

7.3 Die Grundstruktur der Quantenmechanik (*)

Wir wollen nun die im Kapitel 7.2 skizzierten experimentellen Fakten verwenden, um daraus schrittweise ein logisches Konzept der Quantenmechanik zu entwickeln. Dabei werden wir, wie bereits angedeutet, diese Fakten in leicht abgeänderter Reihenfolge benutzen. Beginnen werde ich mit einigen Erläuterungen zum Begriff der *Messung*. Im Bereich der klassischen Physik ist man gewohnt, dass die grundsätzliche Bedeutung dieses Prozesses keiner Erklärung bedarf: Bei der Messung einer Größe an einem physikalischen Objekt bestimmt man den Wert, den diese Größe bei diesem Objekt aktuell angenommen hat. Und man wählt das dafür erforderliche Messverfahren derart aus, dass sich der Zustand des Objektes möglichst nicht verändert. Man kann z.B. die Geschwindigkeit eines Fahrzeugs durch eine Lichtschrankentechnik sehr präzise bestimmen, ohne dass sich hierbei die Geschwindigkeit des Fahrzeugs messbar verändert. Diese Situation verändert sich nun von Grund auf beim Übergang in den von der neuen Mechanik bestimmten Teil unserer realen Welt: Jede Messung einer physikalischen Größe verändert nun das vermessene Objekt, und zwar nicht nur geringfügig im Sinne einer Störung, sondern substanziell! Wie diese Veränderung genau aussieht, werden wir erst im weiteren Verlauf dieses Abschnitts verstehen. Andererseits benötige ich aber bereits jetzt den Begriff der Messung, um die weiteren Gedankengänge zur Entwicklung der Theorie erläutern zu können. Ich komme also nicht darum herum, den Begriff der Messung Schritt für Schritt und gemeinsam mit der Begründung der übrigen Begriffsbildungen zu präzisieren.

Betrachten wir also nun die im Abschnitt 7.2.4 beschriebene experimentelle Erfahrung über die statistische Natur der Messergebnisse. Da der Wert einer physikalischen Größe \mathbf{P} , gemeint ist das Ergebnis einer einzelnen P -Messung, nicht mehr zwangsläufig für jeden Zustand des Systems einen bestimmten Wert P_0 annimmt, kann man die möglichen Zustände eines Systems offenbar in 2 Klassen einteilen, nämlich

1. in Zustände mit einem festen (*scharfen*) Wert von \mathbf{P} ; und
2. in Zustände, bei denen \mathbf{P} nicht scharf ist.

Die zur 1. Klasse gehörenden Zustände werden auch als *Eigenzustände*[†] zu \mathbf{P} bezeichnet. Wir müssen davon ausgehen, dass ein System i.a. mehr als nur einen Eigenzustand zu \mathbf{P} besitzt mit i.a. unterschiedlichen Werten P_i . Misst man nun die Größe \mathbf{P} an einem System, das sich in einem ganz bestimmten dieser Eigenzustände zu \mathbf{P} befindet, dem wir die lfd. Nr. i geben wollen, so erhält man in jedem Fall diesen Wert P_i . Misst man dagegen die Größe \mathbf{P} an einem System, das sich in einem Zustand befindet, der nicht Eigenzustand zu \mathbf{P} ist, so erhält man bei jeder Messung andere Werte P_k . Um Missverständnisse zu vermeiden, betone ich bereits dieser Stelle, dass die Ergebnisse einer P -Messung auch im Rahmen der neuen Theorie weiterhin reell sind.

Wir verwenden nun die Unschärferelation, insbesondere deren Erweiterung in Form der Gl. 7.19 und 7.20. Ein stationärer Zustand eines Systems ist definitionsgemäß ein solcher mit einer Lebensdauer $\tau \rightarrow \infty$. Da wir die Lebensdauer mit der Zeitunschärfe identifizieren dürfen, und da die Unschärfe von Energie und Zeit über die Unschärferelation mit einander verknüpft sind, gilt

$$\tau \rightarrow \infty \leftrightarrow \Delta E = 0 \quad (7.24)$$

Dies bedeutet, dass stationäre Zustände eines Systems zwangsläufig Eigenzustände zur Energie dieses Systems sind. Darüber hinaus gibt es i.a. weitere Größen X_i und/oder ξ_i , bzgl. derer die stationären Zustände eines Systems ebenfalls Eigenzustände sind. Wieviele derartige Größen es gibt und welche es sind, hängt von der physikalischen Natur des betrachteten Systems ab. Von besonderer Bedeutung sind hierfür dessen Symmetrieeigenschaften. Ähnlich wie in der klassischen Mechanik die Symmetrieeigenschaften der Theorie festlegen, welche physikalischen Größen einen Erhaltungssatz erfüllen (s. Abschnitt 3.2.6), so legen jetzt die Symmetrieeigenschaften eines physikalischen Systems fest, welche Größen in dessen stationären Zuständen gemeinsam mit der Energie scharf sind. Auf die Einzelheiten dieser Zusammenhänge werden wir u.a. bei der Behandlung einiger konkreter Beispiele (Kapitel 7.9) zurück kommen. Wir fassen die gerade formulierten Aussagen zusammen in dem

Axiom 11 *Ein abgeschlossenes System kann nur in Zuständen existieren, die gemeinsamer Eigenzustand sind zur Energie und zu einer wohl bestimmten, durch die physikalische Struktur des Systems vorgegebenen Menge weiterer physikalischer Größen.*

Eine Angabe der Werte, die diese physikalischen Größen in einem dieser Zustände des Systems annehmen, ist daher eine bereits recht genaue Beschreibung dieses Zustands. Sie kann jedoch noch nicht vollständig sein, da sie in dieser Form nur aus reellen Werten besteht. Aus der für alle Arten von physikalischen Systemen möglichen Interferenz folgt jedoch, dass jede vollständige Zustandsbeschreibung diesem Zustand

[†]Dieser Begriff stammt aus der mathematischen Disziplin der Linearen Algebra. Weshalb es Sinn macht, diese Zustände so zu bezeichnen, werden wir im Kap. 7.4 lernen.

auch eine Phase zuordnen muss. Die Zustandsbeschreibung muss also komplexwertige Größe enthalten. Wie dann aus dieser komplexwertigen Größe $|k\rangle^\ddagger$, deren genaue Form und Gestalt uns an dieser Stelle noch völlig unbekannt ist, der (immer reelle) Wert einer physikalischen Größe errechnet wird, werden wir erst im weiteren Verlauf dieses Kapitels verstehen. Es ist jedoch gesichert, dass diese Größe $|k\rangle$ alle Informationen enthält, die zur Berechnung der Werte aller oben genannten Größen in diesem Zustand nötig sind.

Aus der für alle Systeme möglichen Interferenz folgt außerdem das Superpositionsprinzip, also

$$\begin{aligned} |k\rangle, |l\rangle &\in \{\text{Zustände des Systems}\} \Rightarrow \\ \alpha \cdot |k\rangle + \beta \cdot |l\rangle &\in \{\text{Zustände des Systems}\} \quad \forall \alpha, \beta \in \hat{\mathbb{C}} \end{aligned} \quad (7.25)$$

Diese Linearkombinationen sind dann aber i.a. keine Eigenzustände mehr zu den im Axiom 11 genannten Größen.

Als nächstes stellt sich die Frage, ob es auch noch Zustände des Systems gibt, die sich nicht als Linearkombination dieser Eigenzustände darstellen lassen. Diese Frage lässt sich auf Basis der geschilderten experimentellen Fakten nicht beantworten. Wir formulieren die Antwort als ein weiteres Postulat der neuen Mechanik:

Axiom 12 *Jeder Zustand eines physikalischen Systems ist darstellbar als Linearkombination der Zustände, die simultane Eigenzustände sind zu dem im Axiom 11 definierten für dieses System typischen Satz von Größen.*

Das Superpositionsprinzip erklärt unmittelbar und zwangsläufig die Möglichkeit des Tunneleffektes: In dem im Abschnitt 7.2.6 skizzierten physikalischen System ist der Zustand, in dem das Teilchen vollständig innerhalb der Burg konzentriert ist, ein möglicher Zustand des Systems und ebenso ein Zustand, in dem es vollständig außerhalb der Burg ist. Das Superpositionsprinzip verlangt nun, dass dann ein Zustand, in dem das Teilchen z.B. je zur Hälfte innerhalb und zur Hälfte außerhalb der Burg ist, ebenfalls ein zulässiger Zustand ist, was immer auch diese Aufteilung im Einzelnen bedeuten mag. Aus den Tunnel-Experimenten können wir also keine zusätzlichen Informationen über die logische Struktur der zu entwickelnden neuen Mechanik extrahieren.

Dagegen wird uns die Unschärferelation erneut ein weiteres kräftiges Stück voranbringen. Wir betrachten nämlich jetzt ein Paar kanonisch konjugierter Variablen des Systems. Wenn nun eine dieser beiden Variablen nicht zu dem im Satz 11 definierten Satz von ausgewählten Variablen gehört, dann kann die andere auch nicht dazu gehören. In den stationären Zuständen des Systems sind daher deren Unschärfen beide $\neq 0$,

$$\Delta X_i < \infty \Rightarrow \Delta \xi_i > 0 \quad (7.26)$$

[‡]Ich benutze an dieser Stelle die auf P. Dirac zurückgehende *ket-Schreibweise* (von bracket, engl. die Klammer) eines Zustands, ohne darauf einzugehen, was das im einzelnen bedeuten soll. Eine logisch saubere Definition wird im Kap. 7.5 erfolgen.

Bei allein räumlich begrenzten Systemen erfüllen insbesondere die Variablen Ortskoordinate \vec{r} und Linearimpuls \vec{P} diese Bedingung:

$$|\Delta \vec{r}| < \infty \Rightarrow |\Delta \vec{P}| > 0 \quad (7.27)$$

Die stationären Zustände räumlich begrenzter Systeme sind daher nicht nur keine Eigenzustände zur Ortskoordinate, sondern auch **keine** Eigenzustände zum Linearimpuls! Unabhängig davon, ob sich das räumlich begrenzte System in einem stationären oder in einem nicht stationären Zustand befindet, bei einer Messung z.B. von \vec{r} werden wir in jedem Fall von Messung zu Messung stark unterschiedliche Werte \vec{r} erhalten. Bezeichnen wir die relative Häufigkeit, mit der ein bestimmter Werte \vec{r} erhalten wird, mit $w(\vec{r})$, so enthält diese Funktion bereits einen Großteil der über den betrachteten Zustand angebbaren Information. Und berücksichtigen wir an dieser Stelle erneut die Notwendigkeit, dass das System in der Lage sein muss, Interferenzeffekte zu zeigen, so liegt es nahe, die Existenz einer komplexwertigen Funktion

$$\psi(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)| \cdot e^{i\varphi(\vec{r}, t)} \quad (7.28)$$

zu postulieren, die den Zustand des Systems **vollständig** beschreibt, und deren Betragsquadrat mit der soeben eingeführten Funktion $w(\vec{r})$ identisch ist. Dieser Wert wird meist als *Aufenthaltswahrscheinlichkeit* bezeichnet. Ich finde diese Formulierung nicht besonders gelungen, da sie eine in der Theorie nicht vorkommende Bewegung des physikalischen Objektes suggeriert, als ob sich nämlich das betrachtete Teilchen ganz schnell im Ortsraum bewegen würde und daher zum Zeitpunkt der Messung an jedem herausgegriffenen Ort mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit gerade dort angetroffen wird. Es gibt aber keinerlei experimentelle Fakten, die diese Vorstellung stützen. *Stationäre Zustände sind Zustände ohne Bewegung.* Das einzige, was sich in Abhängigkeit der Zeit verändert, ist die Phasenfunktion $\varphi(\vec{r}, t)$. Solange das System sich in diesem stationären Zustand $\psi(\vec{r}, t)$ befindet und sich nicht mit anderen physikalischen Systemen überlagert, wird durch diese zeitliche Änderung der Phase nichts verändert, was sich durch eine nachfolgende Messung an diesem System nachweisen ließe. Wir können sogar noch einen Schritt weiter gehen: Da stationäre Zustände Zustände ohne Bewegung sind, darf in diesem Fall der Betrag der Funktion $\psi(\vec{r}, t)$ nicht mehr explizit von der Zeit abhängen. Und da die geforderte Interferenzfähigkeit für das durch die Funktion $\psi(\vec{r}, t)$ beschriebene System **als ganzem** gelten muss und nicht nur für einen räumlichen oder zeitlichen Ausschnitt, kann andererseits die Phasenfunktion für stationäre Zustände nicht mehr vom Ort abhängen. D.h. die Funktion $\psi(\vec{r}, t)$ faktorisiert unter Trennung der Variablen \vec{r} und t und es gilt

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{-i\varphi(t)} \quad (7.29)$$

Das Minuszeichen im Exponenten der e -Funktion entspricht der in der Literatur üblichen Konvention. Ich verwende an dieser Stelle ausnahmsweise für 2 verschiedene

Größen denselben Buchstaben, nämlich für die Größen $\psi(\vec{r}, t)$ und $\psi(\vec{r})$. Dies entspricht der Vorgehensweise in den meisten Lehrbüchern. Ich gehe davon aus, dass hierdurch keine Verwirrung auftreten wird. Wegen der Forderung nach der Interferenzfähigkeit jedes physikalischen Systems muss die Phasenfunktion $\varphi(t)$ in der Gl. 7.29 überdies eine ganz bestimmte Struktur haben, nämlich die einer zeitperiodischen Funktion

$$\varphi(t) = \omega \cdot t + \varphi_0 \quad (7.30)$$

Denn nur dann ist es z.B. möglich, dass 2 Funktionen $\psi_1(\vec{r}, t)$ und $\psi_2(\vec{r}, t)$ an einer Stelle \vec{r}_0 nicht nur kurzzeitig, sondern auf Dauer identisch verschwinden,

$$\psi_1(\vec{r}_0, t) \equiv \psi_2(\vec{r}_0, t) \quad \forall t \quad (7.31)$$

Wie die zugehörige Kreisfrequenz ω mit den übrigen Kenngrößen des Systems zusammenhängt, müssen wir erst noch ergründen.

Die als *Wellenfunktion* bezeichnete Funktion $\psi(\vec{r}, t)$ hat eine verwandte Bedeutung wie die Teilchenanzahldichte $n(\vec{r}, t)$ in der klassischen Physik. Dort erhält man die Anzahl der in einem bestimmten Volumen ΔV zur Zeit t_1 befindlichen Teilchen durch Integration über dieses Volumen,

$$N(\Delta V, t_1) = \int_{\Delta V} n(\vec{r}, t_1) \cdot d^3r \quad (7.32)$$

Analog erhalten wir nun die Anzahl an Teilchen, die bei einer auf das Volumen ΔV beschränkten Messung *im Mittel* detektiert werden, ebenfalls durch Integration, allerdings nicht von $\psi(\vec{r}, t)$ sondern seines Betragsquadrates:

$$N(\Delta V, t_1) = \int_{\Delta V} \psi^*(\vec{r}, t_1) \cdot \psi(\vec{r}, t_1) \cdot d^3r \quad (7.33)$$

Dadurch ist insbesondere sicher gestellt, dass das Ergebnis immer reell ist. Handelt es sich bei dem betrachteten System um ein N_0 -Teilchen-System, muss gelten

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\vec{r}, t_1) \cdot \psi(\vec{r}, t_1) \cdot d^3r = N_0 \quad \forall t_1 \quad (7.34)$$

Zur Präzisierung und im Vorgriff auf die später erfolgende Behandlung komplizierterer Systeme wiederhole ich an dieser Stelle die Bedeutung und Anwendbarkeit dieser Funktion $\psi(\vec{r}, t)$: Sie kennzeichnet die komplexe Amplitude der Anzahlwahrscheinlichkeitsdichte eines physikalischen Systems aus N_0 Teilchen, das mit einer **einzigsten gemeinsamen derartigen Wellenfunktion** beschrieben werden darf. Was es mit dieser einschränkenden Formulierung auf sich hat, werden wir insbesondere im Abschnitt 7.8.2 erfahren. Gültig ist die einschränkende Bedingung insbesondere für Systeme mit $N_0 = 1$.

Es fehlt noch das Konzept, wie sich aus dieser Funktion $\psi(\vec{r}, t)$ der Wert einer beliebigen physikalischen Größe in dem durch diese Funktion beschriebenen Zustand errechnen lässt. In der klassischen Mechanik bestimmt man die aktuellen Werte von physikalischen Größen wie Energie, Impuls etc., indem man geeignete kinematische, also aus der Bewegung des Objektes resultierende Parameter mit objektspezifischen Parametern über eine funktionelle Beziehung verknüpft. Diese Verknüpfung entspricht also einer Abbildung eines endlich dimensionalen Raumes \mathbb{R}^N in den \mathbb{R}^1 (im Fall einer skalaren physikalischen Größe) bzw. in den \mathbb{R}^3 (im Fall einer vektoriellen Größe). Z.B. beträgt die kinetische Energie eines bewegten klassischen punktförmigen Teilchens

$$E_{kin}(M, \vec{v}) = \frac{M}{2} \cdot v^2 \quad (7.35)$$

M : Masse des Teilchens

v : Geschwindigkeit des Teilchens

v ist hierbei der o.a. kinematische und M der objektspezifische Parameter. In der neuen Mechanik haben physikalische Größen \mathbf{P} i.a. keinen einzigen (scharfen) Wert mehr, es sei denn, das System befindet sich in einem Eigenzustand dieser Größe \mathbf{P} . Der Größe \mathbf{P} wird also nicht mehr eine reelle Zahl zugeordnet, sondern wiederum eine komplexwertige Funktion $\lambda(\vec{r}, t)$, genau so wie wir es bei der physikalischen Größe Ortskoordinate \mathbf{r} bereits kennengelernt haben. Für die Berechnungsvorschrift für \mathbf{P} im Zustand $\psi(\vec{r}, t)$ benötigen wir daher eine Abbildung[§] des i.a. unendlich-dimensionalen Raumes der komplexwertigen Funktionen $\{\psi(\vec{r})\}$ in den i.a. ebenfalls unendlich-dimensionalen Raum der komplexwertigen Funktionen $\{\lambda(\vec{r})\}$,

$$\bar{\mathbf{P}}\psi(\vec{r}, t) = \lambda(\vec{r}, t) \quad (7.36)$$

Eine solche Abbildungsvorschrift bezeichnet man auch als einen *Operator*. Die Funktion $\bar{\mathbf{P}}\psi(\vec{r}, t)$ hat dann wieder die Bedeutung einer Gewichtsfunktion, nun für die physikalische Größe \mathbf{P} . Im mathematischen Sinne sind diese beiden Funktionsräume $\{\psi(\vec{r})\}$ und $\{\lambda(\vec{r})\}$ identisch, und $\bar{\mathbf{P}}$ ist demzufolge eine Abbildung dieses Raumes in sich. Im physikalischen Sinne unterscheiden sich diese beiden Räume in der zugeordneten physikalischen Einheit, auf die sich die jeweiligen Funktionen beziehen. $\bar{\mathbf{P}}$ ist daher dimensionsbehaftet, seine Dimension ist gleich der Dimension von λ dividiert durch die Dimension von ψ . Wenn $\psi(\vec{r}, t)$, wie bisher angenommen, die Bedeutung einer Aufenthaltswahrscheinlichkeits-Amplitude hat, besitzt diese Funktion die Dimension

$$\left(\frac{\text{Teilchenanzahl}}{\text{Volumen}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (7.37)$$

[§]Die in Gl. 7.29 auftretende Variable t fassen wir als einen bei dieser Berechnung festgehaltenen Parameter auf.

Wenn andererseits $\overline{\mathbf{P}}$ beispielsweise der Impulsoperator ist, hat $\lambda(\vec{r}, t)$ die Dimension

$$\left(\frac{\text{Impuls}}{\text{Volumen}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (7.38)$$

Demzufolge hat also der Impulsoperator $\overline{\mathbf{P}}$ die Dimension

$$\left(\frac{\text{Impuls}}{\text{Teilchenzahl}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (7.39)$$

Zur Erleichterung des Verständnisses der hier dargestellten Zusammenhänge erinnern wir uns nochmals an eine verwandte Situation aus der klassischen Physik: In einem klassischen System mit einer über das Volumen kontinuierlichen Verteilung von Teilchen, beschrieben durch die lokale Teilchenanzahldichte $n(\vec{r}, t)$ sei z.B. nach der Verteilung der Energie gefragt. Dann kann man zunächst die Energie pro Teilchen $e = \frac{\delta E}{\delta N}$ bestimmen. Diese ist i.a. wieder eine Funktion von \vec{r} , z.B. weil das (lokal gemittelte) Geschwindigkeitsquadrat dieser Teilchen eine Funktion von \vec{r} ist. Die in einem bestimmten Volumen vorhandene Energie beträgt dann

$$E(\Delta V) = \int_{\Delta V} n(\vec{r}) \cdot e(\vec{r}) \cdot d^3 r \quad (7.40)$$

Analog zu dieser klassischen Begriffsbildung berechnet sich nun in der neuen Mechanik der Wert einer physikalischen Größe \mathbf{P} als

$$P(\psi, t; \Delta V) = \int_{\Delta V} \lambda^*(\vec{r}, t) \cdot \lambda(\vec{r}, t) \cdot d^3 r \in \mathbb{R}^1 \quad (7.41)$$

wobei die Funktion $\lambda(\vec{r}, t)$ gemäß der Gl. 7.36 berechnet wird. Der Wert dieses Integrals ist, unabhängig von der mathematischen Struktur des Operators $\overline{\mathbf{P}}$, immer reell! Erfolgt die Integration über das gesamte Volumen V_0 mit der Eigenschaft

$$\vec{r} \notin V_0 \Rightarrow \lambda(\vec{r}, t) \equiv 0 \quad (7.42)$$

so gilt

$$\int_{V_0} \lambda^*(\vec{r}, t) \cdot \lambda(\vec{r}, t) \cdot d^3 r = P_0(t) \quad (7.43)$$

$P_0(t)$ ist der Erwartungswert für die Messung der zur Zeit t insgesamt in dem System enthaltenen Menge an der physikalischen Größe \mathbf{P} .

In besonderen Fällen vereinfacht sich die Gl. 7.36 zu

$$\overline{\mathbf{P}}\psi(\vec{r}, t) = p \cdot \psi(\vec{r}, t) \quad ; \quad p \in \hat{\mathbf{C}} \quad (7.44)$$

D.h. der Operator $\overline{\mathbf{P}}$ reproduziert die Funktion $\psi(\vec{r}, t)$ bis auf den konstanten (i.a. komplexen) Streckungsfaktor p . Entsprechend vereinfacht sich die Gl. 7.41 zu

$$\begin{aligned} P(\psi, t; \Delta V) &= \int_{\Delta V} p^* \cdot \psi^*(\vec{r}, t) \cdot p \cdot \psi(\vec{r}, t) \cdot d^3r \\ &= |p|^2 \cdot \int_{\Delta V} \psi^*(\vec{r}, t) \cdot \psi(\vec{r}, t) \cdot d^3r \end{aligned} \quad (7.45)$$

Zustände $\psi(\vec{r}, t)$ mit dieser Eigenschaft 7.44 bezeichnet man als *Eigenzustände* zum Operator $\overline{\mathbf{P}}$. In der Tat sind sie mit den bereits diskutierten Zuständen identisch, in denen diese Größe \mathbf{P} *scharf* ist. Den mathematisch sauberen Beweis für diese Behauptung werde ich noch im Laufe dieses Abschnitts liefern. Diese als *Eigenwertgleichung* bezeichnete Bedingung 7.44 ist jedoch i.a. nur für gewisse ausgezeichnete Zustände $\psi_i(\vec{r}, t)$ erfüllt, für die dann die reelle Zahl $|p|^2 = P$ jeweils ganz bestimmte Werte P_i annimmt. Auf diesem Wege also nimmt die *Quantisierung* Einzug in die Theorie der neuen Mechanik: Gehört die Größe \mathbf{P} zu dem durch das Axiom 11 definierten ausgezeichneten Satz von Variablen, so kann sie in stationären Zuständen des Systems nicht mehr (innerhalb gewisser Grenzen) beliebige, also kontinuierlich verteilte Werte annehmen, sondern nur noch ganz bestimmte, häufig diskret verteilte Werte.

Die bisher beschriebene Vorgehensweise bei der Konstruktion eines Operators $\overline{\mathbf{P}}$ entspricht einer Transformation von der *Ortsdarstellung* in die *P-Darstellung*. Sie ist durchaus üblich, meist wird jedoch die Berechnung der Werte physikalischer Größen anders vollzogen. Wenn man sich z.B. zur Beschreibung der Zustände für die Ortsdarstellung entschieden hat, will man auch bei der Berechnung der übrigen physikalischen Größen in dieser Ortsdarstellung verbleiben. Man fordert daher, dass gilt:

$$P(\psi, t; \Delta V) = \int_{\Delta V} \psi^*(\vec{r}, t) \cdot \mathbf{P}\psi(\vec{r}, t) \cdot d^3r \quad (7.46)$$

Man sucht also einen Operator $\mathbf{P} \neq \overline{\mathbf{P}}$, der lediglich auf die Funktion $\psi(\vec{r}, t)$ angewendet werden muss (und nicht auch noch auf $\psi^*(\vec{r}, t)$), um sodann über die Gl. 7.46 den korrekten Wert für P zu erhalten. Wir fassen diese Gl. 7.46 als eine **Forderung** auf; wir werden sie daher auch nicht versuchen zu beweisen, sondern uns hier darauf beschränken, eine wichtige Bedingung herzuleiten, die der neue Operator erfüllen muss, damit die Gl. 7.46 erfüllt werden kann. Hierbei konzentrieren wir uns sofort auf die Eigenzustände des Systems zu diesem neuen Operator \mathbf{P} :

$$\mathbf{P}\psi(\vec{r}, t) = P \cdot \psi(\vec{r}, t) \quad (7.47)$$

Für diese Zustände wird die Gl. 7.46 zu

$$\begin{aligned} P(\psi, t) &= \int \psi^*(\vec{r}, t) \cdot P \cdot \psi(\vec{r}, t) \cdot d^3r \\ &= P \cdot \int \psi^*(\vec{r}, t) \cdot \psi(\vec{r}, t) \cdot d^3r \end{aligned} \quad (7.48)$$

Dieser Ausdruck ist jedoch nur dann reell, wenn P reell ist. Wir kommen also zu dem wichtigen Schluss.

Axiom 13 *Für jedes physikalische System besitzt der Operator \mathbf{P} einer jeden messbaren physikalischen Größe P ausschließlich reelle Eigenwerte.*

Durch dieses Axiom ist die Struktur der zulässigen Operatoren stark eingeschränkt. Bei der mathematisch stringenten Formulierung der Quantenmechanik wird uns diese Aussage wichtige Dienste leisten.

Die Dimension der Operatoren \mathbf{P} ist offensichtlich nicht mit der der eingangs diskutierten Operatoren $\overline{\mathbf{P}}$ identisch. So hat der für die Ortsdarstellung geltende Impuls-Operator nicht die in der Gl. 7.39 angegebenen Dimension, sondern die Dimension

$$\frac{\text{Impuls}}{\text{Teilchenzahl}} \quad (7.49)$$

An dieser Stelle sei auch bereits angemerkt, dass die Rechenvorschrift 7.46 die Axiome eines *Skalarproduktes* zwischen den beiden Funktionen $\mathbf{P}\psi(\vec{r}, t)$ und $\psi(\vec{r}, t)$ erfüllt. Die mathematische Begriffsbildung des Skalarproduktes von Funktionen werden wir im Kapitel 7.4 näher kennenlernen. Ich bin bei der Einführung der allen messbaren physikalischen Größe zugeordneten Operatoren \mathbf{P} den (vordergründig als Umweg ansehbaren) Weg über die Operatoren $\overline{\mathbf{P}}$ insbesondere aus didaktischen Gründen gegangen: Hierdurch verliert die Begründung dieses Teil der Quantenmechanik viel von ihrer vordergründigen Willkür. In dem Skalarprodukt zur Berechnung der Erwartungswerte physikalischer Größen bleibt die Symmetrie der beiden Faktoren vollständig erhalten, und der Ausdruck $\overline{\mathbf{P}}\psi(\vec{r}, t)$ hat eine unmittelbar einsichtige Bedeutung. Auch die Modifizierung der Theorie beim Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik bleibt unmittelbar einsichtig: Die skalare Funktion $n(\vec{r})$ der Anzahldichte wird ersetzt durch das Produkt der komplexen Aufenthaltswahrscheinlichkeits-Amplitude mit ihrer komplex-konjugierten Funktion. Danach verlaufen alle weiteren Rechenschritte analog zum Vorgehen in der klassischen Mechanik.

Stationäre Zustände eines abgeschlossenen Systems müssen, wie bereits ausführlich diskutiert, insbesondere Eigenzustände bzgl. der Energie sein. Der Energieoperator wird aus historischen Gründen als *Hamilton-Operator* \mathbf{H} bezeichnet. Für ihn lautet Gl. 7.47 also

$$\mathbf{H}\psi(\vec{r}) = E \cdot \psi(\vec{r}) \quad , \quad E \in \mathbb{R}^1 \quad (7.50)$$

und wird nach Erwin Schrödinger (* 1857 in Wien; † 1961 ebenda) als die *zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung* bezeichnet. Sie bildet i.a. den Ausgangspunkt zur Berechnung der stationären Zustände eines physikalischen Systems.

Es fehlt nun insbesondere noch der Weg zur Bewegungsgleichung der neuen Mechanik, also die der Gl. 3.914 entsprechende Beziehung. Einen ersten Hinweis auf deren Struktur erhalten wir durch die Form der Gl. 7.30 in Verbindung mit der Gl. 7.50. Zusammengefasst sagen diese beiden Gl. aus, dass bei stationären Zuständen die zeitliche Ableitung der Funktion $\psi(\vec{r}, t)$ diese bis auf den Faktor $-i \cdot \omega$ reproduziert,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi(\vec{r}) \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t}) = -\psi(\vec{r}) \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t} \cdot i \cdot \omega \quad (7.51)$$

Dieses ist die Bewegungsgleichung für den Spezialfall stationärer Zustände,

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi_{\text{stat.}}(\vec{r}, t) = -i \cdot \omega \cdot \psi_{\text{stat.}}(\vec{r}, t) \quad (7.52)$$

Wir suchen also nach einer verallgemeinerten Form dieser Gl. 7.52, die für beliebige Zustände gültig ist und bei stationären Zustände in die Form der Gl. 7.52 übergeht. Hierzu verwenden wir ein experimentelles Ergebnis der im Abschnitt 7.2.1 beschriebenen Quantisierung ruhemasseloser Strahlung, nämlich den Zusammenhang zwischen Energie und Frequenz von Photonen,

$$\varepsilon = h \cdot f = \hbar \cdot \omega \quad (7.53)$$

Für Photonen lautet daher die Gl. 7.52

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi_{\text{stat.}}(\vec{r}, t) = \frac{-i}{\hbar} \cdot \varepsilon \cdot \psi_{\text{stat.}}(\vec{r}, t) \quad (7.54)$$

Für beliebige Zustände kann diese Gl. noch nicht korrekt sein, da dann der Wert ε des betrachteten Zustands nicht definiert ist. Die einfachste Verallgemeinerung von Gl. 7.54, die für Eigenzustände von \mathbf{H} in diese übergeht, ist

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial |k\rangle}{\partial t} = \mathbf{H} |k\rangle \quad (7.55)$$

Dieses ist die gesuchte Bewegungsgleichung der Quantenmechanik. Sie wird als die *zeitabhängige Schrödinger-Gleichung* bezeichnet. Sie ist für beliebige Zustände gültig und bildet eines der Axiome der Quantenmechanik. Wir verzichten an dieser Stelle darauf, sie zu *beweisen*, d.h. auf andere, letztlich ebenfalls als Axiome zu akzeptierende Aussagen zurückzuführen. Für stationäre Zustände besagt die Gl. 7.55

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} (\psi(\vec{r}) \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t}) = \hbar \cdot \omega \cdot (\psi(\vec{r}) \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t}) = E \cdot (\psi(\vec{r}) \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t}) \quad (7.56)$$

D.h. die Beziehung

$$E = \hbar \cdot \omega \quad (7.57)$$

gilt nicht nur für Photonen, sondern allgemein für die stationären Zustände eines jeden physikalischen Systems. E ist dabei die Gesamtenergie des betrachteten Systems einschließlich der Ruheenergie $E_0 = E(v = 0)$. Wegen des Zahlenwertes von \hbar bleibt die Kreisfrequenz ω , mit der die Phase eines derartigen stationären Zustands oszilliert, nur solange in Größenordnungen, die einer experimentellen Beobachtung zugänglich sind, wie die Energie dieses Zustands nicht zu groß wird. Dieses ist die Ursache dafür, dass die Quantenmechanik insbesondere eine Theorie zur Beschreibung kleiner Teilchen ist, deren Masse und Anregungsenergien nicht so groß sind, dass die zugehörigen Frequenzen nicht mehr beobachtbar wären. Quantenmechanische Interferenzexperimente mit massebehafteten makroskopischen Objekten sind aus demselben Grund nur möglich, wenn deren Energie ausreichend scharf ist, also bei extrem tiefen Temperaturen. Nur dann ist gesichert, dass 2 derartige Objekte beim Durchlaufen einer Versuchsanordnung ihre Phase relativ zu einander nur dann verändern, wenn sie einen unterschiedlich langen Weg zurückgelegt haben.

Offenbar deutet sich an dieser Stelle auch bereits an, auf welchem Wege wir ein Kriterium definieren können für die Entscheidung, ob ein System als klassisches nicht-quantenmechanisches System behandelt werden darf, oder ob die Gesetzmäßigkeiten der Quantenmechanik beachtet werden müssen. Es ist dies die thermisch bedingte Unschärfe in der Phase der betrachteten Objekte im Verhältnis zu den innerhalb der Messanordnung auftretenden (systematischen) Phasendifferenzen.

Stationäre Zustände eines physikalischen Systems können also durch eine komplexwertige Funktion der Struktur

$$|k\rangle = |\psi(\vec{r})| \cdot e^{i\varphi_0} \cdot e^{i\omega \cdot t} \quad (7.58)$$

eindeutig beschrieben werden. φ_0 ist eine (i.a. ; s.u.) weder zeit- noch ortsabhängige Konstante. Der Zahlenwert der Größe φ_0 hat auf die Energie-Eigenwerte keinen Einfluss, er verändert aber auch nicht den Erwartungswert irgendeiner anderen physikalischen Größe in diesem Zustand. Daher stellt sich die Frage, ob diese Größe überhaupt irgendeine physikalische Relevanz besitzt. Hierzu erinnern wir uns an die generellen Aussagen zur physikalischen Bedeutung einer komplexwertigen physikalischen Größe (Abschnitt 4.2.7). Auch die komplexwertige Größe $|k\rangle$ erhält ihre vollständige Bedeutung erst durch Angabe der *Referenzschwingung* identischer Frequenz ω , auf die sich dann auch die Phasendifferenz φ_0 bezieht. Konsistent mit dieser Forderung ist die folgende Interpretation:

Da jeder quantenmechanische Energie-Eigenzustand $|k\rangle$ bzgl. der Phasenlage φ_0 entartet ist, erfolgt jede Phasenmessung ohne Veränderung des φ_0 nicht enthaltenden Teils $|\psi(\vec{r})| \cdot e^{i\omega \cdot t}$ der Wellenfunktion. Diese Phasenmessung ist nur durch die Ankopplung einer Referenzschwingung identischer Frequenz an das betrachtete physikalische System möglich. Nach einer solchen Messung ist die Phase φ_0 des Zustands

$|k\rangle$ nicht mehr unbestimmt, sondern hat einen scharfen Wert, der dann durch eine 2. Messung abgefragt werden kann. Ergebnis ist dann immer derselbe Wert wie bei der 1. Messung, es sei denn, das quantenmechanische System hat eine Wechselwirkung erfahren, die diese Phase verändert.

Die Phase φ_0 eines quantenmechanischen Energie-Eigenzustands ist also eine physikalische Realität, auch wenn sie in vielen Fällen die betrachteten Prozesse nicht beeinflusst. Es gibt aber Prozesse, in denen diese Phase relevant wird. Das wohl berühmteste Beispiel sind die Josephson-Effekte (Abschnitt 7.15.3) in der Supraleitung, ein weiteres der Aharonov-Bohm-Effekt (Abschnitt 7.7.4) .

An dieser Stelle nehme ich kurz die Diskussion der quantenmechanischen Prinzipien einer *Messung* wieder auf: Die hierbei betrachtete beliebig herausgegriffene Größe werde ich wieder mit \mathbf{P} bezeichnen. Das Ergebnis einer einzelnen P -Messung ist **immer** ein scharfer Wert, die Unschärfe kommt erst bei der Wiederholung einer derartigen Messung ins Spiel. Daher liegt es nahe anzunehmen, dass durch eine derartige Messung das System in einen Eigenzustand zu dieser Größe \mathbf{P} überführt wird, nämlich in genau den Eigenzustand, dessen Eigenwert auch das Ergebnis dieser einzelnen Messung ist. D.h. direkt im Anschluss an diese Messung ist der Wert von \mathbf{P} scharf und gleich diesem Messergebnis. Diese Annahme ist nicht beweisbar, sie steht aber im Einklang mit allen bisher bekannt gewordenen experimentellen Ergebnissen. Damit ist wohl noch immer unklar, welche Bedingungen genau ein experimenteller Aufbau erfüllen muss, damit man die durch ihn bewirkte Kopplung als eine *Messung* der Größe \mathbf{P} interpretieren darf. Offenbar handelt es sich aber immer um die Ankopplung eines makroskopischen Systems an das quantenmechanische System. Wir können aber auch ohne deren weitere Präzisierung die *Messung* bereits als eines der Basis-Begriffe für den Aufbau der Quantenmechanik verwenden, ohne in grundsätzliche logische Schwierigkeiten zu geraten.

Nun fehlt insbesondere noch das Konzept, nach dem die konkreten Strukturen der quantenmechanischen Operatoren gefunden werden können. Die wichtigste Hilfe hierfür ist das Korrespondenzprinzip. Wir verbinden diese Forderung an das asymptotische Verhalten der Quantenmechanik mit der bereits entwickelten Berechnungsvorschrift für den Mittelwert einer physikalischen Größe P in einem Zustand $\psi(\vec{r})$, s. Gl. 7.46. Wenn wir nun ein massebehaftetes Teilchen betrachten, das sich in einem Zustand befindet, den man in ausreichender Näherung auch mit den Mitteln der klassischen Mechanik beschreiben darf, dann ist dieses Teilchen wieder lokalisiert und die quantenmechanisch berechneten Mittelwerte aller seiner physikalischen Größen müssen wegen des Korrespondenzprinzips in die analogen klassisch berechneten Größen übergehen. Zumindest in diesem Grenzfall also müssen für die quantenmechanischen Mittelwerte physikalischer Größen dieselben Gesetze gelten wie in der klassischen Mechanik. Wir gehen an dieser Stelle noch einen Schritt weiter, allerdings wieder ohne hierfür eine logisch stringente Begründung geben zu können. Wir fordern, dass diese Bedingung allgemeine Gültigkeit hat:

Axiom 14 Die Zusammenhänge zwischen den quantenmechanisch berechneten Mit-

telwerten physikalischer Größen erfüllen alle Gesetze der klassischen Mechanik.

Dieses Axiom hat in der Literatur die Bezeichnung *Ehrenfest-Theorem* erhalten, benannt nach dem Physiker *Paul Ehrenfest* (* 1880 in Wien; † 1933 in Amsterdam). Betrachten wir z.B. ein Teilchen, das in klassischer Näherung den Energie/Impuls-Zusammenhang

$$E = \frac{P^2}{2 \cdot M} \quad (7.59)$$

besitzt, so muss in der Quantenmechanik für dieses Teilchen in einem beliebigen Zustand ψ gelten:

$$\langle \psi | \mathbf{E} \psi \rangle = \frac{1}{2 \cdot M} \cdot \langle \psi | \mathbf{P}^2 \psi \rangle \quad (7.60)$$

Hieraus folgt unmittelbar

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2 \cdot M} \cdot \mathbf{P}^2 \quad (7.61)$$

In ähnlicher Weise lassen sich die Zusammenhänge zwischen verschiedenen Operatoren für andere konkrete Beispiel ebenfalls unmittelbar aus dem Korrespondenzprinzip folgern. Es verbleibt dann insbesondere noch die Aufgabe, die Struktur für die Operatoren einiger Grundgrößen zu bestimmen, so des Linear-Impulses und des Drehimpulses. Ich werde die Vorgehensweise am Beispiel des Impulsoperators skizzieren:

Zur Orientierung betrachten wir wieder einen Spezialfall, nämlich den der *ebenen Welle* (s. Gl. 7.5)

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 \cdot e^{-i \cdot (\omega \cdot t - k \cdot x)} \quad (7.62)$$

und differenzieren diese Gl. nach der Ortskoordinate x :

$$\frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial x} = -i \cdot \psi_0 \cdot e^{-i \cdot (\omega \cdot t - k \cdot x)} \cdot i \cdot k = k \cdot \psi(\vec{r}, t) \quad (7.63)$$

(XXX: Der an dieser Stelle noch fehlende Text zur Orientierung am Beispiel der ebenen Welle ist noch nicht verfügbar.)

In der Lagrangeschen Formulierung der klassischen Mechanik (XXX: Bezug ergänzen) resultiert die Existenz der Erhaltungsgröße Impuls aus der Forderung der Invarianz der Bewegungsgleichungen gegenüber einer translatorischen Verschiebung des Koordinatensystems. Die bei einer infinitesimalen translatorischen Verschiebung des Koordinatensystems resultierende Veränderung eines Zustands $|k\rangle$ wollen wir formal durch den Operator $\delta \mathbf{T}$ beschreiben,

$$|k\rangle^{(t)} = \delta \mathbf{T} |k\rangle \quad (7.64)$$

Stellen wir nun im Rahmen der Quantenmechanik dieselbe Invarianzforderung, dann bedeutet das, dass eine Verschiebung des Koordinatensystems den Hamilton-Operator

unverändert lässt. Wie man unmittelbar nachrechnen kann, ist dies gleichbedeutend mit der Forderung

$$\delta \mathbf{T}(\mathbf{H} |k\rangle) = \mathbf{H}(\delta \mathbf{T} |k\rangle) \quad (7.65)$$

Aus dieser Bedingung lässt sich, zusammen mit einer erneuten Verwendung des Korrespondenzprinzips, bereits die konkrete Form des Impulsoperators,

$$\mathbf{P} = -i \cdot \hbar \cdot \nabla = -i \cdot \hbar \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x}; \frac{\partial}{\partial y}; \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (7.66)$$

erschließen. Wir werden diese Schritte im einzelnen im Abschnitt 7.7.2 nachvollziehen und für die übrigen Operatoren in ähnlicher Weise vorgehen.

Die mathematisch saubere Formulierung all dieser Zusammenhänge ist der Inhalt des Kapitels 7.5. Hierfür werde ich jedoch zunächst die dafür erforderlichen mathematischen Grundlagen bereitstellen.