

# 1 Einleitung

## 1.1 Klassische Mechanik und Quantenmechanik

Die Entwicklung der Grundzüge der Quantenmechanik in den ersten drei Jahrzehnten des 20. Jahrhunderts markiert den Beginn der modernen theoretischen Physik. Im Gegensatz zur streng deterministischen klassischen Mechanik ist die Quantenmechanik eine probabilistische Theorie mikroskopischer Objekte, die die maximal mögliche Information über das betrachtete physikalische System liefert.

Sind die Elemente der Newton'schen Bewegungsgleichungen<sup>1</sup> bekannt und ist der Anfangszustand des jeweiligen mechanischen Systems vollständig präpariert, dann ist auch die weitere Entwicklung des klassischen Systems vollständig bestimmt. Die klassische Mechanik erlaubt aufgrund der Newton'schen Axiome (1687) eine auf makroskopischen Skalen konsistente Konstruktion der Bewegungsgleichungen. Es gibt aber im Rahmen dieser Theorie kein Konzept, das in schlüssiger Weise die Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Massepunkten erklärt, die Wechselwirkung wird also als gegeben hingenommen. Im Prinzip ist im Rahmen der klassischen Mechanik jede Kraft, die nicht gegen die Newton'schen Axiome verstößt, zulässig.

Erst die Entwicklung der klassischen Feldtheorien, insbesondere die von J.C. Maxwell 1864 axiomatisch begründete Elektrodynamik und die auf A. Einstein zurückgehende allgemeine Relativitätstheorie (1915), erlaubten es, zwei fundamentale Formen der Wechselwirkung – die elektromagnetische und die Gravitationswechselwirkung – durch eigenständige, außerhalb der klassischen Mechanik stehende Theorien zu begründen und die Mechanik mit anderen, nicht-mechanischen Phänomenen<sup>2</sup> zu verbinden.

Physikalische Felder sind nicht nur Träger der Wechselwirkungen zwischen Partikeln, sondern haben eine eigene, experimentell überprüfbare Dynamik. Sie sind damit Elemente der physikalischen Realität<sup>3</sup> und als solche im Rah-

- 1) Bei hohen Geschwindigkeiten sind diese durch relativistische, also lorentz-invariante, Bewegungsgleichungen zu ersetzen.
- 2) z. B. die Ausbreitung elektromagnetischer Wellen
- 3) und nicht nur geeignete Hilfsmittel, wie das Kraftfeld der klassischen Mechanik

men einer vollständigen Theorie auch beschreibbar. Mit dem Vorliegen einer solchen Theorie schien das physikalische Weltbild an sich abgeschlossen. Neue Entwicklungen konnten höchstens noch von einer Verfeinerung des theoretischen Apparats und von der Entdeckung neuer fundamentaler Wechselwirkungen<sup>4</sup> kommen. Aufgrund dieser Einstellung war Ende des 19. Jahrhunderts die vorherrschende Meinung, dass alle irgendwie beobachtbaren Größen von dieser vollständigen Theorie zu beschreiben und in ihrer raumzeitlichen Entwicklung vorherzusagen sein müssten.

Zu Beginn des 20. Jahrhunderts war man zuversichtlich, auch die mikroskopischen Prozesse im Rahmen der klassischen Theorie verstehen zu können. Dazu zählte vor allem die Erklärung bereits bekannter, aus klassischer Sicht bisher aber noch nicht verstandener Phänomene, z. B. die Intensitätsverteilung der Strahlung schwarzer Körper, die Existenz scharfer Linien in den Emissions- und Adsorptionsspektren von atomaren oder molekularen Gasen oder die rätselhafte Stabilität der Atome. Von letzteren war nach den Rutherford'schen Streuexperimenten (1911) ja bekannt, dass sie aus einem schweren Atomkern und Elektronen bestehen. Da zwischen den Atomkernen im Vergleich zu ihren Abmessung riesige Abstände bestehen, wurde dieser Zwischenraum den Elektronen zugewiesen. Die Coulomb-Wechselwirkung zwischen Kern und Elektronen forderte daher eine Art Planetenmodell für die Atome, mit der Konsequenz, dass es sich bei den Atomen letztendlich um strahlende Dipole handeln musste, die permanent Energie abgeben und deshalb instabil sein müssten.

Je genauer man jedoch die mikroskopischen Phänomene experimentell studierte, um so mehr gerieten die Erkenntnisse in Widerspruch zu den Erklärungen der klassischen Theorie. Wir werden im nachfolgenden Kapitel auf einige dieser grundlegenden Experimente eingehen und den daraus folgenden radikalen Wandel im physikalischen Denken weg von der klassisch deterministischen und hin zu einer dem Wesen nach probabilistischen Theorie verfolgen.

Die Aussagen der Quantenmechanik setzen auf mikroskopischen Skalen die klassische Mechanik außer Kraft. Weder der Begriff der Trajektorie noch der eindeutige Zusammenhang zwischen der Präparation eines Systems und den Resultaten anschließender Messungen an diesem System lässt sich aufrechterhalten. So ist es unmöglich, an einem quantenmechanischen Objekt gleichzeitig Messungen des Impulses und des Orts mit beliebiger Genauigkeit durchzuführen. Man kann je nach Experiment entweder Ort oder Impuls eines Teilchens mit einer vorgegebenen Genauigkeit messen und muss da-

4) Tatsächlich wurden in der ersten Hälfte des 20. Jahrhunderts zwei weitere fundamentale Wechselwirkungen entdeckt, die schwache und die starke Wechselwirkung. Sie waren aber nicht mehr sinnvoll durch klassische Felder zu beschreiben.

für Ungenauigkeiten bei der jeweils anderen Größe in Kauf nehmen. Dieses Phänomen ist im Rahmen der klassischen Mechanik weder vorgesehen noch kann es in diese Theorie eingebaut werden, ohne sie grundlegend zu ändern. Man könnte natürlich aus klassischer Sicht einwenden, dass (i) das Gesamtsystem aus mikroskopischem Objekt und Messinstrument nie beliebig genau präpariert werden kann, so dass Unschärfen prinzipiell nicht vermieden werden können, und dass (ii) jede Messung auch einen Einfluss auf das mikroskopische Objekt ausübt, sodass prinzipiell eine unkontrollierbare, zufällige Einflussnahme auf das mikroskopische Objekt besteht. Doch beide Argumente lassen sich durch geeignete Experimente recht eindrucksvoll widerlegen. So gibt es quantenmechanische Messgrößen mit diskretem Charakter, z. B. die Spinorientierung von Elektronen, die eindeutig eingestellt werden können. Andererseits kann man an mikroskopischen Objekten auch Messungen vornehmen, ohne die Einstellung der gemessenen Größen zu stören.

Ein typisches Beispiel sind die in Kapitel 9 beschriebenen Stern-Gerlach-Versuche. Diese Experimente wurden zunächst mit Strahlen aus Silberatomen durchgeführt, die in ihrer äußersten Elektronenschale ein s-Elektron besitzen, während alle inneren Schalen vollständig besetzt sind. Das Silberatom hat also einen Spindrehimpuls  $\hbar/2$  und keinen Bahndrehimpuls. Für das mit dem Spin gekoppelte magnetische Moment ergeben sich in einem Magnetfeld zwei Einstellmöglichkeiten. In einem inhomogenen magnetischen Feld erfahren die Atome des Strahls eine Kraft, die für die beiden entgegengesetzt orientierten magnetischen Spinnmomente entgegengesetzt ist. In diesem inhomogenen magnetischen Feld spaltet der Atomstrahl in zwei Teilstrahlen auf, von denen jeder genau einer der beiden Spinorientierungen entspricht. Bezüglich dieser Orientierungen sind die Atome der beiden Teilstrahlen also vollständig präpariert. Man kann jetzt mit einem niederenergetischen Strahlungsfeld die Atome in jedem der Teilstrahlen registrieren. Bei dieser Messung ändern sich zwar Energie und Impuls der Atome geringfügig, die Spineinstellung bleibt aber erhalten. Damit lässt sich in einem einfachen Experiment der quantenmechanische Spinzustand jedes Atoms genau vermessen, ohne dabei die Spineinstellung zu ändern. Man kann sich leicht davon überzeugen, wenn man nach der Messung die Atome jedes Teilstrahls in eine zweite Stern-Gerlach-Apparatur derselben Orientierung leitet. Es wird dann keine weitere Aufspaltung beobachtet, d. h. alle Atome eines Teilstrahls haben auch nach der Messung ihre Spineinstellung behalten. Verdünnen wir den einfallenden Strahl soweit, dass die Atome einzeln durch die Apparatur treten, dann sind wir in der Lage, die Spineinstellung jedes einzelnen Atoms zu messen, ohne dass diese von der Messung beeinflusst wird.

Es bleibt damit die Tatsache, dass mikroskopische Objekte nicht mehr wie klassische Objekte zu behandeln sind. Damit ändert sich aber auch die physikalische Problemstellung. Es kann jetzt nicht mehr darauf ankommen, ein

Messergebnis exakt vorherzusagen, sondern die Möglichkeiten der Resultate und die Wahrscheinlichkeit ihres Auftretens festzulegen. Gleichzeitig werden wir aber auch feststellen, dass für verschiedene Messgrößen nicht mehr alle klassisch erlaubten Messwerte auch quantenmechanisch zulässig sind. So kann beispielsweise ein klassischer harmonischer Oszillator jede beliebige Energie oberhalb der Ruheenergie<sup>5</sup> annehmen. Ein quantenmechanischer Oszillator kann dagegen nur ganz bestimmte, diskrete Energiewerte annehmen. Eine quantenmechanische Theorie muss es erlauben, diese potentiellen Messwerte vorherzusagen.

Diese wenigen Beispiele mögen genügen, um auf die Probleme aufmerksam zu machen, die in der Quantenmechanik auftreten und sie von der klassischen Mechanik abheben. Auf der mikroskopischen Skala wird die Quantenmechanik die klassische Mechanik als Theorie ablösen. Wir erwarten natürlich, dass die klassische Mechanik gewissermaßen als Grenzfall der Quantentheorie auf makroskopischen Skalen bestehen bleibt.

Aus heutiger Sicht erfüllt die Quantenmechanik alle von einer guten physikalischen Theorie geforderten Bedingungen. Sie ist widerspruchsfrei zu allen bekannten Experimenten und Beobachtungen, und es existiert eine eindeutige Zuordnungsvorschrift der in den Experimenten qualitativ und quantitativ beobachteten physikalischen Realität zu den in der Theorie verwendeten Größen. Für die Anwendung der Theorie sind keine aus ihr selbst hervorgehenden Grenzen<sup>6</sup> ersichtlich, und schließlich ist der verwendete mathematische Apparat wohlverstanden und geschlossen.

Sicher ist die Quantentheorie im Gegensatz zur klassischen Mechanik weit aus weniger anschaulich. Aber eine fundamentale Theorie mikroskopischer Prozesse muss auch sich nicht mit den alltäglichen, aus der makroskopischen Welt gewonnenen Erfahrungen veranschaulichen und erklären lassen.

## 1.2

### Aufbau des Bands „Quantenmechanik 1“

Das erste Ziel dieses Buchs wird es sein, auf der Basis historischer Experimente die Notwendigkeit einer grundlegend von der klassischen Mechanik abweichenden Beschreibung mikroskopischer Phänomene zu begründen. Dazu werden wir in Kapitel 2 zuerst solche Experimente diskutieren, aus denen zwangsläufig folgt, dass elektromagnetische Strahlungsfelder quantisiert sind, d. h. Energie nur in einzelnen, wohldefinierten Portionen abgeben oder aufnehmen können, und dass diesen Quanten Teilchen, die sogenannten Photonen, zugeordnet werden können.

<sup>5</sup> Die Ruheenergie wird gewöhnlich auf den Wert 0 geeicht.

<sup>6</sup> siehe dazu auch Abschnitt 1.3

Anschließend werden wir Ergebnisse von Experimenten vorstellen, die in einer Art Umkehrung dieser Aussagen zeigen, dass die physikalischen Eigenschaften scheinbar klassisch mechanischer Systeme ebenfalls eine Quantenstruktur besitzen und dass punktförmige Partikel, z. B. Elektronen, in bestimmten Experimenten ausgeprägte Welleneigenschaften besitzen. Beide Gruppen von Experimenten legen nahe, dass Wellen- und Korpuskulareigenschaften duale Erscheinungsformen sind, von denen je nach Art der Beobachtung der eine oder andere Aspekt sichtbar wird. Anschließend werden wir diese Erkenntnisse benutzen, um den Begriff der Wellenfunktion einzuführen und einige erste Elemente einer quantenmechanischen Beschreibung zu formulieren. Mit der Born'schen Wahrscheinlichkeitsinterpretation werden wir schließlich auch den Schlüssel zur Deutung der Wellenfunktion und ihrer Verbindung zur physikalischen Realität einführen.

Im nachfolgenden Kapitel 3 werden wir uns mit der Dynamik der Wellenfunktion befassen und dabei die Schrödinger-Gleichung einführen. Diese Gleichung spielt in der Quantenmechanik eine ähnliche Rolle wie die Maxwell'schen Feldgleichungen in der Elektrodynamik. Sie bestimmt die Zeitentwicklung sich selbst überlassener quantenmechanischer Systeme. Aus mathematischer Sicht ist die Schrödinger-Gleichung eine komplexe partielle Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit und zweiter Ordnung im Ort. Ihre Lösung führt – speziell für autonome Systeme, d. h. Systeme, deren Wechselwirkungsterme nicht explizit von der Zeit abhängen – auf ein Eigenwertproblem. Wir werden uns im zweiten Teil dieses Kapitels mit der Lösung solcher, vornehmlich eindimensionaler, Eigenwertprobleme befassen.

In Kapitel 4 werden wir den notwendigen mathematischen Apparat zum Verständnis der Quantenmechanik bereitstellen. Eine zentrale Rolle spielt hierbei die Formulierung quantenmechanischer Zusammenhänge im Hilbert-Raum auf der Basis von Zustandsvektoren und Operatoren. Im Rahmen dieses Kalküls werden wir hier die axiomatische Darstellung der Quantenmechanik im Sinne der Kopenhagener Interpretation formulieren und, davon ausgehend, die Verbindung zwischen der abstrakten Beschreibung im Hilbert-Raum und der physikalischen Realität herstellen. Dazu werden quantenmechanische Zustände als Träger der vollständigen Information und Operatoren als Repräsentanten von Observablen, d. h. von physikalisch messbaren Größen, als Grundbegriffe der Quantentheorie eingeführt. Insbesondere wollen wir in diesem Kapitel auf die physikalische Äquivalenz der verschiedenen Darstellungen quantenmechanischer Systeme und die Transformationen zwischen diesen Darstellungen eingehen und wichtige fundamentale Relationen besprechen, z. B. die verallgemeinerte Unschärferelation oder den Zusammenhang zwischen dem quantenmechanischen Zustand einerseits und der Realisierung von Messergebnissen andererseits.

In den Kapiteln 5 und 6 werden wir zwei exakt lösbare quantenmechanische Probleme untersuchen, den harmonischen Oszillator und das Zentralkraftproblem. Dabei wollen wir, ausgehend von fundamentalen Kommutatorrelationen, zwei für die Quantenmechanik typische Techniken in den Vordergrund stellen, nämlich die Verwendung von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren und die Benutzung von Symmetrieargumenten. Im ersten Fall werden wir zwangsläufig auf die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators geführt, im zweiten Fall können wir den Winkelanteil der Eigenzustände jedes Zentralkraftproblems allgemeingültig ableiten.

Exakte Lösungen quantenmechanischer Probleme sind relativ selten. Für die meisten realen Systeme muss man mit geeigneten Näherungslösungen arbeiten. Wir werden in Kapitel 7 einige dieser Techniken – insbesondere störungstheoretische Methoden und Variationsverfahren – kennenlernen und an ausgewählten Beispielen untersuchen. Von besonderer Bedeutung ist in diesem Zusammenhang die zeitabhängige Störungstheorie, mit deren Hilfe wir unter anderem die Auswahlregeln für die erlaubten optischen Übergänge zwischen verschiedenen Energieniveaus der Atomspektren charakterisieren können.

In Kapitel 8 werden wir auf das quantenmechanische Verhalten eines geladenen quantenmechanischen Teilchens in einem klassischen elektromagnetischen Feld eingehen. Insbesondere spielt hierbei die aus der Elektrodynamik bekannte Eichinvarianz der Felder eine wesentliche Rolle. Wir werden zeigen, dass sich bei einer konsistenten Formulierung der Schrödinger-Gleichung die Eichinvarianz auch auf alle quantenmechanischen Observablen übertragen lässt. Mit der quantitativen Berechnung einiger wichtiger quantenmechanischer Phänomene in magnetischen Feldern, z. B. dem normalen Zeeman-Effekt oder dem Auftreten von Landau-Niveaus, werden wir dieses Kapitel abschließen.

Eine wichtige Eigenschaft vieler quantenmechanischer Partikel ist der Spin. Diese aus der klassischen Mechanik nicht bekannte Eigenschaft wollen wir in Kapitel 9 untersuchen. Neben der Erweiterung der Schrödinger-Gleichung zur Pauli-Gleichung wollen wir vor allem drei aus der Atomspektroskopie bekannte Erscheinungen theoretisch untersuchen, deren Ursache der Spin der Elektronen ist – den anomalen Zeeman-Effekt, die Feinstrukturaufspaltung und den Paschen-Back-Effekt.

Kapitel 10 bietet einige einführende Aspekte der Theorie quantenmechanischer Vielteilchensysteme. Hier geht es uns einerseits darum, ein tieferes Verständnis für den wichtigen Begriff der quantenmechanischen Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen und die hieraus folgenden Konsequenzen für die Wellenfunktion von Vielteilchensystemen zu vermitteln, andererseits wollen wir einige Näherungsverfahren vorstellen, mit deren Hilfe man die sehr kom-

plizierten Vielteilchenprobleme näherungsweise auf effektive Einteilchenprobleme zurückföhren kann.

In Kapitel 11 werden wir uns mit einigen grundlegenden Problemen der Quantenmechanik befassen, die hauptsächlich mit dem probabilistischen Charakter der Quantenmechanik und ihrem Verhältnis zu einer deterministischen Theorie zusammenhängen. Eine wichtige Rolle spielt dabei eine detaillierte Analyse des Messprozesses, d. h. der Vorschriften, die eine Übertragung der mikroskopischen quantenmechanischen Information in eine makroskopische, objektiv erkennbare Realisierung der Messapparatur gewährleisten. Außerdem befassen wir uns relativ ausführlich mit dem Kollaps der Wellenfunktion als Folge der Beobachtung eines Quantenobjekts und einigen hieraus folgenden, aus klassischer Sicht überraschend erscheinenden Konsequenzen, z. B. dem Einstein-Rosen-Podolski-Paradoxon. Am Ende dieses Kapitels geben wir mit der Skizzierung der Grundideen der Quantenkryptographie, der Quantenteleportation und des Quantencomputers einen Ausblick auf moderne Forschungsrichtungen der Quantenmechanik.

### 1.3

#### Grenzen der Quantenmechanik

Die in diesem Band behandelte Schrödinger-Gleichung als Evolutionsgleichung quantenmechanischer Systeme ist eine nicht-relativistische Theorie. Sie ist deshalb invariant gegenüber der Galilei-Transformation, nicht aber gegenüber Lorentz-Transformationen zwischen Inertialsystemen.

Abgesehen von diesem Problem, das wir in Band IV mit der Einführung der Dirac-Gleichung beheben werden, zeigt die Quantenmechanik bis heute keine grundsätzlichen Unstimmigkeiten zwischen Experiment und Theorie.

Grenzen findet man eher in dem für ein konkretes Problem vorliegenden Modell. Wollen wir beispielsweise die Wechselwirkung zwischen elektromagnetischer Strahlung und einem Elektron beschreiben, dann wird man gewöhnlich das Strahlungsfeld im Sinne der klassischen Elektrodynamik verstehen, obwohl es sich eigentlich um ein Quantenfeld handelt. Berücksichtigt man den Quantencharakter<sup>7</sup>, dann entstehen gewisse Korrekturen zu dem halbklassischen Modell, das wir in diesem Band behandeln werden. Aber auch die quantenfeldtheoretischen Korrekturen können Schritt für Schritt durch Beachtung weiterer Effekte, z. B. der Spineigenschaften von Elektronen und Photonen, immer mehr verbessert werden. Hier liegt das eigentliche Problem quantenmechanischer Theorien: Je mehr Details wir berücksichtigen, d. h. je höher die experimentelle Auflösung der energetischen, räumlichen oder zeitlichen Skalen wird, desto komplizierter wird die theoretische

<sup>7</sup>) Wir werden darauf in Band IV zurückkommen.

Beschreibung des jeweiligen Phänomens und desto mehr unterschiedliche Wechselwirkungsterme müssen berücksichtigt werden.

Während dieses Problem sich aber mit einer Verfeinerung der Theorie sukzessive eliminieren lässt und höchstens zu immer schwierigeren mathematischen Problemen führt, ist das zweite große Problem der Quantenmechanik mit der Theorie des Messprozesses verbunden. Wie wir in Kapitel 11 zeigen werden, ist dieser im Rahmen der Quantenmechanik tatsächlich noch nicht voll verstanden. Es gibt, auch im Rahmen der Kopenhagener Deutung, sogar die Vermutung, dass gewisse Aspekte wie der Kollaps der Wellenfunktion bei der Messung eines Quantensystems innerhalb der Quantenmechanik nicht befriedigend erklärt werden können.

In ihrem Kern ist die Quantenmechanik aber bis heute eine zur physikalischen Realität widerspruchsfreie Theorie, die zwar ständig Erweiterungen durch neue und detailliertere Modelle erfährt, in ihren Grundaussagen bisher aber keiner Korrektur bedarf.