und Wellenmechanik nach.

Der Vorhang fällt, die Quantenmechanik steht. Was zu tun bleibt, ist (i) die Quantenmechanik begrifflich zu erfassen, (ii) die Verallgemeinerung auf andere Systeme.

Um hier ein G'schmäckle zu vermitteln, seien ein Paar Schritte in dieser Richtung aufgeführt.

Paul Adrienne Maurice Dirac (1928): Relativistische Wellengleichung fürs Elektron und Voraussage des Positrons. Damit ist der Weg frei für eine konsistente Quantisierung der Elektrodynamik – genannt Quantenelektrodynamik – die nach wie vor eine der reifsten Theorien darstellt, die die Welt kennt. Unschlagbar in ihren Vorhersagen, ihrer Übereinstimmung mit dem Experiment, und ihrer “Modellbildungs-Potenz” für die Elementarteilchentheorie (Stichwort: nicht-abelsche Quantenfeldtheorien).

Einstein, Podolsky, Rosen (1935): Entwurf eines Gedankenexperiments das als “EPR Paradoxon” noch heute die Gemüter bewegt. Das Gedankenexperiment war von seinen Autoren ursprünglich dazu gedacht, die Unvollständigkeit der Quantenmechanik argumentativ zu untermauern. Das ist wohl nicht gelungen. Allerdings erweist sich das erdachte Szenario, insbesondere die darin implizierten sog *EPR-Korrelationen*, als außerordentlich fruchtbar für die Grundlagendebatte der Quantenmechanik.

John Stuart Bell (1964): Formuliert sein berühmten Ungleichungen und verweist damit das EPR Paradoxon aus dem platonischen Ideenhimmel an die Experimentierplätze.

Das Bellschen Ungleichungen sind Ungleichungen für die statistischen Korrelationen von Messergebnissen zweier raum-zeitlich getrennten Systemen, die eine gemeinsame Vergangenheit haben. Sie basieren auf wenigen, zunächst plausibel erscheinenden Annahmen, die der klassischen Physik – hier insbesondere einer Lokalitätsannahme – entlehnt sind. Der Witz der Bellschen Ungleichungen besteht darin, dass sie durch die EPR-Korrelationen der Quantenmechanik verletzt werden. Nach Pionier-Experimenten von Clauser und anderen wurde diese Verletzung für Photonenpaare von Alain Aspect Anfang und seinem Team Anfang der 1980er Jahre eindrucksvoll demonstriert.

Die EPR-Korrelationen stehen auch im engen Zusammenhang mit der jüngsten Serie von spektakulären Experimenten zum Kodieren zweier Bits in einem “Quantenbit”, der Schlüsselverteilung in der “Quantenkryptographie”, der schnellen Faktorisierung auf einem “Quantencomputer”, und nicht zuletzt der “Quanten Teleportation” (eine Art “beamen” aus der Serie “Raumschiff Enterprise” [engl. Star Trek]). Seitdem bevölkern die Grundlagen der Quantenmechanik Talk Shows und andere öffentliche Räume.

Wir kommen gelegentlich darauf zurück. Im übrigen sei auf die Vorlesung zur Quanteninformationsverarbeitung verwiesen, die in Potsdam mehr-oder-weniger regelmäßig angeboten wird . . .

1.6 Ausblick – das Gerüst der Quantentheorie

Wird die Quantenmechanik begrifflich verallgemeinert um auch andere Systeme, etwa die binäre Alternative eines Münzwurfs, Licht, Strings oder Gravitationswellen zu beschreiben, redet man von *Quantentheorie*.

Das Gerüst der Quantentheorie läßt sich in drei Grundsätzen skizzieren.

Postulat I (Zustandspostulat) Jedem physikalischen System ist ein Hilbertraum \mathcal{H} zugeordnet. Jeder nichttriviale Vektor $\psi \in \mathcal{H}$ beschreibt einen Zustand des Systems.¹⁹

Postulat II (Observablenpostulat) Observablen sind lineare Operatoren in \mathcal{H} . Im Zustand ψ ist der Erwartungswert der Observablen \hat{A}

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (1.20)$$

Postulat III (Zeitentwicklungspostulat) Die zeitliche Entwicklung eines Zustandes von der Präparation bis zur Messung ist durch die Schrödingergleichung bestimmt,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = \hat{H}(t) \Psi(t), \quad (1.21)$$

¹⁹Nichttrivial sind alle Vektoren – ausser dem o -Vektor.

wobei $\hat{H}(t)$ der Hamiltonoperator des Systems ist.

Das ist aber nur das Knochengerüst, und ein mageres noch dazu. Um ein spezifisches physikalisches System zu beschreiben, beispielsweise einen Massepunkt, müssen weitere Verabredungen getroffen werden, etwa solche, die den Hilbertraum des Massepunktes betreffen, und solche, die die Observablen “Ort” und “Impuls” mit Operatoren identifizieren. Ausserdem müssen die Postulate noch ein wenig präzisiert werden. Die Zuordnung von physikalischen Zuständen und Hilbertraum Elementen, etwa, kann man schärfer fassen: zwei Wellenfunktionen beschreiben dann und nur dann den gleichen physikalischen Zustand, wenn sie proportional sind.

Im übrigen bleibt anzumerken, daß es “die” Postulate der Quantentheorie eigentlich gar nicht gibt. Beim Lesen der Lehrbücher wird Ihnen das schon aufgefallen sein. Das Zustandsaxiom, beispielsweise, kann Ihnen durchaus in der Form “Zustände werden durch positive Operatoren mit Spur 1 beschrieben” begegnen. Das Observablenaxiom wird dann möglicherweise unter Rückgriff auf operatorwertige Maße formuliert, und das Zeitentwicklungsaxiom unter Rückgriff auf vollständig positive Abbildungen. Das mag verschieden klingen, erweist sich aber bei näherem Hinsehen als äquivalent: der Autor hat sich halt entschlossen, Sie bei Ihrem Vorwissen über die algebraische Wahrscheinlichkeitstheorie zu packen, statt – wie hier – ein gewisses Vorwissen aus der klassischen Mechanik vorauszusetzen.

Auch können Ihnen beim Schmökern weitere Postulate auffallen, etwa zum sogenannten “Kollaps der Wellenfunktion” – der ersten Art, der zweiten Art und der Dritten Art. Wir verzichten hier auf derartige Postulate – man sollte schliesslich die Zahl der Postulate möglichst gering halten – und berufen uns stattdessen gelegentlich auf eine Selbstverständlichkeit empirischer Wissenschaften, das

Gebot (Rationalitätsgebot) Behauptungen müssen überprüfbar sein

