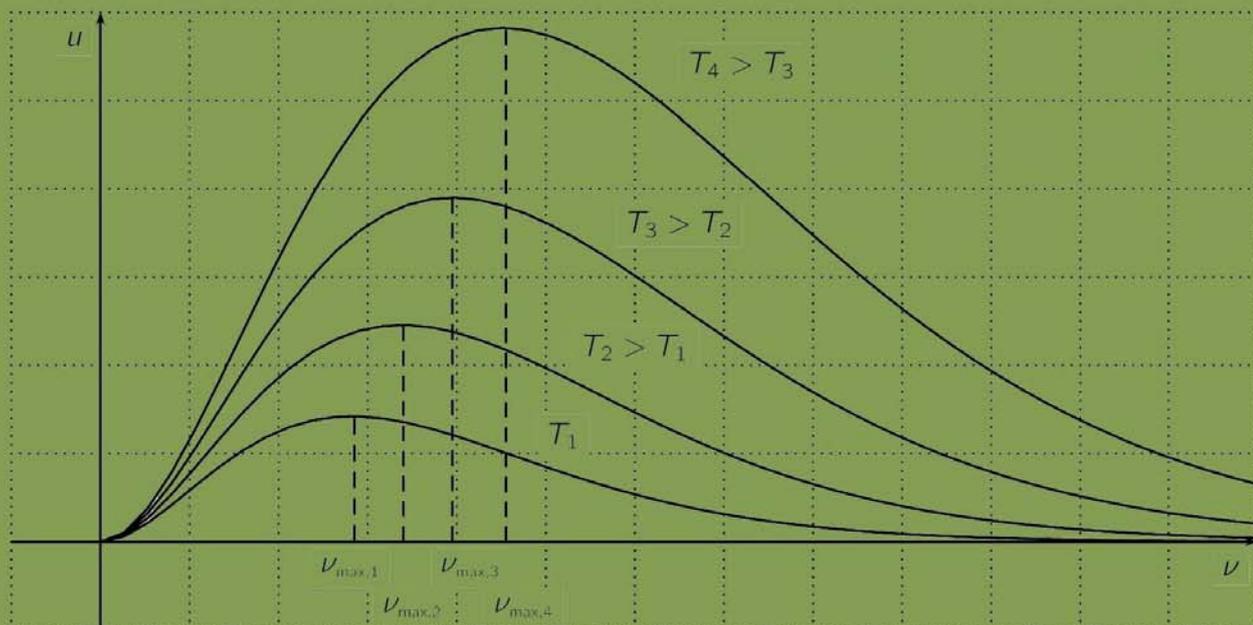

Teilchen, Wellen, Wahrscheinlichkeiten

Die Anfänge der Quantenmechanik







Markus Vogt

Teilchen, Wellen, Wahrscheinlichkeiten

Die Anfänge der Quantenmechanik



Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

1. Aufl. - Göttingen: Cuvillier, 2011

978-3-86955-886-8

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2011
Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen
Telefon: 0551-54724-0
Telefax: 0551-54724-21
www.cuvillier.de

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen.

1. Auflage, 2011

Gedruckt auf säurefreiem Papier

978-3-86955-886-8



Inhaltsverzeichnis

Vorwort	5
Einleitung	7
1 Der Untergang der klassischen Physik	10
1.1 Einige Grundideen der klassischen Physik	11
1.1.1 Klassische Teilchen und klassische Felder	12
1.1.2 Ein wenig theoretische Mechanik	13
1.1.2.1 Das Hamiltonsche Prinzip	14
1.1.2.2 Lagrange-Formalismus	16
1.1.2.3 Die Hamiltonschen Gleichungen	19
1.1.2.4 Kanonische Transformationen	21
1.1.2.5 Hamilton-Jacobi-Theorie	24
1.1.2.6 Wirkungsvariable und Winkelvariable	28
1.2 Die Grenzen der klassischen Physik	29
1.2.1 Spektrale Verteilung von Hohlraumstrahlung	30
1.2.2 Spezifische Wärme von Festkörpern	31
1.2.3 Stabilität der Atome	33
1.2.3.1 Die Atomhypothese	34
1.2.3.2 Das Rutherfordsche Atommodell	35
1.2.3.3 Instabile Atome	40
1.2.4 Was ist mit dem Photoeffekt?	48
2 Die ältere Quantenmechanik	52
2.1 Die Plancksche Strahlungsformel	52
2.1.1 Die ursprüngliche Ableitung durch Planck	52
2.1.2 Anwendungen der Planckschen Strahlungsformel	60
2.1.3 Weitere Ableitungen der Planckschen Strahlungsformel	62
2.1.3.1 Quantenhypothese, aber richtig	63
2.1.3.2 Die erste Quantisierung des Strahlungsfeldes	65
2.1.3.3 Einsteins zweite Herleitung	68
2.2 Die Anfänge der Tieftemperaturphysik	71



2.3	Die Lichtquantenhypothese	74
2.3.1	Vom Rechenrick zur physikalischen Realität	75
2.3.2	Einsteins Fluktuationsformel	78
2.3.3	Photoeffekt und Quantentheorie	89
2.3.4	Der Compton-Effekt	91
2.4	Die Atommodelle von Bohr und Sommerfeld	94
2.4.1	Das Bohrsche Atommodell	95
2.4.2	Das Sommerfeldsche Atommodell	99
2.5	Die Anfänge der Quantenstatistik	118
2.5.1	Die Bose-Einstein-Statistik	118
2.5.2	Einsteins Theorie der idealen Gase	124
2.5.3	Elektronenspin und Pauli-Prinzip	132
2.5.4	Die Fermi-Dirac-Statistik	140
2.5.5	Bosonen und Fermionen	143
3	Die neuere Quantenmechanik	147
3.1	Materiewellen	148
3.2	Die ersten Pfadintegrale	151
3.3	Matrizenmechanik	154
3.3.1	Die Matrizenformulierung der Quantenmechanik	155
3.3.1.1	Orts-, Impuls- und Hamiltonmatrizen	156
3.3.1.2	Energieniveaus und Übergangsfrequenzen	160
3.3.2	Das Wasserstoffatom als Beispiel	164
3.3.2.1	Runge-Lenz-Vektor	165
3.3.2.2	Direkter Weg mit Matrizenmechanik	168
3.4	Wellenmechanik	171
3.4.1	Ein vorweggenommener Alternativvorschlag	171
3.4.2	Der Weg zur Wellenmechanik	174
3.4.3	Die zeitabhängige Version der Wellenmechanik	182
3.4.4	Versuche anschaulicher Deutungen	183
3.4.5	Zerfließende Wellenpakete	186
3.5	Sind Matrizen- und Wellenmechanik äquivalent?	193
3.6	Hilberträume und abstrakte Quantenmechanik	201
3.7	Die Wahrscheinlichkeitsdeutung	203
3.7.1	Eine Anmerkung mit Folgen	204
3.7.2	Die Lehrbuchfassung der Wahrscheinlichkeitsdeutung	207
3.7.3	Zwei Arten von Wahrscheinlichkeiten	213
3.7.4	Vollständigkeit der Quantenmechanik	219
3.8	Unschärferelationen	223
3.8.1	Unschärferelation für Ort und Impuls	223
3.8.1.1	Heisenbergs ursprüngliche Version	223
3.8.1.2	Erste Herleitungen	227



3.8.2	Die exakte Form der Unschärferelationen	233
3.8.2.1	Unschärferelationen korrekt interpretiert	233
3.8.2.2	Funktionalanalytische Herleitung	236
3.8.3	Die Schrödingersche Unschärferelation	239
3.8.4	Unschärferelationen für n Observable	243
3.8.5	Was ist mit Energie und Zeit?	246
3.8.5.1	Ein Phantom geht um	246
3.8.5.2	Die Zeit als kanonische Variable?	248
3.9	Erste Interpretationen der Quantenmechanik	255
3.9.1	Die Ensemble-Interpretation	256
3.9.2	Der Kollaps der Wellenfunktion	258
3.9.3	Die Kopenhagener Deutung	260
3.9.3.1	Niels Bohr	261
3.9.3.2	Werner Heisenberg	269
3.9.3.3	Carl Friedrich von Weizsäcker	283
3.9.4	Kritik der Interpretationen	287
3.9.4.1	Alles nur Statistik?	287
3.9.4.2	Klassische Meßgeräte und nichtklassische Meßobjekte? . . .	293
4	Ausblick und philosophische Bewertung	302
	Literaturverzeichnis	307



Vorwort

Ein Buch über die Anfangsphase der Quantenmechanik bedarf der Rechtfertigung, denn abgesehen davon, daß viele Lehrbücher einführende historische Darstellungen beinhalten, liegen seit geraumer Zeit sehr gute und zum Teil auch sehr umfangreiche Spezialveröffentlichungen zu diesem Thema vor. Exemplarisch seien hier die Monographien von Enders [259] und Röseberg [743] sowie das neunbändige Standardwerk von Mehra und Rechenberg [590] - [598] genannt – exemplarisch deshalb, weil sie zeigen, was sich das vorliegende Buch nicht zum Ziel gesetzt hat. Häufig werden, wie im ersten Beispiel, ausgewählte historische Abläufe aus heutiger Sicht und im Hinblick auf aktuelle Anwendungen diskutiert, wie im zweiten viel Wert auf philosophische und wenig auf formale Details gelegt, oder aber wie im dritten der geschichtliche Werdegang der Theorie mit fachlicher Präzision und in epischer Breite dargestellt.

All das ist hier nicht beabsichtigt. Stattdessen wird die historische Entwicklung der Quantenmechanik in ihrer Anfangsphase aus der Sicht der mathematischen Physik dargestellt. Anfangsphase bedeutet dabei, daß es um die Zeit von den allerersten Anfängen bis unmittelbar vor der Einführung der Hilbertraum-Quantenmechanik geht. Die Perspektive der mathematischen Physik legt den Schwerpunkt auf die formale, mathematische Struktur der entstehenden Theorie.

Entsprechend findet die Leserin oder der Leser detaillierte Darstellungen der wesentlichen Resultate, die in einem Zeitraum von rund dreißig Jahren von der Planckschen Strahlungsformel zur ausgereiften, praktisch bewährten Quantenmechanik führten, wie sie sich unmittelbar vor Johann von Neumanns mathematischer Runderneuerung und dem dadurch initiierten Übergang zur mathematischen Quantenmechanik der modernen Zeit präsentierte. Das beinhaltet teilweise auch heute noch viel zitierte, aber im Detail großteils vergessene Berechnungen, Herleitungen, Irrungen und Wirrungen, die keinesfalls einheitlich, sondern auf unterschiedlichen Pfaden zum nur vorläufig abgeschlossenen Stand Ende der zwanziger, Anfang der dreißiger Jahre des vorigen Jahrhunderts führten. Viele der hier dargestellten Themen findet man vergleichbar detailliert nur in der Originalliteratur oder in zeitgenössischen Lehrbüchern, und dort nicht selten in schwer lesbarer Form. Teilweise zeigen die Überlegungen der Pioniere eine verblüffende Aktualität und sind daher nach wie vor von naturwissenschaftlichem Interesse, teilweise sind sie längst überholt oder haben sich als falsch erwiesen, doch auch dann ist es sehr lohnend, sich damit zu beschäftigen, sowohl, was physikalische Krea-



tivität als auch mathematische Virtuosität angeht. Auch Kenner der Materie dürften dabei noch den einen oder anderen für sie neuen Sachverhalt antreffen.

Die Fokussierung auf die mathematische Struktur der Entwicklung der Quantenmechanik hat natürlich Auswirkungen auf den Schwierigkeitsgrad der Inhalte dieses Buches. Es setzt die Kenntnis der wesentlichen Grundlagen der elementaren nichtrelativistischen Quantenmechanik und der zugehörigen Mathematik voraus und ersetzt insbesondere keine Einführung in diese. Die Originalschreibweise wurde in großem Umfang beibehalten, aber überall dort behutsam angepaßt, wo es für die Verständlichkeit notwendig erschien. Um einen vernünftigen Umfang zu gewährleisten, verzichteten wir auf eine Bereitstellung des verwendeten mathematischen Apparats; das würde einerseits nicht der Intention des Buches entsprechen und ist andererseits in der reichhaltig vorhandenen entsprechenden Fachliteratur problemlos verfügbar. Stattdessen, und weil die Physik stets auch eine Interpretation des verwendeten Formalismus erfordert, ergänzen wir die Darstellung der Entwicklung der formalen Aspekte der Quantenmechanik durch eine kritische Beschreibung der ersten Interpretationen der neuen Theorie. Da die philosophische Diskussion nach wie vor anhält, liefert eine abschließende Vorstellung der Auffassung des Autors einen aktuellen Beitrag zu diesem Diskurs.

Rottweil, im September 2011

Markus Vogt

E-Mail-Adresse des Autors: Vogt.Markus@t-online.de

Einleitung

Die Quantenmechanik ist nicht nur die erfolgreichste, sondern auch die grundlegendste Teildisziplin der modernen Physik, sofern man diejenigen Versuche der vereinfachten Beschreibung der Realität betrachten will, die gewissermaßen bereits zur Serienreife entwickelt sind. Zum einen bewährt sie sich von Beginn ausnahmslos; es gibt Schätzungen, wonach inzwischen circa eine Milliarde physikalische Phänomene bekannt sind, die von der Quantenmechanik korrekt beschrieben werden, Ausnahmen sind bis jetzt keine aufgetreten. Andererseits liegen fundamentalere Theorien zur Zeit nur in Form von Spekulationen und teilweise auch mathematisch längst noch nicht verstandenen Modellen vor. Und selbst wenn man solche mitberücksichtigt, gibt es starke Indizien dafür, daß auch sie in wenn auch weitgehend noch nicht voll verstandener Form in die Quantenmechanik eingegliedert werden müssen. In diesem Sinn ist letztere in ihrer allgemeinsten Form nicht einfach eine Theorie, sondern ein Theorienrahmen, man könnte auch sagen, eine Sprache, in der physikalische Theorien – auch solche, die noch ihrer Entdeckung harren – zu formulieren sind.

Entsprechend groß ist die Verbreitung der Quantenmechanik in Forschung wie Lehre. Ihre physikalische Bedeutung reicht vom mikroskopischen Bereich der Elementarteilchen und Atome über mesoskopische Skalen insbesondere bei der Festkörperphysik bis zu makroskopischen und sogar kosmologischen Sachverhalten, wenn auch letztere ebenfalls noch spekulativen Charakter haben. Dabei hat die Theorie schon vor Jahrzehnten ihren rein akademischen Charakter abgelegt. Spätestens die nach dem zweiten Weltkrieg aufkommende und sich seither geradezu exponentiell entwickelnde Halbleitertechnologie mit der durch sie ausgelösten dritten industriellen Revolution machte aus der Quantenmechanik eine physikalische Grundlagendisziplin mit absoluter Alltagsbedeutung. Ein weiterer Entwicklungsschub in Richtung angewandte Physik ist in Gestalt der experimentellen und inzwischen auch technischen Anwendung verschränkter Systeme seit knapp drei Jahrzehnten zu verzeichnen, wobei inzwischen in einzelnen Bereichen sogar kommerzielle Fortschritte gemacht werden. Die Grundlagenphysik kommt dabei auch nicht zu kurz, da hier von Anfang an vormals reine Gedankenexperimente nach und nach real durchführbar wurden, und auch hier bestätigen sich die Aussagen der Quantenmechanik ausnahmslos. Die Lehre zog mit etwas Verspätung nach; in der physikalischen Hochschulbildung ist die Quantenmechanik inzwischen seit mehreren Jahrzehnten ein zentraler Bestandteil, und in der Schulphysik läßt sie sich zumindest in der gymnasialen Oberstufe nicht mehr umgehen.

Dabei darf der ganze Erfolg und die Anwendbarkeit der Quantenmechanik nicht darüber hinwegtäuschen, daß die Zeit, in der dieselbe ebenfalls noch auf sehr wackligen, spekulativen Beinen stand, noch nicht sehr lange zurückliegt. Diese Phase zeichnete sich durch eine erhebliche Diskrepanz zwischen der Solidität der physikalischen und derjenigen der mathematischen Argumentation aus. Während erstere aus einer tiefen Orientierungslosigkeit nur langsam herausfand und diese zumindest in der hier beschriebenen Epoche oder vielleicht sogar bis heute nicht völlig überwunden hat, wies letztere schon davor ein überaus hohes Niveau auf, was natürlich an der vorausgehenden Blütezeit der klassischen mathematischen Physik wie auch an den spektakulären Erfolgen der Mathematik des neunzehnten und frühen zwanzigsten Jahrhunderts selbst lag. Es ist unter anderem auch dieser Gegensatz, der den besonderen Reiz und auch das wissenschaftliche Interesse der Beschäftigung mit der Frühphase der Quantenmechanik ausmacht.

Läßt man sich auf die Argumentationslinien der Altvorderen ein, unabhängig davon, ob die Resultate auch heute noch Bestand haben oder wieder verworfen werden mußten, lernt man nicht nur faszinierende Schaustücke der angewandten Mathematik und mathematischen Physik kennen, ein historisch-kritisches Nachvollziehen der inhaltlichen Entwicklung der Quantenmechanik ist auch ein wichtiges Hilfsmittel, wenn nicht gar eine Voraussetzung, um zu einem vertieften Verständnis derselben in ihrer modernen Form zu gelangen. Die Quantenmechanik ist bei all ihrer technisch-formal-anwendungsorientierten Ausgereiftheit aus philosophischer Sicht wie kaum eine andere Disziplin der Physik nach wie vor Gegenstand intensivster Diskussionen, und eine Beteiligung an diesem Diskurs steht auf einem viel solideren Fundament, wenn man die Beschäftigung mit dem mathematischen Apparat der Theorie und dessen Interpretation durch eine Betrachtung ihres geschichtlichen Werdegangs ergänzt.

Ein zusätzlicher Aspekt sei eigens erwähnt. Die einschlägigen Begriffe, Argumente und Überlegungen der anfänglichen Entwicklung der neuen Theorie werden teilweise nach wie vor fleißig erwähnt, man beruft sich darauf und verwendet sie häufig dem Namen nach unverändert. Gleichzeitig werden die Originalarbeiten außerhalb der ausgewiesenen wissenschaftsgeschichtlichen Forschung verbreitet wenig bis gar nicht gelesen. Das führt sehr oft zu falsch dargestellten Aspekten der frühen Quantenmechanik, die zudem auch in den meisten Fällen weiter tradiert werden. Beispiele sind die Herleitung der Planckschen Strahlungsformel, Einsteins Lichtquantenhypothese oder die Heisenbergsche Unschärferelation; in diesen und anderen Fällen stehen selbst in Lehrbüchern verbreitet merkwürdige Dinge, und eine klärende Beschreibung der historischen Abläufe samt der zugehörigen physikalischen Sachverhalte ist hier unbedingt erforderlich, zumal letztere vielfach auch heute von großer Wichtigkeit sind. Die Leserin oder der Leser wird möglicherweise gelegentlich feststellen, daß sich manche geschichtlichen Details in ihrer Originalfassung von heute weit verbreiteten Darstellungen beträchtlich unterscheiden.

Das vorliegende Buch gliedert sich wie folgt: Nach einer kurzen Wiederholung einiger zentraler Begriffe der klassischen Mechanik im ersten Kapitel erfolgt zunächst, den mengenmäßigen Hauptteil darstellend, im zweiten und dritten Kapitel eine Diskussion der sogenannten älteren und neueren Quantenmechanik. Diese Unterteilung, die in der wissenschaftshistori-

schen Rezeption der Quantenmechanik von Beginn an üblich war, berücksichtigt den tiefen Einschnitt, der 1925 stattfand. Zuvor versuchte man teilweise mathematisch elegant, aber physikalisch mehr schlecht als recht den Schwierigkeiten, mit denen sich die klassische Physik am Ende des neunzehnten Jahrhunderts in zunehmender Weise konfrontiert sah, durch Reparaturmaßnahmen zu begegnen. Das heißt, man nahm im wesentlichen ad hoc Änderungen an der klassischen Mechanik vor, ohne diese grundlegend zu revidieren und ohne wirkliche physikalische Begründungen liefern zu können, wodurch zwar zum Teil, aber nie auf Dauer Erfolge erzielt werden konnten und ein globales Gefühl des Unverständnisses zurückblieb. Dieses wurde erst durch die fundamentalen Neuerungen ein wenig überwunden, die danach eingeführt wurden und die klassische Mechanik zunächst zumindest im mikroskopischen Bereich zugunsten einer neuen Mechanik komplett außer Kraft setzten. Der Erfolg im Hinblick auf die Voraussagbarkeit experimenteller Ergebnisse stellte sich umgehend ein und war überwältigend; die philosophische Durchdringung der Theorie konnte damit jedoch nicht schritthalten, was sich von Anfang an durch umfangreiche Diskussionen über die richtige Interpretation der neuen Theorie bemerkbar machte. Das dritte Kapitel berücksichtigt auch dies durch eine zusätzliche kritische Darstellung der frühen Deutungen der neueren Quantenmechanik, die sich teilweise auch heute noch, wenngleich vielfach unhinterfragt, einer großen Anhängerschaft erfreuen. Abschließend und ergänzend liefert das vierte Kapitel eine philosophische Einschätzung der aktuellen Interpretationen der Quantenmechanik einschließlich der Darstellung der Auffassung des Autors hierzu. Das ist unter anderem auch als Diskussionsanstoß zu verstehen.

Das ausführliche Literaturverzeichnis ist natürlich in erster Linie ein Nachweis über die verwendeten Quellen. Gleichzeitig bildet es auch eine Zitatsammlung, welche die für die Entwicklung der Quantenmechanik entscheidenden Originalarbeiten sicherlich nicht vollständig, aber doch in großem Umfang enthält. Die begleitende Lektüre solcher Arbeiten ist sehr zu empfehlen.

Kapitel 1

Der Untergang der klassischen Physik

Es dürfte allgemein bekannt sein, daß die Physik bereits bei den griechischen Philosophen der Antike eine frühe Hochkonjunktur erlebte; mit Namen wie Aristoteles, Archimedes und anderen lassen sich wissenschaftliche Errungenschaften in Verbindung bringen, die zumindest teilweise auch heute noch in Lehrbüchern zu finden sind. Allerdings blieben die damaligen Erkenntnisse im Wesentlichen auf die rein deskriptive Ebene beschränkt, wie etwa im Fall des Archimedes, oder aber sie gingen von Grundannahmen, also Axiomen aus, die aus heutiger Sicht als völlig unhaltbar betrachtet werden müssen, wie beispielsweise bei Aristoteles. Insbesondere war den griechischen Philosophen und lange Zeit auch deren Nachfolgern die Idee einer experimentellen Untersuchung der Natur fremd.

Entsprechend müssen wir bei der Suche nach den Anfängen von dem, was wir heutzutage als *klassische Physik* betrachten, später einsteigen. So gesehen beginnt die Physik im heutigen Sinne im siebzehnten Jahrhundert. Sie nahm ihren Anfang bei Galileo Galilei, der als erster den experimentellen Charakter dieser Wissenschaft erkannte, wenn er auch einen erheblichen Teil seiner Experimente, von denen er berichtete, vermutlich gar nicht wirklich durchgeführt hat, und, vor allem wenn man die mathematischen Aspekte in den Vordergrund stellt, bei Isaac Newton, der gewissermaßen die theoretische Physik begründete. Hier findet sich der Ausgangspunkt der klassischen Physik. In der Folgezeit entwickelte sie sich und entwickelt sich genaugenommen auch weiterhin zu einem gigantischen Theoriegebäude von zum Teil erheblicher mathematischer Komplexität¹. Die klassische Physik stellte jahrhundertlang die Grundlage der physikalischen Weltbeschreibung dar, hatte triumphale Höhenflüge beispielsweise in der Beschreibung der Bewegung von Himmelskörpern, in der Mechanik deformierbarer Medien, der Maxwellschen Elektrodynamik, der Thermodynamik und statistischen Mechanik und insbesondere und abschließend in der speziellen und der allgemeinen Relativitätstheorie. Dennoch sollte sie mit Ausnahme der Relativitätstheorien zu Beginn des 20. Jahrhunderts komplett zu Fall kommen, was bekanntlich mit der Entstehung und Entwicklung der Quantenmechanik das Aufkommen eines vollkommen neuen und im Vergleich zu früher extrem anderen, fremdartigen Weltbildes einleitete. Das heißt natürlich nicht, daß klassische physi-

¹Wesentliche Bereiche der Analysis und auch anderer Teilgebiete der Mathematik entstanden durch Antriebe aus der Physik und wären ohne diese überhaupt nicht denkbar.

klassische Theorien heutzutage keine Bedeutung mehr hätten; im Gegenteil haben sie das sehr wohl, und es wird weiterhin ausgiebig auf solchen Gebieten geforscht und gearbeitet. Es ist jedoch seit dieser Zeit klar, daß es grundlegendere physikalische Prinzipien gibt und die klassische Physik nur eine teilweise hervorragende, teilweise völlig unbrauchbare Näherung dieser fundamentaleren Physik darstellt.

1.1 Einige Grundideen der klassischen Physik

In der Geschichte der Physik gab es immer wieder tiefgreifende Neuansätze und Änderungen von bis dahin wohletablierten Vorstellungen. So gesehen ist die Entwicklung der Quantenmechanik seit Beginn des 20. Jahrhunderts eigentlich nur ein weiteres Beispiel in einer langen Reihe von Neuentwicklungen im Laufe der Entstehung der Physik, wie wir sie heute kennen. Dennoch spielt die Quantenmechanik hier eine Sonderrolle. Denn sie bedeutete eine weitaus radikalere Umwälzung des physikalischen Weltbildes als jede andere neue Theorie bis jetzt, die spezielle und die allgemeine Relativitätstheorie eingenommen. Es ist nicht Gegenstand des vorliegenden Buches, die Tragweite dieser Umwälzung in ihrem vollem Umfang darzustellen; um sie aber ein wenig einschätzen zu können, ist es hilfreich, sich mit ihren Voraussetzungen zu beschäftigen. Daher beginnen wir mit einem kurzen Rückblick auf die Schwierigkeiten, mit denen die klassische Physik am Ende des 19. und zu Beginn des 20. Jahrhunderts zu kämpfen hatte und die unmittelbar zur Entstehung der Quantenmechanik führten.

Im späten 19. Jahrhundert waren sich die meisten Physiker darüber einig, daß man die wesentlichen Gesetzmäßigkeiten der Natur wohl verstanden habe, daß also mit anderen Worten die grundlegende naturwissenschaftliche Arbeit wenigstens aus physikalischer Sicht im wesentlichen erledigt sei und es fortan nur noch darum gehen könne, die Details weiter auszuarbeiten. Diese Situation läßt sich besonders schön durch die bekannte und vielzitierte Anekdote über den Schüler Max Planck illustrieren, der 1874 als Sechzehnjähriger nach dem Abitur den Physiker Johann Gustav Philipp von Jolly fragte, ob er ihm denn empfehlen könne, Physik zu studieren, und der daraufhin von diesem den Rat erhielt, letzteres lieber bleiben zu lassen. Denn in der Physik, so von Jolly, sei wohl mit spektakulären Neuentdeckungen nicht mehr zu rechnen, sodaß dort nicht mehr viel zu tun bleibe. Auch James Jeans äußerte im Jahre 1900 bei einer passenden Gelegenheit die Meinung, bis auf zwei Wölkchen am Himmel, nämlich der Natur des Äthers und der Ultraviolett-Katastrophe bei der Lichtemission, sei in der Physik inzwischen eigentlich alles völlig klar [463]². Diese Haltung war in der physikalischen Szene im wesentlichen repräsentativ.

Wie gründlich man mit dieser Auffassung daneben lag, sollte sich alsbald zeigen, und zwar tatsächlich gleich in zwei verschiedenen Bereichen. Der eine betraf die Beschreibung der Raum-Zeit und mündete im Laufe der nächsten Jahrzehnte in der Entwicklung der speziellen und der allgemeinen Relativitätstheorie. Der andere betraf das Verhalten von Licht und

²Diese beiden Wölkchen erwiesen sich wenig später als aufkommende schreckliche Stürme, denn es handelte sich dabei natürlich um nichts anderes als um Vorboten der Relativitätstheorie und der Quantentheorie [794].

Materie im mikroskopischen Bereich. Dort schienen die aus der makroskopischen Welt wohl-bekanntesten und in unzähligen Fällen mit überwältigendem Erfolg angewandten physikalischen Gesetze nicht mehr zu funktionieren. Dieser Bereich ist der uns interessierende, denn er führte bekanntermaßen zur Entwicklung der Quantenmechanik.

Gerade weil die Entwicklung der Quantentheorie in wissenschaftshistorisch typischer Weise durch das Versagen eines Vorgängertheorien-Gebäudes, dem der klassischen Physik, zustande kam und noch immer kommt, ist es jedoch für die Beschäftigung mit den Anfängen dieser Entwicklung von großer Bedeutung, zuvor die Vorgängertheorien in ihren wesentlichen Aspekten kennenzulernen. Wir beginnen daher unseren Ausflug in die Kinderstube der Quantenmechanik mit einem Überblick über die wichtigsten Grundideen der klassischen Physik, um vor allen Dingen auch zu klären, was unter diesem Begriff überhaupt zu verstehen ist.

1.1.1 Klassische Teilchen und klassische Felder

Wird in einer klassischen Theorie ein physikalischer Vorgang beschrieben, so geschieht dies üblicherweise mit Hilfe von Bewegungsgleichungen. Hierunter hat man Differentialgleichungen zu verstehen, deren Lösungsfunktionen das zeitliche beziehungsweise raumzeitliche Verhalten der relevanten dynamischen Variablen, also der zur Beschreibung des betrachteten Systems verwendeten Größen repräsentieren. Je nach betrachtetem System können solche Bewegungsgleichungen sehr unterschiedlich aussehen, von gewöhnlichen Differentialgleichungen in der Punktmechanik bis zu komplizierten gekoppelten Systemen partieller Differentialgleichungen in klassischen Feldtheorien. Gemeinsam ist ihnen allen jedoch, daß die physikalisch interessierenden Lösungen nach Vorgabe geeigneter Rand- und Anfangsbedingungen für alle Zeiten eindeutig bestimmt sind; das ist ein unmittelbar aus allgemeinen mathematischen Eigenschaften von Differentialgleichungen folgender Sachverhalt. Beispielsweise erhält man in der klassischen Mechanik gewöhnliche Differentialgleichungen zweiter Ordnung in der Zeit, deren Lösungen durch Angabe ihrer Anfangswerte sowie derjenigen ihrer ersten Ableitungen eindeutig festliegen. Entsprechend lassen sich bei Feldtheorien die Lösungen der nun partiellen Differentialgleichungen beispielsweise durch Wahl der Werte auf dem Rand des räumlichen Gebietes, auf dem sie definiert sein sollen, festlegen. Etwas von mathematischer Ausdrucksweise befreit besagt dieser Sachverhalt nichts anderes, als daß das Verhalten eines physikalischen Systems aus klassischer Sicht durch die es beschreibenden Gesetze sowie durch Festlegung des Anfangszustandes dieses Systems in alle Ewigkeit festgelegt ist. Natürlich darf man dabei nicht davon ausgehen, sämtliche klassischen Bewegungsgleichungen auch tatsächlich lösen zu können; das Gegenteil ist der Fall, nicht nur in der Vergangenheit, sondern auch heutzutage können nur die wenigsten konkreten Systeme exakt beschrieben werden, und man ist bei den weitaus meisten klassischen physikalischen Problemen auf Näherungsverfahren angewiesen. Dabei steht jedoch stets die Vorstellung im Hintergrund, daß die exakten Lösungen von Bewegungsgleichungen existieren, wenn sie auch nicht stets konkret angegeben werden können.

Man hat es folglich in der klassischen Physik zumindest prinzipiell mit einem absoluten Determinismus zu tun. Die Überzeugung, alles sei durch die Gesetze der Physik vorausbestimmt,

hatte natürlich tiefgreifende naturphilosophische und erkenntnistheoretische Konsequenzen; in ihrer extremsten Ausprägung veranlaßte sie Pierre Simon de Laplace zur Erfindung des nach ihm benannten Laplaceschen Dämons. Würde man danach, grenzenlose analytische Fähigkeiten vorausgesetzt, die physikalischen Gesetze sowie den genauen Anfangszustand des Universums kennen, so könnte man jedes beliebige Ereignis der gesamten Zukunft überall im Universum vorausberechnen. Diese Vorstellung bildete die Grundlage des mechanistischen Weltbilds, das bis zum beginnenden 20. Jahrhundert vorherrschte und über seine naturwissenschaftliche Bedeutung hinaus auch aus soziologischer Hinsicht von gar nicht zu überschätzendem Einfluß war; man denke etwa an die in der Zeit der Industrialisierung vorherrschende Grundhaltung eines grenzenlosen Vertrauens in vermeintlich unbegrenzte Möglichkeiten des technischen Fortschritts mit allen zugehörigen Auswirkungen auf den Lauf der Geschichte.

1.1.2 Ein wenig theoretische Mechanik

Die Quantentheorie entstand in ihrer frühen Form in einem Umfeld, in dem die analytische Mechanik so wohletabliert wie hochentwickelt war. Entsprechend stellte sie den technischen Ausgangspunkt und das Handwerkszeug dar, von wo und womit neue Entwicklungen bis auf weiteres bewerkstelligt wurden. Daher sollten wir zunächst einen Blick auf einige formale Aspekte der klassischen Mechanik werfen. Wir werden das in sehr geraffter, auf die einfachsten Aspekte beschränkter Form tun – Details dazu findet man in fast beliebiger Ausführlichkeit in den Standardlehrbüchern der Mechanik³ – und mit der Absicht, einige Begriffe aus klassischer Sicht zu verstehen, die wir in der Quantenmechanik wiederfinden und als für diese von fundamentaler Bedeutung erkennen werden.

Die historisch erste Formulierung mechanischer Bewegungsgleichungen basiert auf dem zweiten Newtonschen Axiom, das auch als Grundgleichung der Mechanik bekannt ist und die beschleunigende Kraft F auf einen Körper der Masse m mit der erzielten Beschleunigung desselben in Verbindung bringt gemäß

$$F = m a;$$

da die Beschleunigung gleichzeitig die zweite Ableitung der Ortsfunktion des Systems nach der Zeit ist, liefert das gleichzeitig die Differentialgleichung

$$F = m \ddot{x}, \quad (1.1)$$

deren Lösungen in Verbindung mit den Anfangswerten von Ort und Geschwindigkeit mögliche Bahnen des Systems liefern. Abgesehen davon, daß diese sogenannte Newtonsche Form der

³Die unübertroffen beste Darstellung des Gegenstands, zumindest was die nichtrelativistische Sichtweise betrifft, ist nach wie vor [338]; der vorliegende Abschnitt orientiert sich im wesentlichen daran. Es gibt auch eine aktualisierte und erweiterte Neufassung [339], die jedoch nicht mehr den Esprit des Originals besitzt. Ein weiterer Klassiker des Gegenstands ist [135]. Hier werden zusätzlich auch Elastizitätstheorie und Hydrodynamik abgehandelt. Mit [765] liegt eine modernere Einführung der klassischen Mechanik vor, die insbesondere auch geometrische Zugänge berücksichtigt. Letztere findet man auch in [17], der Standardreferenz zur klassischen Mechanik aus der strengen Sicht der mathematischen Physik.

Mechanik erhebliche praktische Nachteile hat, beispielsweise weil das Auffinden der Kräfte, die auf das System wirken, im allgemeinen sehr schwierig bis undurchführbar ist, liefert sie auch keinen direkten Zugang zu denjenigen Größen, die sich später in der Quantenmechanik als grundlegend erweisen. Wir müssen uns daher mit anderen, formaleren Zugängen zur klassischen Mechanik beschäftigen.

1.1.2.1 Das Hamiltonsche Prinzip

Erstes Ziel jeder Formulierung der klassischen Mechanik ist es, Bewegungsgleichungen der Form (1.1) oder Verallgemeinerungen derselben aufzustellen. Es gibt sehr unterschiedliche Wege, die dahin führen; die Newtonsche Mechanik ist nur eine davon. Wir betrachten nun drei alternative Zugänge, die alle im Wesentlichen auf dem selben fundamentalen Naturprinzip aufbauen. Man nennt es das *Hamiltonsche Prinzip* [383].

Wir betrachten dazu ein System aus N Teilchen, deren Bewegungen im Anschauungsraum durch n im Prinzip beliebig wählbare, von der Zeit t abhängige Koordinaten $q_j(t)$ beschrieben werden sollen. Diese *internen* Koordinaten, die vom betrachteten System abhängen und dessen Position im Anschauungsraum in Abhängigkeit von der Zeit beschreiben, sind strikt von den *externen* Koordinaten x, y, z, t zu unterscheiden, die vom betrachteten System unabhängig sind und zur Kennzeichnung der einzelnen Punkte der Raum-Zeit dienen. Insbesondere gehört die bereits erwähnte Zeit t , von der die internen Koordinaten im allgemeinen abhängen und nach der Zeitableitungen zu bilden sind, zu den externen Koordinaten. Wenn aus dem Zusammenhang klar ist, ob gerade von internen oder externen Koordinaten gesprochen wird, lassen wir dieses zusätzliche Attribut weg.

Ist im Rahmen der gerade eingeführten Zählweise $n < 3N$, so bedeutet das, daß die Bewegung des Systems nicht unter alleinigem Einfluß irgendwelcher äußerer Kräfte erfolgt, sondern zusätzlich $3N - n$ Zwangsbedingungen unterworfen ist⁴. Die zeitlichen Ableitungen \dot{q}_j dieser verallgemeinerten Koordinaten beschreiben dann die verallgemeinerten Geschwindigkeitskomponenten der Teilchen. Mit T soll die kinetische Energie des Gesamtsystems bezeichnet werden. In kartesischen Koordinaten hat sie bekanntlich die Form

$$T = \sum_j \frac{1}{2} m_j v_j^2;$$

für verallgemeinerte Koordinaten wird daraus

$$T = \sum_j \frac{1}{2} m_j \left(\sum_k \frac{\partial \vec{r}_j}{\partial q_k} + \frac{\partial \vec{r}_j}{\partial t} \right)^2 = a + \sum_j a_j \dot{q}_j + \sum_{j,k} a_{jk} \dot{q}_j \dot{q}_k$$

⁴Genaugenommen müssen es dabei sogenannte *holonome* Zwangsbedingungen sein, das sind solche, die in Form von $3N - n$ Gleichungen $f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) = 0$ gegeben sind. Das sind dann genau die Gleichungen, mit denen man die $3N$ kartesischen, nicht unabhängigen Koordinaten auf $3N - n$ unabhängige verallgemeinerte Koordinaten reduzieren kann. Ein Beispiel ist ein Teilchen, das sich auf der Oberfläche einer Kugel bewegt. Seine drei internen kartesischen Koordinaten r_1, r_2, r_3 sind nicht unabhängig, da seine Bewegung auch durch zwei Kugelkoordinaten θ, ϕ beschrieben werden kann.

mit (Nachrechnen!)

$$\begin{aligned}
 a &= \sum_j \frac{1}{2} m_j \left(\frac{\partial \vec{r}_j}{\partial t} \right)^2, \\
 a_j &= \sum_j m_j \frac{\partial \vec{r}_j}{\partial t} \frac{\partial \vec{r}_j}{\partial q_j}, \\
 a_{jk} &= \sum_l \frac{1}{2} m_l \frac{\partial \vec{r}_l}{\partial q_j} \frac{\partial \vec{r}_l}{\partial q_k}.
 \end{aligned}$$

Im Fall zeitunabhängiger Transformationsgleichungen für die verallgemeinerten Koordinaten vereinfacht sich der Ausdruck für T auf

$$T = \sum_j \sum_k \sum_l \frac{1}{2} m_l \frac{\partial \vec{r}_l}{\partial q_j} \frac{\partial \vec{r}_l}{\partial q_k} \dot{q}_j \dot{q}_k,$$

also auf eine homogene quadratische Funktion der verallgemeinerten Geschwindigkeiten. V sei das verallgemeinerte Potential für das Gesamtsystem, womit gemeint ist, daß sich die Kräfte \vec{F}_j , die auf die Teilchen des Systems wirken, auf auf V zurückführen lassen. Genauer gesagt sollen die durch

$$Q_j = \sum_i \vec{F}_i \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_j}$$

definierten verallgemeinerten Kraft-Komponenten gemäß

$$Q_j = -\frac{\partial V}{\partial q_j} + \frac{d}{dt} \frac{\partial V}{\partial \dot{q}_j}$$

aus V bestimmbar sein⁵. Im allgemeinen gilt $V = V(q_j, \dot{q}_j, t)$ ⁶; ist V geschwindigkeits- und zeitunabhängig, so folgt

$$Q_j = -\frac{\partial V}{\partial q_j}$$

sowie

$$\vec{F}_j = -\vec{\nabla}_j V.$$

In diesem Fall heißen die Kräfte und das Potential *konservativ*.

Die Größe

$$L = T - V$$

⁵Natürlich ist nicht jede Kraft auf ein Potential zurückführbar; die nun folgenden Überlegungen lassen sich jedoch auf solche Fälle verallgemeinern.

⁶Das hier beschriebene, weit verbreitete Konzept geschwindigkeitsabhängiger Potentiale stammt von E. Schering [768].

heißt *Lagrange-Funktion* des Systems. Das Hamiltonsche Prinzip besagt nun, daß die Bewegung des Systems im Zeitraum von t_1 bis t_2 so verläuft, daß das Integral

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L(q_j, \dot{q}_j, t) dt$$

extremal wird. Genaugenommen genügt bereits die Forderung, daß I stationär wird, also in erster Näherung konstant bei Änderung der q_j , wobei das noch genauer zu definieren ist. Das Integral I kann als eine Funktion $I = I[q_j]$ aufgefaßt werden, die jedem Satz von $3N$ Funktionen $q_j(t)$ eine Zahl zuordnet. Solche Funktionen von Funktionen nennt man *Funktionale*. Die Aufstellung der Bewegungsgleichungen wird damit zu einer Extremwertaufgabe. Kennt man die Lagrange-Funktion eines Systems, kennt man im Prinzip, das heißt modulo mathematischem Aufwand, auch die Bewegungsgleichungen, die dessen zeitliche Entwicklung beschreiben. Die folgenden drei Abschnitte demonstrieren drei Strategien zum Aufsuchen solcher Bewegungsgleichungen auf der Grundlage des Hamiltonschen Prinzips.

Es zeigt sich, daß dieses Prinzip eigentlich gar kein Prinzip der klassischen Physik, sondern in geeignet verallgemeinerter Form von universeller Gültigkeit ist. So gut wie jede Differentialgleichung der mathematischen Physik läßt sich auf eine spezielle Form des Hamiltonschen Prinzips zurückführen, wobei die eigentliche Aufgabe dabei jeweils darin besteht, eine geeignete Lagrange-Funktion zu finden; der Rest ist dann oft von eher formaler Natur.

1.1.2.2 Lagrange-Formalismus

Die Verwendung des Hamiltonschen Prinzips zur Bestimmung von Bewegungsgleichungen führt offenbar zu Aufgabenstellungen folgender Form: Von allen denkbaren Funktionen q_j finde man diejenigen, für die das Funktional $I[q_j]$ ein Extremum annimmt. Damit haben wir ein typisches Problem der *Variationsrechnung* vor uns⁷. Euler [273] und Lagrange [522], [523] beschrieben als erste den klassischen Weg zur Lösung solcher Variationsprobleme, den wir im folgenden kurz skizzieren.

Die Funktionen $q_j(t), j = 1, 2, \dots, 3N$ seien gerade diejenigen, für die das Hamiltonsche Prinzip erfüllt ist. also die gesuchten Koordinatenfunktionen der wahren Bahnen der Komponenten des betrachteten Systems; mit $\delta q_j(t)$ seien beliebige Abweichungen von diesen Funktionen im Zeitraum $[t_1, t_2]$ bezeichnet, so daß andere als die wahren Bahnen in der Form $q_j(t) + \delta q_j(t)$ geschrieben werden können. Die Orte der Komponenten zu den Zeitpunkten t_1 und t_2 seien bekannt, es kann also $\delta q_j(t_1) = \delta q_j(t_2) = 0$ vorausgesetzt werden. Die $\delta q_j(t)$ heißen Variationen der $q_j(t)$. Die Änderung des Funktionals $I = I[q_j]$ durch *infinitesimale* Variationen $\delta q_j(t)$ sei

⁷Die Standard-Darstellung von Anwendungen der Variationsrechnung auf Probleme der Mechanik und gleichzeitig eine sehr ausführliche Einführung in deren Lagrangesche, Hamiltonsche und Hamilton-Jacobische Form ist [529].

$$\delta I = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q_j, \dot{q}_j, t) dt;$$

man bezeichnet sie als Variation von I . Analog zur elementaren Analysis lautet auch hier eine notwendige und hinreichende Bedingung für die Stationarität von I

$$\delta I = 0,$$

das heißt, die Variation von I muß verschwinden. Die Kettenregel liefert

$$\delta I = \int_{t_1}^{t_2} \sum_j \left(\frac{\partial L}{\partial q_j} \delta q_j + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \delta \dot{q}_j \right) dt = \int_{t_1}^{t_2} \sum_j \left(\frac{\partial L}{\partial q_j} \delta q_j + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \frac{d}{dt} \delta q_j \right) dt = 0$$

und partielle Integration weiter

$$\delta I = \sum_j \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \delta q_j \right]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \sum_j \left(\frac{\partial L}{\partial q_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) \delta q_j dt = 0. \quad (1.2)$$

Da die Variationen der q_j für t_1 und t_2 verschwinden sollen, verschwindet auch der erste Summand in (1.2). Die δq_j sind völlig beliebig, folglich kann δI nur verschwinden, wenn sämtliche Summanden im Integral auf der rechten Seite von (1.2) für sich schon verschwinden, und man erhält die Gleichungen

$$\frac{\partial L}{\partial q_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} = 0, \quad j = 1, 2, \dots, 3N. \quad (1.3)$$

Diese Gleichungen heißen *Lagrangesche Gleichungen*⁸.

Setzt man die Lagrange-Funktion eines mechanischen Systems in (1.3) ein, so erhält man dessen Bewegungsgleichungen. Das sei für den speziellen Fall konservativer Kräfte, also solcher, die man aus einem zeitunabhängigen, geschwindigkeitsunabhängigen Potential V gemäß $\vec{F}_j = -\vec{\nabla}_j V$ herleiten kann, kurz demonstriert. Setzt man $L = T - V$ in die Lagrange-Gleichungen ein, findet man

$$\frac{\partial(T - V)}{\partial q_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial(T - V)}{\partial \dot{q}_j} = \frac{\partial(T - V)}{\partial q_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} = 0, \quad j = 1, 2, \dots, 3N$$

⁸Die Lagrangeschen Gleichungen stellen ein Beispiel für die allgemeinen Differentialgleichungen zur Lösung von Variationsaufgaben dar, bei denen Extrema für Funktionale der Form $F = F(y_j(t), \dot{y}_j(t), t)$ gesucht werden. In der Mathematik nennt man sie nach ihren Entdeckern *Euler-Lagrange-Gleichungen der Variationsrechnung*. Lagrange selbst leitete die nach ihm benannten Gleichungen (1.3) nicht über Variationsprinzipien, sondern über ein Kovarianzprinzip her, genauer gesagt über die Forderung, daß das Gesetz des Kräftegleichgewichts in beliebigen Koordinaten formulierbar sein soll [524].

oder

$$\frac{\partial V}{\partial q_j} = \frac{\partial T}{\partial q_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j}, \quad j = 1, 2, \dots, 3N.$$

Bei Verwendung von kartesischen Koordinaten gilt für die kinetische Energie in obigem Fall

$$T = \sum_j \frac{1}{2} m_j \dot{r}_j^2,$$

und man erhält

$$-\vec{\nabla}_j V = m_j \ddot{r}_j, \quad j = 1, 2, \dots, 3N,$$

also $\vec{F}_j = m_j \ddot{r}_j$ für $j = 1, 2, \dots, 3N$. Das sind die Newtonschen Bewegungsgleichungen.

Der Lagrange-Formalismus läßt sich problemlos auf kompliziertere Systeme verallgemeinern, wie etwa auf solche, die auch Kräften unterliegen, die nicht auf Potentiale zurückführbar sind. Typische Beispiele dafür sind dissipative Systeme, das heißt Systeme, die energetisch nicht abgeschlossen sind, etwa weil Reibungskräfte vorliegen. Auch eine Erweiterung auf Systeme mit allgemeineren Zwangsbedingungen als den im vorigen Abschnitt beschriebenen ist möglich⁹. Details dazu findet man beispielsweise in [338].

Jeder der $3N$ Ortskoordinaten unseres physikalischen Systems kann man über

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}$$

einen *kanonisch konjugierten Impuls* zuordnen. Für kartesische Koordinaten und zeitunabhängige konservative Potentiale sind das die üblichen mechanischen Impulse, bei verallgemeinerten Koordinaten oder komplizierteren Potentialen spricht man entsprechend von verallgemeinerten Impulsen, die im allgemeinen nicht die Dimension des gewöhnlichen mechanischen Impulses aufweisen. Kommt ein gegebenes q_j nicht als Variable in der Lagrange-Funktion vor, dann nennt man q_j eine *zyklische Variable* des Systems. Die Lagrange-Gleichungen zeigen unmittelbar, daß dann

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} = 0$$

gilt. Mit anderen Worten: Zu zyklischen Koordinaten kanonisch konjugierte Impulse sind Erhaltungsgrößen.

Die Lagrangesche Form der Mechanik verfügt gegenüber der Newtonschen über den großen Vorteil, daß man sich nicht mit komplizierten äußeren Kräften abmühen sondern lediglich die kinetische und potentielle Energie des zu beschreibenden Systems aufstellen muß, danach arbeitet die Maschinerie gewissermaßen von alleine. Damit gestaltet sich die Bestimmung der Bewegungsgleichungen in den meisten Fällen unvergleichlich bequemer. Noch viel wichtiger jedoch ist die Verallgemeinerbarkeit des Lagrangeschen Formalismus weit über die Mechanik hinaus, insbesondere auf Felder, und die damit verbundene nahezu unbegrenzte Verwendbarkeit für alle möglichen physikalischen Systeme und Theorien.

⁹Konsequenterweise spricht man hier von *nichtholonomen* Zwangsbedingungen. Sie können in Form von Ungleichungen, irgendwelchen geschwindigkeitsabhängigen Ausdrücken, sonstigen Differentialgleichungen oder beliebigen anderen Relationen gegeben sein.

1.1.2.3 Die Hamiltonschen Gleichungen

Anstelle der $3N$ Größen q_j und \dot{q}_j kann man natürlich auch die $3N$ Größen q_j und p_j als die fundamentalen Variablen zur Beschreibung mechanischer Systeme auffassen. Das ist keineswegs eine nur formale Aussage, wie wir jetzt sehen werden.

Wir definieren mit

$$H = \sum_j \dot{q}_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} - L = \sum_j p_j \dot{q}_j - L,$$

die *Hamilton-Funktion* des Systems¹⁰. Dabei ist L als Funktion von q_j , \dot{q}_j und t zu betrachten, H dagegen als Funktion von q_j , p_j und t . Dieser Tausch der freien Variablen ist dabei ein wesentlicher Aspekt.

Mit der Funktion H läßt sich eine alternative, ebenfalls auf das Hamiltonsche Prinzip aufbauende Formulierung der Mechanik aufbauen. Dazu drücken wir die Lagrange-Funktion durch die Hamilton-Funktion aus und erhalten so das Hamiltonsche Prinzip in der Form¹¹

$$\begin{aligned} \delta I &= \delta \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_j p_j \dot{q}_j - H \right) dt \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_j \left(\dot{q}_j \delta p_j + p_j \delta \dot{q}_j - \frac{\partial H}{\partial q_j} \delta q_j - \frac{\partial H}{\partial p_j} \delta p_j \right) dt \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_j \left(\dot{q}_j \delta p_j + p_j \frac{d}{dt} \delta q_j - \frac{\partial H}{\partial q_j} \delta q_j - \frac{\partial H}{\partial p_j} \delta p_j \right) dt \end{aligned}$$

¹⁰Der Übergang von der Lagrange- zur Hamilton-Funktion hat mathematisch die Struktur einer *Legendre-Transformation*. Solche Transformationen sind für die Physik von weitreichender Bedeutung, beispielsweise auch in der Thermodynamik, wo sie Übergänge der unterschiedlichen thermodynamischen Potentiale ineinander ermöglichen.

¹¹In der Literatur findet man nicht selten für die Größe I den Begriff „Wirkung“ und das Hamiltonsche Prinzip unter der Bezeichnung „Prinzip der kleinsten Wirkung“. Beides ist nicht korrekt. Die Wirkung ist in der Mechanik definiert durch das Integral

$$A = \int \sum_j p_j dq_j,$$

und das Prinzip der kleinsten Wirkung besagt, daß ein physikalisches System, für das H eine Erhaltungsgröße ist, von allen Bahnen mit konstantem H in der Realität diejenige auswählt, für die A extremal wird. Das Extremum kann dabei, anders als der Name des Prinzips vermuten läßt, ein Maximum, Minimum, Tarsenpunkt oder auch Sattelpunkt sein, weswegen genauer vom Prinzip der stationären Wirkung gesprochen werden sollte. Das Prinzip der kleinsten Wirkung geht ursprünglich auf Maupertuis zurück [587], [588]; seine präzise Formulierung stammt von Euler [273] und Lagrange [522], [523]. Es ist mit dem Hamiltonschen Prinzip verwandt, letzteres ist aber von allgemeinerer Natur.

$$= [p_j \delta q_j]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \sum_j \left(\dot{q}_j \delta p_j - \dot{p}_j \delta q_j - \frac{\partial H}{\partial q_j} \delta q_j - \frac{\partial H}{\partial p_j} \delta p_j \right) dt = 0.$$

Der ausintegrierte Teil verschwindet wieder, es bleibt

$$\int_{t_1}^{t_2} \sum_j \left[\left(\dot{q}_j - \frac{\partial H}{\partial p_j} \right) \delta p_j - \left(\dot{p}_j + \frac{\partial H}{\partial q_j} \right) \delta q_j \right] dt = 0,$$

und weil auch hier die Variationen δp_j und δq_j völlig beliebig sind, ist das Integral nur dann Null, wenn die Terme in den runden Klammern jeweils für sich verschwinden. Das ergibt die Gleichungen

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}, \quad j = 1, 2, \dots, 3N,$$

die man *Hamiltonsche Gleichungen* oder auch *kanonische Gleichungen* nennt¹². Auch sie führen nach Einsetzen der Hamilton-Funktion des betrachteten Systems auf dessen Bewegungsgleichungen – mit dem Unterschied allerdings, daß man jetzt die $3N$ Differentialgleichungen *zweiter Ordnung*, welche die Newtonschen ebenso wie die Lagrangeschen Gleichungen darstellen, in $6N$ Differentialgleichungen *erster Ordnung* umgewandelt hat.

Besonders anschaulich wird die Interpretation der Hamilton-Funktion im Fall konservativer Kraftfelder und zeitunabhängiger Transformationsgleichungen von kartesischen auf die verallgemeinerten Koordinaten. Die kinetische Energie nimmt dann wie in Abschnitt 1.1.2.1 gesehen die Gestalt einer homogenen quadratischen Funktion der \dot{q}_j an; für diese gilt nach dem Satz von Euler¹³

$$\sum_j \dot{q}_j \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} = 2T.$$

Für die Hamilton-Funktion folgt daraus

$$H = T + V,$$

das heißt *H ist die Gesamtenergie des Systems*. Es sei jedoch ausdrücklich darauf hingewiesen, daß das für allgemeinere Systeme nicht der Fall ist.

Eine für die Hamiltonsche Mechanik sehr nützliche Abkürzung bilden die *Poisson-Klammern*¹⁴, die für zwei beliebige Funktionen f und g durch

$$\{f, g\} = \sum_{j=1}^{3N} \left(\frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial g}{\partial q_j} \right)$$

¹²Hamilton entdeckte seine Formulierung der Mechanik 1833; die grundlegenden Arbeiten dazu sind [383], [384] und [385].

¹³Siehe beispielsweise [659].

¹⁴Benannt nach S. D. Poisson, der sie 1809 erfand [712].

definiert sind. Man prüft leicht ihre fundamentalen Eigenschaften nach; es gelten die Relationen

$$\begin{aligned}\{f, g\} &= -\{g, f\}, \\ \{f + g, h\} &= \{f, h\} + \{g, h\}, \\ \{f, gh\} &= \{f, g\}h + g\{f, h\}\end{aligned}$$

sowie

$$\{f, \{g, h\}\} + \{h, \{f, g\}\} + \{g, \{h, f\}\} = 0;$$

Letztere ist unter der Bezeichnung *Jacobi-Identität* bekannt¹⁵. Außerdem findet man die *fundamentalen Poisson-Klammern*

$$\{q_i, q_j\} = 0, \quad \{p_i, p_j\} = 0, \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}.$$

Hierbei wurde das *Kroneckersymbol* δ_{ij} eingeführt; es ist definiert durch

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{für } i \neq j. \end{cases}$$

Insbesondere lassen sich die Hamiltonschen Gleichungen mit Hilfe von Poisson-Klammern formulieren, denn für $f = q_j$ beziehungsweise $f = p_j$ und $g = H$ erhält man

$$\dot{q}_j = \{q_j, H\}, \quad \dot{p}_j = \{p_j, H\}, \quad j = 1, 2, \dots, 3N.$$

Für eine beliebige Funktion $f = f(q_j, p_j, t)$ kann man deren zeitliche Ableitung

$$\frac{df}{dt} = \sum_j \left(\frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial q_j}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial p_j}{\partial t} \right) + \frac{\partial f}{\partial t}$$

in der Form

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t}$$

schreiben. Funktionen, die nicht explizit von der Zeit abhängig sind, sind daher genau dann Konstanten der Bewegung, wenn für sie $\{f, H\} = 0$ gilt. Systeme, bei denen ebenso viele Erhaltungsgrößen wie Freiheitsgrade existieren, nennt man *integrable Systeme*.

1.1.2.4 Kanonische Transformationen

Eine wesentliche Eigenschaft der Lagrangeschen wie auch der Hamiltonschen Mechanik ist ihre Formulierbarkeit für beliebige verallgemeinerte Koordinaten. Folglich sind in diesem Zusammenhang Transformationen von einem Satz von Koordinaten $\{q_j\}$ und kanonisch konjugierten

¹⁵C. G. J. Jacobi erwähnte sie erstmals in [457].

Impulsen $\{p_j\}$ auf einen anderen Satz $\{Q_j\}$ und $\{P_j\}$, das heißt also Koordinatentransformationen im Phasenraum, von Interesse. Klar ist dabei, daß im Fall der Hamiltonschen Mechanik nur solche Koordinatentransformationen zulässig sein können, bei denen die neuen Koordinaten wieder kanonische Gleichungen erfüllen, bei denen es also eine Funktion $K = K(Q_j, P_j, t)$ gibt, mit der die neuen Koordinaten Q_j zusammen mit ihren kanonisch konjugierten Impulsen P_j Gleichungen der Form

$$\dot{Q}_j = \frac{\partial K}{\partial P_j}, \quad \dot{P}_j = -\frac{\partial K}{\partial Q_j}, \quad j = 1, 2, \dots, 3N,$$

genügen. Solche Transformationen nennt man *kanonische Transformationen*¹⁶. Sie zeichnen sich auch dadurch aus, daß Poissonklammern unter ihnen invariant sind.

Bei kanonischen Transformationen handelt es sich nicht einfach um Punkttransformationen; diese wären gegeben durch Transformationsformeln der Gestalt

$$Q_j = Q_j(q_i, t), \quad i, j = 1, 2, \dots, 3N.$$

Stattdessen haben wir es mit Transformationsformeln der Form

$$Q_j = Q_j(q_i, p_i, t), \quad P_j = P_j(q_i, p_i, t), \quad i, j = 1, 2, \dots, 3N \quad (1.4)$$

zu tun. Da es kanonische Transformationen sein sollen, müssen sowohl die alten als auch die neuen Koordinaten ein Hamiltonsches Prinzip erfüllen. Es gilt also einerseits

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_j p_j \dot{q}_j - H(q_j, p_j, t) \right] dt = 0$$

und andererseits

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_j P_j \dot{Q}_j - K(Q_j, P_j, t) \right] dt = 0,$$

und für die Integranden der beiden Integrale folglich

$$\sum_j p_j \dot{q}_j - H = \sum_j P_j \dot{Q}_j - K + \frac{dF}{dt} \quad (1.5)$$

mit einer beliebigen, von den alten und neuen Koordinaten sowie der Zeit abhängigen Funktion F . Die Funktion F heißt *erzeugende Funktion der Transformation*. Wir zeigen nun, wie man solche erzeugenden Funktionen zum Aufstellen von Transformationsgleichungen verwenden kann.

Erzeugende Funktionen müssen sowohl von den $3N \equiv n$ alten als auch von den n neuen Koordinaten und können darüberhinaus auch von der Zeit abhängig sein, so daß sie $4n + 1$

¹⁶Es sind auch die Bezeichnungen *Berührungstransformationen* beziehungsweise *Kontakttransformationen* gebräuchlich, wobei deren Verwendung in der Literatur uneinheitlich ist.

Variablen enthalten. Von diesen sind aber aufgrund der $2n$ Transformationsgleichungen nur $2n+1$ voneinander unabhängig. Folglich sind erzeugende Funktionen in vier unterschiedlichen Varianten möglich:

$$F_1 = F_1(q_j, Q_j, t), \quad F_2 = F_2(q_j, P_j, t), \quad F_3 = F_3(p_j, Q_j, t), \quad F_4 = F_4(p_j, P_j, t).$$

Wir betrachten diese jeweils für sich. Für F_1 lautet die Ableitung nach der Zeit

$$\frac{dF_1}{dt} = \sum_j \frac{\partial F_1}{\partial q_j} \dot{q}_j + \sum_j \frac{\partial F_1}{\partial Q_j} \dot{Q}_j + \frac{\partial F_1}{\partial t}. \quad (1.6)$$

Auflösen von (1.5) nach dF/dt und Koeffizientenvergleich mit (1.6) liefert

$$p_j = \frac{\partial F_1}{\partial q_j}, \quad P_j = \frac{\partial F_1}{\partial Q_j}, \quad j = 1, 2, \dots, n$$

sowie

$$K = H + \frac{\partial F_1}{\partial t}.$$

Der Übergang von den unabhängigen Variablen q_j, Q_j zu q_j, P_j kann analog zum Übergang von L nach H erfolgen, indem man F_2 durch F_1 ausdrückt gemäß

$$F_2(q_j, P_j, t) = F_1(q_j, Q_j, t) + \sum_j P_j Q_j$$

und somit (1.5) durch

$$\sum_j p_j \dot{q}_j - H = \sum_j P_j \dot{Q}_j - K + \frac{d}{dt} \left(F_2 - \sum_j P_j Q_j \right) = - \sum_j Q_j \dot{P}_j - K + \frac{dF_2}{dt}$$

ersetzt. Das selbe Verfahren wie bei F_1 führt nun für F_2 auf

$$p_j = \frac{\partial F_2}{\partial q_j}, \quad Q_j = \frac{\partial F_2}{\partial P_j}, \quad j = 1, 2, \dots, n$$

und

$$K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t}.$$

F_3 erhält man aus F_1 über

$$F_3(Q_j, p_j, t) = F_1(q_j, Q_j, t) - \sum_j q_j p_j,$$

aus (1.5) wird

$$- \sum_j q_j \dot{p}_j - H = \sum_j P_j \dot{Q}_j - K + \frac{dF_3}{dt}$$

und damit ergibt sich

$$q_j = -\frac{\partial F_3}{\partial p_j}, \quad P_j = -\frac{\partial F_3}{\partial Q_j}, \quad j = 1, 2, \dots, n$$

und

$$K = H + \frac{\partial F_3}{\partial t}.$$

Schließlich drückt man F_4 durch F_1 aus gemäß

$$F_4(p_j, P_j, t) = F_1(q_j, Q_j, t) + \sum_j Q_j P_j - \sum_j q_j p_j,$$

verwandelt (1.5) in

$$-\sum_j q_j \dot{p}_j - H = -\sum_j Q_j \dot{P}_j - K + \frac{dF_4}{dt}$$

und findet

$$q_j = -\frac{\partial F_4}{\partial p_j}, \quad Q_j = \frac{\partial F_4}{\partial P_j}, \quad j = 1, 2, \dots, n$$

sowie

$$K = H + \frac{\partial F_4}{\partial t}.$$

Damit liefert die erzeugende Funktion in jedem der vier Fälle sowohl die neben den n Relationen (1.4) noch fehlenden weiteren n Transformationsformeln als auch die Umrechnungsvorschrift von der alten zur neuen Hamiltonfunktion. Im nächsten Abschnitt werden wir als Beispiel einer Anwendung kanonischer Transformationen eine vierte Formulierung der Mechanik kennenlernen.

1.1.2.5 Hamilton-Jacobi-Theorie

Eine spezielle Möglichkeit, kanonische Transformationen zur Lösung mechanischer Probleme zu verwenden, ist die Transformation der $2n$ Koordinaten q_j und Impulse p_j auf neue Variablen, die zeitlich konstant sind, am besten auf die $2n$ Anfangswerte q_{j0} und p_{j0} , denn dann sind die Transformationsformeln

$$q_j = q_j(q_{j0}, p_{j0}, t), \quad p_j = p_j(q_{j0}, p_{j0}, t), \quad j = 1, 2, \dots, n$$

die Koordinaten und Impulse des Systems in Abhängigkeit von den Anfangswerten und der Zeit, also genau die Lösungen des betrachteten Problems. Das erreicht man garantiert dann, wenn die neue Hamiltonfunktion K identisch verschwindet, wie ein Blick auf die transformierten kanonischen Gleichungen sofort zeigt. Wegen

$$K = H + \frac{\partial F}{\partial t}$$

folgt daraus die Relation

$$H + \frac{\partial F}{\partial t} = 0. \quad (1.7)$$

Wählt man die erzeugende Funktion dieser kanonischen Transformation in der Form F_2 , dann gilt für die Impulse

$$p_j = \frac{\partial F_2}{\partial q_j}. \quad (1.8)$$

In diesem Zusammenhang ist es üblich, die erzeugende Funktion mit S zu bezeichnen; man nennt sie *Hamiltonsche Wirkungsfunktion*. Da die neuen Impulse P_j zeitlich konstant sein sollen, folgt aus (1.7) und (1.8)

$$\frac{dS}{dt} = \sum_j \frac{\partial S}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial S}{\partial t} = \sum_j p_j \dot{q}_j - H = L,$$

und Integration liefert

$$S = \int L dt + C,$$

das heißt, die Wirkungsfunktion ist gleich dem unbestimmten Zeitintegral der Lagrange-Funktion mit einer beliebigen additiven Konstante C .

Aus (1.7) wird nun mit (1.8) die partielle Differentialgleichung

$$H \left(q_1, q_2, \dots, q_n, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \frac{\partial S}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_n}, t \right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (1.9)$$

Gleichung (1.9) heißt *Hamilton-Jacobi-Gleichung*¹⁷. Löst man sie, so bekommt man automatisch auch eine Lösung des betrachteten mechanischen Problems¹⁸. Die Lösung der Hamilton-Jacobi-Gleichung liefert mit der Wirkungsfunktion S zunächst nur deren Abhängigkeit von den alten Koordinaten, nicht jedoch ihre Abhängigkeit von den neuen Impulsen. Diese vermeintliche Lücke ist jedoch gerade der Schlüssel zum Erfolg. Es handelt sich bei (1.9) um eine partielle Differentialgleichung in $n+1$ Variablen, deren vollständige Lösung folglich $n+1$ unabhängige Integrationskonstanten enthält. Da die gesuchte Funktion S selbst in (1.9) nicht auftaucht, kann ihre vollständige Lösung in der Form

$$S = f(q_1, q_2, \dots, q_n, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n, t) + \alpha$$

geschrieben werden, mit n unabhängigen nicht additiven Integrationskonstanten $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ und einer additiven Integrationskonstante α , die keine Rolle spielt. Es kann daher $S = f$ gesetzt werden. Für die n Integrationskonstanten kann man nun $\alpha_j = P_j$ wählen und erhält so $2n$ Transformationsformeln

$$p_j = \frac{\partial S(q_j, \alpha_j, t)}{\partial q_j} \quad (1.10)$$

¹⁷Gleichung (1.9) tauchte erstmals bei Hamilton auf, der erkannte, daß das Zeitintegral der Lagrange-Funktion die Lösung einer partiellen Differentialgleichung dieser Form ist [383], [384], [385].

¹⁸Dieser Sachverhalt wurde von Jacobi entdeckt [455], [456].

und

$$Q_j = \beta_j = \frac{\partial S(q_j, \alpha_j, t)}{\partial \alpha_j}. \quad (1.11)$$

Mit Hilfe der bekannten Anfangswerte der q_j und der p_j kann man zunächst aus (1.10) die Konstanten α_j und damit aus (1.11) die Konstanten β_j bestimmen. Gleichung (1.11) liefert dann die Koordinaten

$$q_i = q_i(\alpha_j, \beta_j, t)$$

als Funktionen der Zeit und der Anfangsbedingungen und damit die Lösung des mechanischen Problems.

Falls H nicht explizit zeitabhängig ist, kann man für (1.9) einen Separationsansatz der Form $S = W - \alpha_1 t$ wählen; die Funktion W nennt man *Hamiltonsche charakteristische Funktion*, die Integrationskonstante α_1 ist der konstante Wert von H , der häufig die Gesamtenergie darstellt, aber nicht immer, wie wir in Abschnitt 1.1.2.3 gesehen haben¹⁹. Die Hamilton-Jacobi-Gleichung verwandelt sich dadurch in

$$H\left(q_1, q_2, \dots, q_n, \frac{\partial W}{\partial q_1}, \frac{\partial W}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial W}{\partial q_n}\right) = \alpha_1$$

und enthält keine Zeit. Die Funktion W kann gleichzeitig als Erzeugende für eine kanonische Transformation betrachtet werden, deren besondere Eigenschaft darin besteht, daß alle neuen Impulse Konstanten der Bewegung sind und zusätzlich α_1 die konstante Hamiltonfunktion H ist. Wegen $W = W(q_j, P_j)$ lauten die zugehörigen Transformationsgleichungen

$$p_j = \frac{\partial W}{\partial q_j}, \quad Q_j = \frac{\partial W}{\partial P_j} = \frac{\partial W}{\partial \alpha_j},$$

und weil W die Zeit nicht enthält, ist die neue Hamiltonfunktion

$$K = H + \frac{\partial W}{\partial t}$$

mit der alten identisch, und es gilt $K = H = \alpha_1$.

Die Funktion W liefert zusätzlich ein spezielles Lösungsverfahren für mechanische Probleme, bei denen H eine Konstante der Bewegung ist, da W erzeugende Funktion einer kanonischen Transformation ist, in der alle neuen Koordinaten zyklisch sind, so daß die Integration der neuen Hamiltonschen Gleichungen trivial ist. Einerseits erhält man aus den kanonischen Gleichungen

$$\dot{Q}_j = \frac{\partial K}{\partial \alpha_j} = \begin{cases} 1 & \text{für } j = 1, \\ 0 & \text{für } j \neq 1 \end{cases}$$

¹⁹Dieses Verfahren war der erste Schritt zur Hamilton-Jacobi-Theorie. Hamilton verwendete seine charakteristische Funktion zunächst nur in der Optik [382], bevor er sie wenig später auch in der Mechanik zum Einsatz brachte [383].

die Lösungen

$$Q_1 = t + \beta_1 \equiv \frac{\partial W}{\partial \alpha_1},$$

$$Q_j = \beta_j \equiv \frac{\partial W}{\partial \alpha_j}, \quad j \neq 1$$

mit den n Integrationskonstanten $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n$, andererseits liefern die kanonischen Gleichungen

$$\dot{P}_j = -\frac{\partial K}{\partial Q_j} = 0$$

die Bestätigung, daß die neuen Impulse Konstanten der Bewegung sind. Man erkennt hieran überdies, daß die Zeit als zusätzliche verallgemeinerte Koordinate und die negative Hamiltonfunktion als ihr kanonisch konjugierter Impuls betrachtet werden kann.

Besonders einfach wird die Lösung eines mechanischen Problems im Rahmen der Hamilton-Jacobi-Theorie, wenn eine Separation der Variablen möglich ist²⁰. Darunter versteht man eine Transformation der Hamilton-Jacobischen partiellen Differentialgleichung in n nur von jeweils einer verallgemeinerten Koordinate abhängige und damit gewöhnliche Differentialgleichungen. Um das Verfahren der Koordinatenseparation zu illustrieren, betrachten wir ein System mit zeitunabhängiger Hamiltonfunktion H und machen für die Hamiltonsche charakteristische Funktion den Ansatz

$$W = \sum_{i=1}^n W_i(q_i, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n).$$

Die Variablen q_1, q_2, \dots, q_n heißen *separierbar*, wenn es möglich ist, mit diesem Ansatz die Hamilton-Jacobi-Gleichung in n Gleichungen der Form

$$H_i\left(q_i, \frac{\partial W_i}{\partial q_i}, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\right) = \alpha_i$$

aufzuspalten. Das ist ein Satz gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung, die man immer lösen kann, da man sie jeweils nur nach $\partial W_i / \partial q_i$ auflösen und anschließend über q_i integrieren muß. Leider gibt es kein allgemeines Kriterium, das einem sagt, wann ein mechanisches Problem separierbar ist; man muß es jeweils ausprobieren.

Die Hamilton-Jacobi-Theorie wirkt auf den ersten Blick komplizierter als ihre Verwandten, zumal sie das Hantieren mit partiellen Differentialgleichungen anstelle von gewöhnlichen erfordert. Es gibt jedoch mechanische Probleme, bei der sie sehr viel angemessener als andere Zugänge ist und sogar solche, die sich nur mit der Hamilton-Jacobi-Theorie lösen lassen. Besonders vielfältigen Einsatz findet sie im Bereich der Himmelsmechanik²¹. Ihre fundamentale

²⁰Man könnte es auch etwas drastischer formulieren und behaupten, daß das Hamilton-Jacobische Verfahren eigentlich nur dann von praktischer Bedeutung ist, wenn eine solche Separation möglich ist. Das wäre jedoch etwas unfair, da man dann die große konzeptionelle Bedeutung des Verfahrens nicht angemessen würdigen würde.

²¹Jacobi selbst war der erste, der sie dort anwendete [458].

Bedeutung hat sie jedoch genau wie die Hamiltonsche Mechanik im Zusammenhang mit dem Verhältnis zwischen klassischer Physik und Quantenmechanik.

1.1.2.6 Wirkungsvariable und Winkelvariable

Nicht nur in der Mechanik sind periodische Prozesse von besonderer Bedeutung; die soeben erwähnte Himmelsmechanik ist hierbei nur eines unter sehr vielen Beispielen²². Im Rahmen der Hamilton-Jacobi-Mechanik gibt es eine von Delaunay entdeckte besonders elegante Beschreibung für Systeme mit periodischen Bewegungen [185]. Man wählt dabei anstelle der n Integrationskonstanten α_i , die bei der Lösung der Hamilton-Jacobi-Gleichung auftreten, n unabhängige geeignet definierte Funktionen J_i der α_i als neue Impulse. Diese J_i nennt man *Wirkungsvariable*²³.

Wir betrachten ein System mit zeitlich konstanter Hamiltonfunktion H und dazu einen Satz von n Paaren q_i, p_i kanonisch konjugierter Variablen des Systems. Nun definieren wir die Wirkungsvariablen J_i des Systems durch

$$J_i = \oint p_i dq_i, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

wobei jeweils über eine volle Periode zu integrieren ist²⁴. Die Wirkungsvariablen haben stets die Dimension eines Drehimpulses. Da bei ihrer Definition über die q_i integriert wird, sind sie nur von den n Integrationskonstanten α_j abhängig, die bei der Lösung der Hamilton-Jacobi-Gleichung auftreten. Folglich kann die Hamiltonsche charakteristische Funktion auch als Funktion der verallgemeinerten Variablen und der Wirkungsvariablen aufgefaßt werden,

$$W = W(q_1, q_2, \dots, q_n, J_1, J_2, \dots, J_n),$$

und die Hamilton-Funktion hängt nur von den Wirkungsvariablen ab,

$$H = \alpha_1 = H(J_1, J_2, \dots, J_n).$$

²²Periodische Bewegungen lassen sich in drei grundsätzliche Klassen einteilen. Erstens können sowohl die verallgemeinerten Koordinaten als auch die verallgemeinerten Impulse periodisch sein, sodaß das System eine Anfangslage zwischen und Umkehrpunkte an zwei Nullpunkten der kinetischen Energie besitzt. Das System durchläuft dabei in jeder Periode dieselben Zustände und hat folglich eine geschlossene Bahn im Phasenraum. In diesem Fall spricht man von *Librationen*. Sind zweitens nur die verallgemeinerten Impulse periodisch, nicht aber die verallgemeinerten Koordinaten, so bewirkt das Fortschreiten um eine Periode zwar keinerlei Veränderungen des Systems, dennoch können die Werte der Koordinaten beliebig anwachsen. Letztere sind dabei stets als Drehwinkel interpretierbar, und man nennt solche Vorgänge *Rotationen*. Im Phasenraum weisen solche Systeme Kurven auf, die nicht geschlossen sind, sondern in gleichförmiger Weise abwechselnd Maxima und Minima aufweisen. Drittens können unterschiedliche Paare q_i, p_i kanonisch konjugierter Größen auch unterschiedliche Frequenzen in ihren periodischen Bewegungen aufweisen. Solche Systeme beschreiben geschlossene oder offene Lissajous-Figuren, je nachdem, ob die einzelnen Frequenzen in rationalen oder irrationalen Verhältnissen zueinander stehen; im zweiten Fall heißen die entsprechenden Bewegungen *bedingt periodisch*.

²³Dieses Verfahren ist nicht nur für separierbare, sondern für allgemeine mehrfach periodische Systeme anwendbar.

²⁴Der Name kommt von der formalen Ähnlichkeit der J_i mit der Wirkung A des Systems; vergleiche Anmerkung 11 in Abschnitt 1.1.2.3.

Die zu den J_i kanonisch konjugierten Variablen nennt man *Winkelvariable*, wahlweise und seltener auch *Phasenvariable* oder einfach *Phasen*; man erhält sie aus der Hamiltonschen charakteristischen Funktion des betrachteten Systems gemäß

$$w_i = \frac{\partial W}{\partial J_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Ihre Bewegungsgleichungen lauten

$$\dot{w}_i = \frac{\partial H}{\partial J_i} \equiv \nu_i, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

mit den n konstanten Funktionen $\nu_i = \nu_i(J_1, J_2, \dots, J_n)$, die zugehörigen Lösungen sind folglich

$$w_i = \nu_i t + \beta_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

mit n durch die Anfangsbedingungen festzulegenden Konstanten β_i .

Wir betrachten die Funktionen ν_i etwas näher. Ist τ_j die Zeit, während der q_j eine vollständige Periode durchläuft, dann erfährt die Winkelvariable w_i gleichzeitig die Änderung

$$\Delta w_i = \oint \frac{\partial w_i}{\partial q_j} dq_j = \oint \frac{\partial^2 W}{\partial q_j \partial J_i} = \frac{\partial}{\partial J_i} \oint \frac{\partial W}{\partial q_j} dq_j = \frac{\partial}{\partial J_i} \oint p_j dq_j = \frac{\partial J_j}{\partial J_i} = \delta_{ij}.$$

w_i ändert sich somit um 1, wenn q_j eine vollständige Periode durchläuft und überhaupt nicht, wenn irgendein q_j , $j \neq i$, das tut. Daraus folgt

$$\Delta w_i = \nu_i \tau_i = 1$$

und weiter

$$\nu_i = \frac{1}{\tau_i}.$$

Die ν_i sind folglich die *Frequenzen der periodischen Bewegungen der q_j* . Mit anderen Worten: Mit Hilfe der Wirkungs- und Winkelvariablen kann man die Frequenzen periodischer Bewegungen bestimmen, ohne eine vollständige Lösung der Bewegungsgleichungen des Systems ermitteln zu müssen.

Das soll als kurze Einführung in die theoretische Mechanik genügen. Wir werden den hier beschriebenen Sachverhalt an unterschiedlichen Stellen unserer historischen Tour durch die frühe Quantentheorie erneut begegnen.

1.2 Die Grenzen der klassischen Physik

Wir kommen nun zu den in der Einleitung zu Abschnitt 1.1 bereits angesprochenen unlösbaren Problemen, auf welche die klassische Physik angesichts ihrer großen Erfolge überraschenderweise traf. Sie waren der Auslöser für die Entwicklung des Gegenstands des vorliegenden Buches. Der nun folgende Abschnitt beschreibt die drei wichtigsten Beispiele, der Rest des Buches beschäftigt sich sodann vorwiegend mit dem historischen Ablauf der ersten Lösungen dieser Probleme.

1.2.1 Spektrale Verteilung von Hohlraumstrahlung

Die alltägliche Erfahrung, daß heiße Körper Licht aussenden, scheint auf den ersten Blick unverdächtig, etwas mit grundlegenden physikalischen Problemen zu tun zu haben. Umgangssprachliche Begriffe wie „Rotglut“ oder „Weißglut“ legen das nahe und deuten überdies auch darauf hin, daß die Farbe des ausgestrahlten Lichts etwas mit der Temperatur des Körpers zu tun hat. Die Farbe ändert sich von dunkelrot über hellrot und gelb zu weiß, wenn die Temperatur des Körpers erhöht wird. In der Tat kann man im Rahmen der Technik der *Pyrometrie* sogar die Messung der Farbe als Maß der Temperatur verwenden. Die Tatsache, daß man die Wärme auch dann schon spüren kann, wenn man sich nur in der Nähe des heißen Körpers aufhält, zeigt, daß auch infrarotes Licht bei der ausgesandten Strahlung dabei sein muß. Hat der Körper nur eine Temperatur, bei der er nicht glüht, dann handelt es sich bei der emittierten Strahlung sogar überwiegend um infrarotes Licht.

Man nennt diese von der Temperatur abhängige elektromagnetische Strahlung, die von allen Körpern ausgesandt wird, *Temperaturstrahlung* oder auch *Wärmestrahlung*. In idealtypischer Form tritt sie bei sogenannten *schwarzen Körpern* auf, das sind idealisierte Objekte, die ankommende elektromagnetische Wellen jeder beliebigen Frequenz vollständig absorbieren. Ein vollkommener schwarzer Körper ist natürlich nicht realisierbar; man kann sich einen solchen modellmäßig als einen Hohlraum mit ideal absorbierenden, also anschaulich gesprochen mattschwarzen Innenwänden vorstellen²⁵. Bringt man die Innenwände auf eine bestimmte, konstante Temperatur, so wird im Innenraum nach einiger Zeit eine spezielle elektromagnetische Strahlung entstehen, sodaß zwischen dieser und der die Innenwände bildenden Materie ein thermodynamisches Gleichgewicht besteht. Die Strahlung setzt sich aus elektromagnetischen Wellen aller Frequenzen zusammen, wobei die Intensität bei jeder Frequenz eine andere ist. Es handelt sich dabei um Wärmestrahlung in der theoretisch reinen Form. Hat der Hohlkörper ein Loch, so emittiert er Wärmestrahlung, die aus dem Loch entweicht. Eine gute Näherung hierfür ist zum Beispiel ein Backofen mit schwarzen Innenwänden und offener Backofentür. Entsprechend redet man auch von *Hohlraumstrahlung*.

Im großen und ganzen lernte man im Laufe des 19. Jahrhunderts ganz gut, diese Hohlraumstrahlung physikalisch zu beschreiben. So erkannte Gustav Kirchhoff 1860 beispielsweise, daß die Energieverteilung tatsächlich nur von der Temperatur, nicht aber von der Form und dem Material des Hohlraums abhängt; es muß anders gesagt eine *universelle* Funktion $\rho(\nu, T)$, geben, welche die Energiedichte in Abhängigkeit von Frequenz und Temperatur beschreibt, universell in dem Sinn, daß diese Funktion nur von ν und T , nicht aber von Beschaffenheit, Form und Material der Wände des Hohlraums abhängt. Für die Gesamtstrahlung S des Hohlraums pro Flächeninhalt der Hohlraumoberfläche fand man außerdem das *Stefan-Boltzmannsche Gesetz* [101], [834]

$$S = \sigma T^4$$

mit der Konstanten $\sigma = 5,67032 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$, und für die Wellenlänge maximaler Intensität im emittierten Spektrum, λ_{max} , das *Wiensche Verschiebungsgesetz* [927], [928], [929]

²⁵Diese Modellvorstellung stammt von Wien und Lummer [931]. Einen Überblick über frühe experimentelle Realisierungen findet man in [436].

$$\lambda_{\max} \cdot T = 0,29 \text{ cm K},$$

demzufolge das Intensitätsmaximum für steigende Temperaturen in Richtung höherer Frequenzen wandert²⁶. Der Versuch, die genaue Gestalt des oben erwähnten universellen Gesetzes zu finden, das die Energiedichte $u(\nu, T)$ der der Temperaturstrahlung eines schwarzen Strahlers in Abhängigkeit von der Frequenz und der Temperatur beschreibt, erwies sich jedoch schließlich als eine Aufgabe, die im Rahmen der klassischen Physik nicht zu bewältigen war. Mit dem *Rayleigh-Jeansschen Strahlungsgesetz* [470], [726]

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T,$$

das erstmals im Jahr 1900 veröffentlicht wurde, gibt es zwar ein Gesetz, das die Energiedichte bei kleinen Frequenzen gut beschreibt. Bei hohen Frequenzen sieht dies jedoch anders aus, dort liefert es viel zu hohe Werte. Insbesondere divergiert die Energiedichte pro Frequenz für $\nu \rightarrow \infty$, und wenn man über alle Frequenzen integriert, erhält man eine unendlich hohe integrale Energiedichte; man bezeichnet diesen Sachverhalt als *Ultraviolett-Katastrophe*²⁷. Daneben gibt es auch das *Wiensche Strahlungsgesetz* [929]

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} e^{-h\nu/k_B T},$$

das schon seit 1896 bekannt war. Es liefert für hohe Frequenzen eine gute Beschreibung der Energiedichte, ist aber dafür bei kleinen Frequenzen unbrauchbar. Hier sind die Abweichungen allerdings viel geringer, so gering, daß man ein paar Jahre dachte, mit dem Wienschen Strahlungsgesetz die richtige Relation gefunden zu haben. In der Tat glaubte man am Ende des neunzehnten Jahrhunderts, das Problem liege in einer vernünftigen Herleitung dieses Gesetzes und nicht mehr im Auffinden eines solchen Gesetzes an sich. Erste Zweifel daran ergaben sich jedoch aus Resultaten, die H. Beckmann 1898 im Rahmen seiner Dissertation an der Universität Tübingen gefunden hatte. Durch den Einsatz ganz neuer Meßmethoden konnte das zunächst 1899 durch Otto Lummer und Ernst Pringsheim [569] sowie 1900 noch deutlicher durch Heinrich Rubens und Ferdinand Kurlbaum [744] jeweils an der Physikalisch-Technischen Reichsanstalt in Berlin bestätigt werden. Deren Messungen ergaben unübersehbare Differenzen zum Wienschen Gesetz, dessen Werte von den gemessenen Energien für niedrige Frequenzen systematisch übertroffen wurden²⁸.

1.2.2 Spezifische Wärme von Festkörpern

Die *spezifische Wärmekapazität* oder kurz *spezifische Wärme* eines Stoffes beschreibt die Fähigkeit dieses Stoffes, zugeführte Wärme in Form von thermischer Energie zu speichern.

²⁶Das Wiensche Verschiebungsgesetz wurde von Wien 1893 hergeleitet; es tauchte bereits 1885 und 1890 bei Rad von Kövesligethy auf, der das Resultat jedoch unter Verwendung des Ätherbegriffs fand [509], [510].

²⁷Dieser Begriff wurde 1911 von P. Ehrenfest geprägt [228].

²⁸Genauerer hierzu liefert ebenfalls [436].

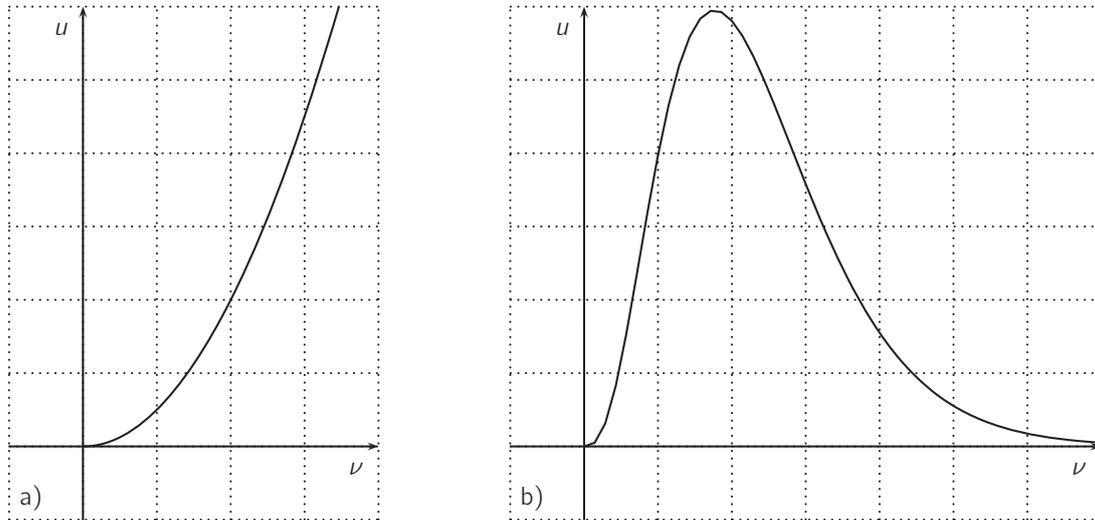


Abbildung 1.1: a) Rayleigh-Jeansches und b) Wiensches Strahlungsgesetz

Steht Q für die Wärmemenge und T für die absolute Temperatur, dann ist die spezifische Wärme c eines Stoffes definiert durch

$$c = \frac{1}{m} \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \frac{\Delta Q}{\Delta T}$$

und gibt somit an, wie die einem aus diesem Stoff bestehenden Körper zugeführte Wärmemenge und dessen dadurch erzielte Temperaturänderung zusammenhängen²⁹. Ist M die Molmasse des betrachteten Stoffes, dann bezeichnet man $c_{\text{mol}} = cM$ als *Molwärme* oder *molare Wärmekapazität*.

²⁹Das ist keine gewöhnliche Ableitung, da thermodynamische Zustandsänderungen im allgemeinen nicht nur von der Temperatur, sondern auch von anderen Größen wie Druck oder Volumen abhängen. Man unterscheidet daher die spezifische Wärme bei konstantem Druck und diejenige bei konstantem Volumen und kann diese dann über partielle Ableitungen berechnen; man schreibt dafür

$$c_p = \left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_p$$

beziehungsweise

$$c_v = \left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_v.$$

Diese beiden Größen können sich beträchtlich unterscheiden. Das ist insbesondere bei Gasen der Fall; bei vielen Flüssigkeiten und Festkörpern fernab von deren Umwandlungstemperaturen ist c dagegen näherungsweise konstant. In diesem Fall gilt die bekannte Relation

$$\Delta Q = c m \Delta T,$$

und die spezifische Wärmekapazität gibt die Arbeit an, die pro Kelvin Temperaturdifferenz verrichtet werden muß, um die Temperatur eines Körper der Masse m zu erhöhen.

Interessiert man sich speziell für kristalline Festkörper, so sind zumindest fern von deren Schmelzpunkten die Möglichkeiten der Aufnahme thermischer Energie auf die Anregung von Gitterschwingungen beschränkt. Dabei stehen jedem Teilchen drei Freiheitsgrade zur Verfügung, und gemäß dem Gleichverteilungssatz der statistischen Mechanik, wonach die mittlere kinetische Energie eines Teilchens pro Freiheitsgrad $k_B T/2$ beträgt³⁰, ist die kinetische Energie des Festkörpers pro Teilchen $E_{\text{kin}} = 3k_B T/2$. Dabei ist $k_B = 1,3 \cdot 10^{-23}$ J/K die Boltzmann-Konstante. Gemäß dem Virialsatz³¹ steckt in den Gitterschwingungen im zeitlichen Mittel gleich viel potentielle wie kinetische Energie, die gesamte innere Energie des Festkörpers pro Teilchen ist daher $u = 3k_B T$. Ein Mol des Stoffes besteht aus $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$ Teilchen und enthält somit die innere Energie $U = 3N_A k_B T = 3RT$; hier ist $R = 8,314$ J/mol K die allgemeine Gaskonstante. Die molare Wärmekapazität eines Festkörpers beträgt also unabhängig vom Stoff und von der Temperatur

$$c_{\text{mol}} = 3R.$$

Das ist das *Gesetz von Dulong und Petit* [693]. Es wurde 1819 von seinen Namensgebern experimentell entdeckt und gilt bei genügend hohen Temperaturen wie etwa bei Raumtemperatur, für viele Festkörper, insbesondere für Metalle und allgemeiner für Stoffe mit einfacher Kristallstruktur, in recht guter Näherung. Bei tiefen Temperaturen wird die Wärmekapazität jedoch immer kleiner, um bei Annäherung an den absoluten Nullpunkt schließlich ebenfalls gegen Null zu gehen³². Solche Abweichungen vom Dulong-Petitschen Gesetz wurden erstmals 1875 von H. F. Weber und später immer wieder beobachtet, ohne daß man sich zunächst einen Reim darauf machen konnte. Man hatte es wieder mit einem Sachverhalt zu tun, der im Rahmen der klassischen Physik, in diesem Fall der klassischen statistischen Mechanik, nicht zu erklären war.

1.2.3 Stabilität der Atome

Die umgangssprachlich gelegentlich anzutreffende Gleichsetzung der Begriffe „Atomphysik“ und „Quantentheorie“ ist zwar unberechtigt, sie kann aber zumindest als Hinweis gewertet werden, daß die erstere ganz wesentlich zur Entwicklung der letzteren beigetragen hat. Dabei ist das Konzept der Atome bekanntlich viel älter. Das erste Atommodell findet man bereits im antiken Griechenland, wo der Philosoph Demokrit oder genauer gesagt und ursprünglich dessen Lehrer Leukipp um 400 v. Chr. die Hypothese aufstellte, *daß alle Materie aus kleinsten, nicht weiter zerlegbaren Bausteinen besteht*. Er prägte auch den Namen, in dem er seine kleinsten Teilchen als $\alpha\tau\omicron\mu\omicron\varsigma$ (atomos) bezeichnete, auf deutsch „unteilbar“.

³⁰Siehe zum Beispiel [830].

³¹Siehe auch hierzu [830].

³²Diese Aussage ist eine Variante des dritten Hauptsatzes der Thermodynamik.

1.2.3.1 Die Atomhypothese

Die Atomhypothese wurde in der Neuzeit wiederentdeckt, als J. Dalton im Jahre 1800 das *Gesetz der konstanten und multiplen Proportionen* fand [171]. Die Tatsache, daß die Massenverhältnisse von Elementen, die sich zu verschiedenen chemischen Verbindungen vereinigen, dabei stets im Verhältnis ganzer Zahlen zueinander stehen, läßt sich durch irgendwelche kontinuierlichen Vorstellungen überhaupt nicht, durch die Atomvorstellung dagegen völlig zwanglos erklären. Die Massenproportionen der Atome in den Molekülen, aus denen die Verbindungen bestehen, geben das Verhältnis der Atommassen beziehungsweise der ganzzahligen Vielfachen der Atommassen wieder. Daltons Entdeckung stellt nicht nur die Rehabilitation der Atomhypothese dar, sondern insbesondere auch den ersten empirischen Hinweis auf die Plausibilität dieses Modells.

In der Folgezeit setzte sich die Atomvorstellung zwar weitgehend durch, was aber keineswegs einheitlich mit der Überzeugung verbunden war, daß es sich dabei um ein mehr oder weniger realistisches Abbild der Realität handle. Detaillierte Hypothesen über irgendwelche inneren Strukturen der Atome gab es nicht, und vielfach wurden Atome lediglich als nützliche Modelle angesehen, mit denen man in der Chemie und in der Physik zwar eine Menge erklären kann, die aber ansonsten mit der Realität nichts zu tun haben. Ein besonders entschiedener Verfechter dieser Haltung war Ernst Mach, der Atome als reine Gedankenkonstrukte betrachtete [574], [575], [576] und bei Kollegen, die Atome für real hielten, mit der Frage zu kontern pflegte, ob sie schon mal welche gesehen hätten. Auch Wilhelm Ostwald war zunächst im Rahmen seiner zur fundamentalen Kritik des Materialismus ausgebauten Energetik ein prominenter Vertreter der Kritiker der Atomhypothese [660]. Angesichts zunehmender experimenteller wie auch theoretischer Fortschritte akzeptierten später sowohl Mach (1906) als auch Ostwald (1908) die Existenz der Atome.

Von aller Kritik unbeeindruckt entwarf J. J. Thomson im Anschluß an seine Entdeckung des Elektrons [874] im Jahre 1897 das erste konkrete Atommodell, das als *Rosinenkuchen-Modell*³³ in die Physik-Geschichte eingegangen ist [876]. Danach sind Atome kontinuierlich verteilte Wolken aus positiver Ladung mit darin verteilten punktförmigen negativ geladenen Elektronen, die wie Rosinen im Kuchenteig sitzen; genauer gesagt sind sie in Ringen angeordnet, deren Mittelpunkte mit demjenigen des Atoms zusammenfallen³⁴. Die tatsächliche, für die damalige Zeit erstaunliche Leistungsfähigkeit des Rosinenkuchenmodells ist heute etwas in Vergessenheit geraten. Ein solches System ist stabil³⁵, und Thomson konnte damit immerhin

³³Englisch *Plum Pudding Model*.

³⁴Eine besonders schöne anschauliche Darstellung des Rosinenkuchenmodells findet man in [310].

³⁵Müller und Wiesner zeigten das 1995 mit einer einfachen Überlegung am Beispiel des Heliumatoms [626]: R sei der Radius der Ladungskugel mit positiver Ladung $2e$ und ρ der Radius des Rings, auf dem die beiden Elektronen zu finden sind. Die gegenseitige abstoßende Kraft der beiden Elektronen ist dann

$$F_1 = \frac{e^2}{4\rho^2},$$

während für die anziehende Kraft zwischen der Ladungskugel und den beiden Elektronen nach dem Gaußschen Gesetz nur die positive Ladung $q = 2e\rho^3/R^3$ innerhalb des Bereichs mit $r < \rho$ verantwortlich ist, die man

qualitativ die diskreten Niveaus der Atomspektren erklären. Dazu betrachtete er harmonische Schwingungen der Elektronen um deren Gleichgewichtslage und zeigte, daß diese ganz bestimmte, wohldefinierte, von der Elektronenzahl abhängige Eigenfrequenzen aufweisen. Solche Schwingungen führen zur Emission monochromatischer elektromagnetischer Wellen mit den entsprechenden Frequenzen. Allerdings konnte keine quantitative Übereinstimmung mit den gemessenen Atomspektren gefunden werden.

Abgesehen davon gaben bereits in den neunziger Jahren Experimente von Lenard mit Elektronenstrahlen Anlaß zum Zweifel an diesem Modell. Lenard stellte fest, daß mit Hilfe eines Kathodenstrahl-Rohres erzeugte Elektronen-Strahlen in der Lage sind, Materie, zum Beispiel eine dünne Aluminiumfolie³⁶, genauer gesagt etwa 10000 Atomschichten, zu durchdringen [546]. Sie werden dabei zwar etwas geschwächt, sind aber danach und auch noch nach einigen Zentimetern Luft noch nachweisbar. Darüberhinaus ergab sich auch, daß Atome für Elektronen um so durchlässiger sind, je schneller die letzteren sind. Dies sprach gegen eine kontinuierliche Materieverteilung im Inneren der Atome; Lenard selbst kam dabei bereits zu der Folgerung, daß Atome so leer wie das Weltall seien, und er sprach schon von Kernen und sie umgebenden Kraftfeldern, wenn er wohl auch noch nicht die Vorstellung von nur einem Kern in jedem Atom hatte.

1.2.3.2 Das Rutherfordsche Atommodell

Der Durchbruch in diese Richtung und damit ein ganz entscheidender Schritt hin zu einem modernen Atommodell gelang 1911 Ernest Rutherford mit seinem berühmten Streuexperiment [761]. Beim Rutherfordschen Streuexperiment werden α -Teilchen, also doppelt ionisierte Helium-Kerne, beim Durchdringen einer dünnen Goldfolie beobachtet und die auftretenden Streuwinkel gemessen. Man beobachtet dabei viele α -Teilchen mit kleinen Streuwinkeln, also solche, die praktisch ungestört durch die Goldfolie hindurchfliegen, aber auch viele mit großen Streuwinkeln und sogar solche mit Streuwinkeln größer als 90° , also α -Teilchen, die zurückgestreut werden. Dies sprach wieder deutlich gegen eine kontinuierliche Atomvorstellung im Stile des Rosinenkuchenmodells, da dort nur kleine Streuwinkel auftreten dürften. An die Stelle des letzteren trat nun das *Rutherfordsche Atommodell*: Das Atom hat einen Kern, dessen Radius R sehr viel kleiner als der Atomradius ist. Der Kern enthält praktisch die gesamte Masse des Atoms; er hat die positive elektrische Ladung $Z_1 e$, wobei e der Betrag

sich dazu als punktförmig im Mittelpunkt vorliegend denken darf. Für die abstoßende Kraft gilt daher

$$F_2 = -\frac{2e^2\rho}{R^3}.$$

Aus $F_1 = -F_2$ folgt

$$\rho = \frac{R}{2},$$

und da das für beide Elektronen gleichermaßen gilt, befinden sie sich einander gegenüber jeweils in der Mitte einer Verbindungslinie zwischen Mittelpunkt und Rand der Ladungskugel.

³⁶Solche Aluminiumfolien mit einer Dicke von circa $5 \cdot 10^{-4}$ cm heißen *Lenard-Fenster*.

der Ladung des Elektrons und Z_1 die Ordnungszahl des Atoms ist. Entsprechend gibt es in der Umgebung des Atomkerns ein Coulomb-Feld mit dem Potential

$$V = \frac{Z_1 e^2}{r}, \quad (1.12)$$

sodaß auf ein Teilchen der Ladung $Z_2 e$ die Kraft

$$\vec{F} = -\frac{Z_1 Z_2 e^2}{r^3} \vec{r} \quad (1.13)$$

wirkt und somit ein spezieller Fall des klassischen Kepler-Problems der Bewegung im Zentralfeld vorliegt. Die Elektronen bewegen sich bei diesem Modell im Coulomb-Feld des Atomkerns in der Atomhülle wie bei einem Miniatur-Planetensystem auf geschlossenen Bahnen um den Atomkern.

Mit diesen Annahmen gelingt – auf rein klassischem Wege – eine sowohl anschauliche als auch quantitative Deutung der Ergebnisse des Rutherford'schen Streuexperimentes. Die anschauliche Deutung ist unmittelbar klar: Treffen α -Teilchen auf Atome, so führen Begegnungen mit den Elektronen der Atomhülle zu keinen merklichen Ablenkungen der α -Teilchen. Geraten sie jedoch in die Nähe der Atomkerne, so werden sie viel stärker abgelenkt. Um auch die quantitative Deutung zu verstehen, müssen wir etwas ausholen.

Bei der quantitativen Analyse von Streuexperimenten spielt der sogenannte *Streuquerschnitt* oder *Wirkungsquerschnitt* eine wesentliche Rolle; er hängt von der Energie E der einfallenden Teilchen ab und beschreibt das Verhältnis der Anzahl der einlaufenden und der Anzahl der gestreuten Teilchen. Man unterscheidet dabei den *totalen Wirkungsquerschnitt* und den *differentiellen Wirkungsquerschnitt*. Der totale Wirkungsquerschnitt ist definiert als

$$\sigma(E) = \frac{\text{Anzahl der pro Sekunde gestreuten Teilchen}}{\text{Anzahl der pro Sekunde und cm}^2 \text{ einfallenden Teilchen}}$$

und beschreibt folglich die Gesamtzahl aller gestreuter Teilchen. Wie die Definition zeigt, hat der totale Wirkungsquerschnitt die Dimension einer Fläche. Das trägt der Vorstellung Rechnung, daß man jedem Streuzentrum eine Fläche zuordnen kann, nämlich gerade den Streuquerschnitt σ . Ein Streueignis soll genau dann stattfinden, wenn das einlaufende Teilchen diese Fläche trifft. Der differentielle Wirkungsquerschnitt dagegen ist gegeben durch $d\sigma(\Omega, \theta)/d\Omega$, wobei θ der Streuwinkel, also der Winkel zwischen der einlaufenden und der auslaufenden Richtung und Ω der Raumwinkel ist, und beschreibt die Anzahl der Teilchen, die in ein Raumwinkelement $d\Omega$ um die durch die Winkel θ und ϕ gegebene räumliche Richtung gestreut werden. Wie unmittelbar ersichtlich ist, lautet der Zusammenhang zwischen den beiden

$$\sigma = \iint \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \quad (1.14)$$

Häufig kann man bei Streuprozessen *Axialsymmetrie* voraussetzen. In diesem Fall ist nur der Streuwinkel θ von Bedeutung, da sich die gestreuten Teilchen mit gleichem θ jeweils gleichmäßig auf einen Ring um die Symmetrieachse verteilen. Der Abstand b eines einlaufenden

Teilchens zu dieser Achse heißt *Stoßparameter*. Betrachtet man nun im Strom der einlaufenden Teilchen einen Kreisring um die Achse mit Innenradius b und Außenradius $b + db$, so werden die durch diesen Kreisring einlaufenden Teilchen aufgrund der axialen Symmetrie in einen Raumwinkel $d\Omega$ gestreut, der wiederum einem Kreisring entspricht, und zwar einem, der durch die Streuwinkel θ und $\theta + d\theta$ begrenzt wird (siehe Abbildung 1.2). Aufgrund der Erhaltung der Teilchenzahl ist die Anzahl der durch den einen Kreisring einlaufenden Teilchen gleich derjenigen der durch den anderen Kreisring auslaufenden; mit der Stromdichte j der einlaufenden Teilchen gilt daher

$$2j\pi b db = j d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = 2j\pi \sin\theta d\theta \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

und für den differentiellen Wirkungsquerschnitt folglich

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|, \quad (1.15)$$

wobei die Betragsstriche vorsichtshalber zu setzen sind, da Wirkungsquerschnitte stets positiv sein müssen.

Bevor wir nun mit diesen Begriffen ausgerüstet zum Rutherford'schen Streuexperiment zurückkehren, betrachten wir vorab zu deren Veranschaulichung ein ganz einfaches Beispiel, nämlich die elastische Streuung von Teilchen an einer harten Kugel mit Radius R . Gemäß dem Reflexionsgesetz besteht zwischen dem Einfallswinkel α und dem Streuwinkel θ die Beziehung $2\alpha + \theta = \pi$ und damit $\sin\alpha = \cos\theta/2$; für den Stoßparameter findet man $b = R \sin\alpha = R \cos\theta/2$. Damit und mit Hilfe der Relation $\sin\theta = 2 \cos\theta/2 \sin\theta/2$ erhält man mit

$$\frac{db}{d\theta} = \frac{R}{2} \sin\theta/2$$

aus (1.15) für den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{R \cos\theta/2}{2 \cos\theta/2 \sin\theta/2} \frac{R}{2} \sin\theta/2 = \frac{R^2}{4},$$

unabhängig von θ . Gemäß (1.14) folgt hieraus für den totalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = \frac{R^2}{4} \oint d\Omega = \pi R^2.$$

Das ist genau die Querschnittsfläche der Kugel und bestätigt damit die oben beschriebene anschauliche Interpretation des Streuquerschnitts.

Betrachtet man nun wieder das Rutherford'sche Atommodell, so kann man das gleichnamige Experiment als klassische Streuung der α -Teilchen am für sie abstoßenden Coulomb-Potential der Atomkerne auffassen. Wir berechnen hierfür den differentiellen Wirkungsquerschnitt. Aus der klassischen Mechanik weiß man, daß sich Teilchen im Coulomb-Potential

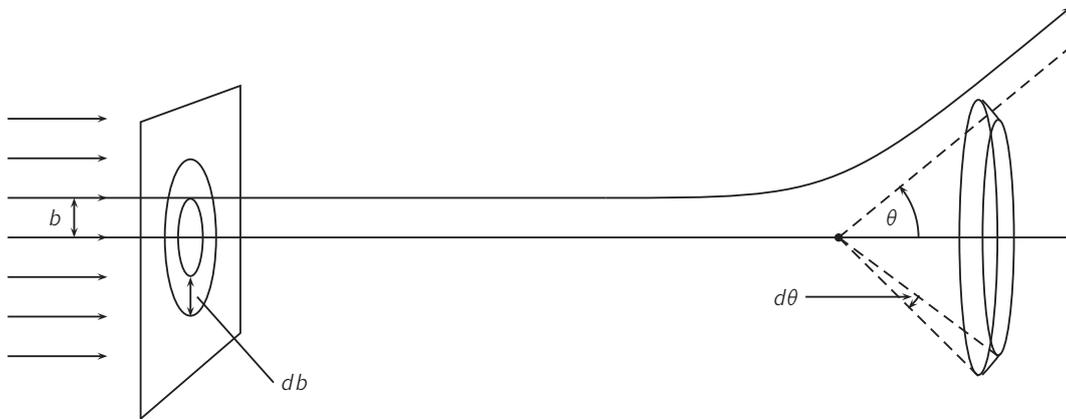


Abbildung 1.2: Zur Berechnung des differentiellen Streuquerschnitts

auf Bahnen bewegen, welche die Form von Kegelschnitten haben; genauer gesagt folgt für Teilchen mit Masse m , Ladung $Z_2 e$ und kinetischer Energie T bei Streuung an einem Streuzentrum im Ursprung des Koordinatensystems mit Ladung $Z_1 e$ und Masse $M \gg m$ aus (1.12) beziehungsweise (1.13) für deren Bahn³⁷

$$r = \frac{Z_1 Z_2 e^2 l^2}{1 - \varepsilon \cos \phi}.$$

Dabei ist ε die Exzentrizität der Bahn, definiert durch

$$\varepsilon^2 = 1 + \frac{2Tl^2}{Z_1 Z_2 e^2 m},$$

l ist der Bahndrehimpuls des einlaufenden Teilchens,

$$l = bp = b\sqrt{2mT},$$

und beides zusammen ergibt

$$\varepsilon^2 = 1 + \frac{4Tb^2}{Z_1 Z_2 e^2}. \quad (1.16)$$

Für $E = T + V > 0$ liefert das einen Hyperbelast. α sei der Winkel zwischen den beiden Asymptoten dieses Hyperbelastes, also der Ablenkwinkel des Teilchens. Er hängt mit dem Streuwinkel über die Relation $\alpha + \theta = \pi$ zusammen. Außerdem gilt im Fall $1 - \varepsilon \cos \phi = 0$ oder $r = \infty$ für den Polarwinkel ϕ die Beziehung $\alpha = 2\phi$. Damit erhält man

$$\cos \frac{\alpha}{2} = \frac{1}{\varepsilon}$$

³⁷Eigentlich müßte man hier etwas subtiler vorgehen, da natürlich beide Streupartner abgelenkt werden. Wir betrachten hier die Näherung eines Streuzentrums mit unendlicher Masse; auf Begriffe wie *Schwerpunktskoordinaten* und *reduzierte Masse*, mit denen man präziser arbeiten kann, können wir an dieser Stelle verzichten.

und folglich auch

$$\sin \frac{\theta}{2} = \frac{1}{\varepsilon}.$$

In (1.16) eingesetzt ergibt dies für die Exzentrizität mit Hilfe von etwas Trigonometrie

$$\varepsilon^2 = \frac{1}{\sin^2 \theta/2} = 1 + \operatorname{ctg}^2 \theta/2$$

und für den Stoßparameter

$$b = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2T} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}.$$

Das setzt man in (1.14) ein, verwendet wieder $\sin \theta = 2 \cos \theta/2 \sin \theta/2$ sowie

$$\frac{db}{d\theta} = -\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4T \sin^2 \theta/2},$$

findet so

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2T} \frac{\operatorname{ctg} \theta/2}{2 \cos \theta/2 \sin \theta/2} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4T \sin^2 \theta/2}$$

und weiter mit der Anfangsgeschwindigkeit v_0 der einlaufenden Teilchen und $T = \frac{1}{2} m v_0^2$ den *Rutherford'schen Streuquerschnitt*

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{4m^2 v_0^2 \sin^4 \theta/2} \quad (1.17)$$

mit seiner typischen $1/\sin^4$ -Abhängigkeit vom Streuwinkel³⁸. Ist D die Dicke der verwendeten Folie und N die Anzahl der Atome pro cm^3 , die letztere enthält, so ergibt sich aus (1.17) für die Anzahl dn der unter dem Streuwinkel θ in das Raumwinkelement $d\Omega$ gestreuten Teilchen pro Zahl n der eingeschossenen Teilchen (die *Zählrate*) die *Rutherford'sche Streuformel*

$$\frac{dn(\Omega, \theta)}{n} = \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4 D N}{4m^2 v_0^2 \sin^4 \theta/2} d\Omega.$$

Wir kommen gleich darauf zurück; zuvor jedoch berechnen wir den totalen Wirkungsquerschnitt gemäß (1.14), finden dabei

$$\sigma = \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{4m^2 v_0^2} \iint \frac{d\Omega}{\sin^4 \theta/2} = \frac{\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4}{2m^2 v_0^2} \int_0^\pi \frac{\sin \theta}{\sin^4 \theta/2} d\theta$$

³⁸Wir betonen nochmals, daß diese Herleitung des Rutherford'schen Streuquerschnitts auf rein klassischem Weg erfolgt. Interessanterweise kommt, wenn man den Streuquerschnitt für Streuungen im Coulombfeld im Rahmen der quantenmechanischen Streutheorie herleitet, genau dasselbe heraus, wie G. Wentzel, von dem hier später noch anderweitig zu reden ist, schon 1926 zeigte [921]. Das ist jedoch reiner Zufall und darf nicht zur Diskussion des Anwendbarkeitsbereichs der klassischen Physik herangezogen werden.

$$= \frac{\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4}{m^2 v_0^2} \int_0^\pi \frac{\cos \theta/2 \sin \theta/2}{\sin^4 \theta/2} d\theta = \frac{\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4}{m^2 v_0^2} \int_0^\pi \frac{\cos \theta/2}{\sin^3 \theta/2} d\theta$$

und mit der Substitution $t = \sin \theta/2$ weiter

$$\sigma = \frac{\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4}{2m^2 v_0^2} \int_0^1 \frac{dt}{t^3} = \infty.$$

Wir erhalten einen unendlichen Streuquerschnitt. Das ist jedoch nicht weiter verwunderlich, denn das Coulomb-Potential hat unendliche Reichweite, und da der Streuquerschnitt den Inhalt der Fläche angibt, die ein Teilchen treffen muß, damit es gestreut wird, muß er für jede Kraft mit unendlicher Reichweite ebenfalls unendlich werden³⁹.

Die Rutherford'sche Streuformel beschreibt die Zählraten, die bei Durchführung des Rutherford'schen Streuexperiments gefunden werden, mit großer Genauigkeit; lediglich bei sehr kleinen Abständen der α -Teilchen von den Atomkernen treten Abweichungen auf. Dies kann wiederum zur Bestimmung einer Abschätzung des Kernradius R verwendet werden. Es ergibt sich hierbei $R < 6 \cdot 10^{-15}$ m, also etwa ein Hunderttausendstel des Atomradius.

1.2.3.3 Instabile Atome

Der Erfolg des Rutherford'schen Atommodells war jedoch trügerisch, denn er bedeutete gleichzeitig die nächste tiefe Krise der klassischen Physik. Schon der Versuch, die damals bereits wohlbekannten diskreten Spektrallinien der Atomspektren zu erklären, scheitert, weil eigentlich Bahnen mit *beliebigem Radius* und daher *kontinuierlich aufeinander folgende Energiewerte* für die Elektronen in der Atomhülle vorliegen müßten. Deutet man das Zustandekommen von Emissions- und Absorptionsspektren als Übergänge der Hüllenelektronen von einer Bahn auf eine andere, so müßten konsequenterweise keine diskreten sondern kontinuierliche Atomspektren entstehen. Sehr viel schwerwiegender ist jedoch etwas anderes: Elektronen, die den Atomkern umlaufen, sind *beschleunigt bewegte elektrische Ladungen* und geben folglich ständig elektromagnetische Wellen ab. Das ist mit einer zusätzlichen, durch die Felder der Elektronen verursachten Kraft auf sie selbst verbunden, die man *Strahlungsrückwirkungskraft* nennt, und insbesondere mit der Abgabe von Energie an die Umgebung. Will man das Verhalten eines klassischen, einen Atomkern umlaufenden Elektrons beschreiben, muß man die Auswirkungen der Strahlungsrückwirkungskraft und des Energieverlusts des Elektrons miteinbeziehen.

Die Beschreibung beschleunigt bewegter elektrischer Ladungsträger im Rahmen der klassischen Elektrodynamik ist Gegenstand der *Maxwell-Lorentz-Theorie* [552] - [556]. Diese geht von der vereinfachenden Annahme aus, daß die Bewegung der Ladungsträger gemäß den Gesetzen der Mechanik von Massenpunkten erfolgt und die beschleunigte Ladungsverteilung zwar räumlich ausgedehnt sein darf, aber starr und fest an die Ladungsträger gekoppelt

³⁹Das gilt jedoch in der Quantenmechanik ganz allgemein nur für Potentiale, die nicht schneller als mit $1/r^2$ abfallen.

sein soll. Grundlage des Modells sind daher die Maxwell-Gleichungen in Verbindung mit den Newtonschen Bewegungsgleichungen, die zu einer phänomenologischen Bewegungsgleichung zusammengesetzt werden⁴⁰.

Hier genügt zusätzlich die Beschränkung auf ein einzelnes geladenes Teilchen sowie auf nichtrelativistische Bewegungen, außerdem sei die mit dem Teilchen verbundene Ladungsverteilung kugelsymmetrisch. Dazu seien \vec{v} die Geschwindigkeit des Teilchens und ρ_T und \vec{j}_T die Ladungs- beziehungsweise Stromdichte der mitbewegten Ladungsverteilung; hierfür gilt die Relation $\vec{j}_T = \rho_T \vec{v}$. Außerdem seien ρ_{ext} und \vec{j}_{ext} die entsprechenden Dichten der Quellen eines äußeren Feldes. Die Feldstärken des gesamten Systems werden durch die Maxwell-Gleichungen

$$\begin{aligned} \text{rot } \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \\ \text{div } \vec{E} &= 4\pi (\rho_T + \rho_{\text{ext}}), \\ \text{rot } \vec{B} &= \frac{1}{c} \left[\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + 4\pi (\vec{j}_T + \vec{j}_{\text{ext}}) \right], \\ \text{div } \vec{B} &= 0 \end{aligned}$$

beschrieben, und der Ortsvektor des Teilchens durch die Bewegungsgleichung

$$m_0 \ddot{\vec{r}} = \iiint \left(\rho_T \vec{E} + \frac{1}{c} \vec{j}_T \times \vec{B} \right) d^3r.$$

Dieses gekoppelte Gleichungssystem gilt es nun zu lösen. Wie üblich führen wir über

$$\vec{B} = \text{rot } \vec{A}, \quad \vec{E} = -\text{grad } \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

Potentiale ein, für die wir die Lorentz-Eichung

$$\text{div } \vec{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0$$

voraussetzen. Damit erhalten die Maxwell-Gleichungen die Form

$$\begin{aligned} \square \varphi &= -4\pi (\rho_T + \rho_{\text{ext}}), \\ \square \vec{A} &= -\frac{4\pi}{c} (\vec{j}_T + \vec{j}_{\text{ext}}). \end{aligned}$$

Hierfür erhalten wir in bekannter Weise Lösungen in Form der retardierten Potentiale

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{c} \iiint \frac{\vec{j}_T(\vec{r}', t - |\vec{r} - \vec{r}'|/c)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r' + \frac{1}{c} \iiint \frac{\vec{j}_{\text{ext}}(\vec{r}', t - |\vec{r} - \vec{r}'|/c)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r',$$

⁴⁰Die hier beschriebene Herleitung orientiert sich im wesentlichen an [556]. Details und weiterführende Informationen findet der Leser auch in [454] und [846].

$$\varphi(\vec{r}, t) = \iiint \frac{\rho_{\text{T}}(\vec{r}', t - |\vec{r} - \vec{r}'|/c)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' + \iiint \frac{\rho_{\text{ext}}(\vec{r}', t - |\vec{r} - \vec{r}'|/c)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r'.$$

Zur Lösung der Bewegungsgleichung beachten wir zunächst, daß in der unrelativistischen Näherung $v/c \approx 0$ gilt und damit der Ausdruck $\vec{j}_{\text{T}} \times \vec{B}/c = \rho_{\text{T}} \vec{v} \times \vec{B}/c$ vernachlässigt werden kann. Die Bewegungsgleichung vereinfacht sich somit zu

$$m_0 \ddot{\vec{r}} = - \iiint \rho_{\text{T}} \left(\text{grad } \varphi + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) d^3 r,$$

oder

$$m_0 \ddot{\vec{r}} = \vec{F}_{\text{T}} + \vec{F}_{\text{ext}},$$

mit der Strahlungsrückwirkungskraft

$$\begin{aligned} \vec{F}_{\text{T}} = & - \iiint \rho_{\text{T}}(\vec{r}, t) \left[\text{grad} \iiint \frac{\rho_{\text{T}}(\vec{r}', t - |\vec{r} - \vec{r}'|/c)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \right. \\ & \left. + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \iiint \frac{\vec{j}_{\text{T}}(\vec{r}', t - |\vec{r} - \vec{r}'|/c)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \right] d^3 r \end{aligned}$$

und der äußeren Kraft

$$\begin{aligned} \vec{F}_{\text{ext}} = & - \iiint \rho_{\text{T}}(\vec{r}, t) \left[\text{grad} \iiint \frac{\rho_{\text{ext}}(\vec{r}', t - |\vec{r} - \vec{r}'|/c)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \right. \\ & \left. + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \iiint \frac{\vec{j}_{\text{ext}}(\vec{r}', t - |\vec{r} - \vec{r}'|/c)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \right] d^3 r. \end{aligned}$$

Letztere hängt von der speziellen Gestalt der äußeren Felder ab und muß daher für jede konkrete Konfiguration eigens ermittelt werden, während erstere konfigurationsunabhängig und spezifisch für das vorliegende Modell gegeben ist. Wir betrachten die nichtrelativistische Näherung; das bedeutet, daß die Retardierung in $t' = t - |\vec{r} - \vec{r}'|/c$ gering ist. Zur weiteren Berechnung der Strahlungsrückwirkungskraft entwickeln wir daher ρ_{T} und \vec{j}_{T} in Taylorreihen um $t = t'$. Wir erhalten

$$\rho_{\text{T}}(\vec{r}', t') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{|\vec{r} - \vec{r}'|^n}{c^n} \frac{\partial^n \rho_{\text{T}}(\vec{r}', t)}{\partial t^n}$$

sowie

$$\vec{j}_{\text{T}}(\vec{r}', t') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{|\vec{r} - \vec{r}'|^n}{c^n} \frac{\partial^n \vec{j}_{\text{T}}(\vec{r}', t)}{\partial t^n}.$$

und damit weiter

$$\begin{aligned}
 m_0 \ddot{\vec{r}}(t) = & - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! c^n} \iiint \iiint \rho_{\text{T}}(\vec{r}, t) \frac{\partial^n}{\partial t^n} \left[\rho_{\text{T}}(\vec{r}', t) \text{grad} |\vec{r} - \vec{r}'|^{n-1} \right. \\
 & \left. + \frac{|\vec{r} - \vec{r}'|^{n-1}}{c^2} \frac{\partial \vec{j}_{\text{T}}(\vec{r}', t)}{\partial t} \right] d^3 r d^3 r' + \vec{F}_{\text{ext}}.
 \end{aligned}$$

Die ersten beiden Ordnungen des $\rho_{\text{T}}(\vec{r}', t)$ -Termes dieser Reihenentwicklung verschwinden, denn für $n = 0$ gilt mit $\vec{R} = \vec{r} - \vec{r}(t)$ und $\vec{R}' = \vec{r}' - \vec{r}(t)$

$$\begin{aligned}
 & \iiint \iiint \rho_{\text{T}}(\vec{r}, t) \rho_{\text{T}}(\vec{r}', t) \text{grad}_{\vec{r}} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r d^3 r' \\
 = & \iiint \iiint \rho_{\text{T}}(\vec{R}) \rho_{\text{T}}(\vec{R}') \text{grad}_{\vec{R}} \frac{1}{|\vec{R} - \vec{R}'|} d^3 R d^3 R' \\
 = & \iiint \iiint \rho_{\text{T}}(\vec{R}') \rho_{\text{T}}(\vec{R}) \text{grad}_{\vec{R}'} \frac{1}{|\vec{R} - \vec{R}'|} d^3 R d^3 R' \\
 = & - \iiint \iiint \rho_{\text{T}}(\vec{R}) \rho_{\text{T}}(\vec{R}') \text{grad}_{\vec{R}} \frac{1}{|\vec{R} - \vec{R}'|} d^3 R d^3 R' = 0,
 \end{aligned}$$

und für $n = 1$ findet man

$$\text{grad} |\vec{r} - \vec{r}'|^{1-1} = \text{grad} 1 = 0.$$

Daraus folgt für die Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned}
 m_0 \ddot{\vec{r}}(t) & = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n+2)! c^{n+2}} \iiint \iiint \rho_{\text{T}}(\vec{r}, t) \frac{\partial^{n+2}}{\partial t^{n+2}} \rho_{\text{T}}(\vec{r}', t) \text{grad} |\vec{r} - \vec{r}'|^{n+1} d^3 r d^3 r' \\
 & - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! c^{n+2}} \iiint \iiint \rho_{\text{T}}(\vec{r}, t) \frac{\partial^{n+1}}{\partial t^{n+1}} \vec{j}_{\text{T}}(\vec{r}', t) |\vec{r} - \vec{r}'|^{n-1} d^3 r d^3 r' + \vec{F}_{\text{ext}} \\
 = & - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! c^{n+2}} \iiint \iiint \rho_{\text{T}}(\vec{r}, t) \frac{\partial^{n+1}}{\partial t^{n+1}} \left[\vec{j}_{\text{T}}(\vec{r}', t) \right. \\
 & \left. + \frac{\partial \rho_{\text{T}}(\vec{r}', t)}{\partial t} \frac{\text{grad} |\vec{r} - \vec{r}'|^{n+1}}{(n+1)(n+2) |\vec{r} - \vec{r}'|^{n-1}} \right] d^3 r d^3 r' + \vec{F}_{\text{ext}}.
 \end{aligned}$$

Unter Verwendung von

$$\text{grad} |\vec{r} - \vec{r}'|^{n+1} = (n+1) |\vec{r} - \vec{r}'|^n \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = (n+1) |\vec{r} - \vec{r}'|^{n-1} (\vec{r} - \vec{r}')$$

wird daraus

$$m_0 \ddot{\vec{r}}(t) = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! c^{n+2}} \iiint \iiint \rho_{\text{T}}(\vec{r}, t) |\vec{r} - \vec{r}'|^{n-1} \times \\ \times \frac{\partial^{n+1}}{\partial t^{n+1}} \left[\vec{j}_{\text{T}}(\vec{r}', t) + \frac{\partial \rho_{\text{T}}(\vec{r}', t)}{\partial t} \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{n+2} \right] d^3 r d^3 r' + \vec{F}_{\text{ext}},$$

und mit der Kontinuitätsgleichung

$$\text{div}_{\vec{r}'} \vec{j}_{\text{T}}(\vec{r}', t) + \frac{\partial \rho_{\text{T}}(\vec{r}', t)}{\partial t} = 0$$

ergibt sich

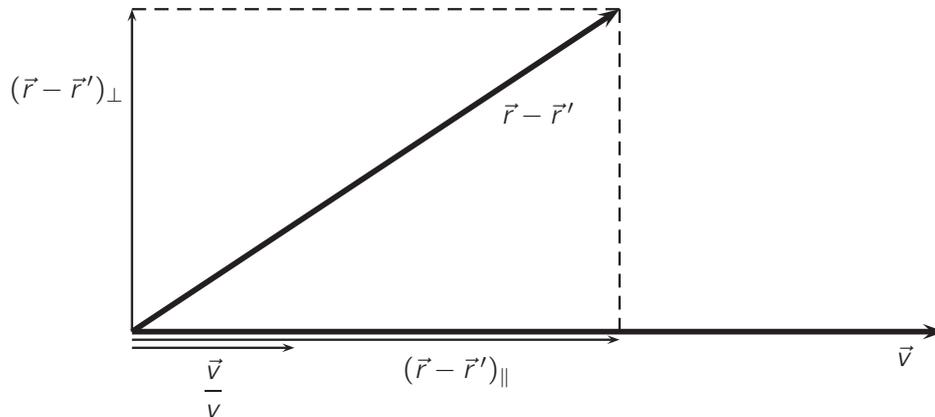
$$m_0 \ddot{\vec{r}}(t) = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! c^{n+2}} \iiint \iiint \rho_{\text{T}}(\vec{r}, t) |\vec{r} - \vec{r}'|^{n-1} \times \\ \times \frac{\partial^{n+1}}{\partial t^{n+1}} \left[\vec{j}_{\text{T}}(\vec{r}', t) - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{n+2} \text{div}_{\vec{r}'} \vec{j}_{\text{T}}(\vec{r}', t) \right] d^3 r d^3 r' + \vec{F}_{\text{ext}}.$$

Da \vec{j}_{T} lokal an das betrachtete Teilchen gekoppelt ist und folglich außerhalb einer geeigneten kompakten Teilmenge des \mathbb{R}^3 verschwindet, läßt sich die Ableitung im Integral umwälzen und anschließend ausführen; das liefert

$$\iiint |\vec{r} - \vec{r}'|^{n-1} (\vec{r} - \vec{r}') \text{div}_{\vec{r}'} \vec{j}_{\text{T}}(\vec{r}', t) d^3 r \\ = \iiint (\vec{j}_{\text{T}}(\vec{r}', t) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}'}) |\vec{r} - \vec{r}'|^{n-1} (\vec{r} - \vec{r}') d^3 r \\ = \iiint |\vec{r} - \vec{r}'|^{n-1} \vec{j}_{\text{T}}(\vec{r}', t) + |\vec{r} - \vec{r}'|^{n-1} \frac{\vec{j}_{\text{T}}(\vec{r}', t) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} (\vec{r} - \vec{r}') d^3 r$$

Setzen wir das in die Bewegungsgleichung ein, finden wir

$$m_0 \ddot{\vec{r}}(t) = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! c^{n+2}} \iiint \iiint \rho_{\text{T}}(\vec{r}, t) |\vec{r} - \vec{r}'|^{n-1} \frac{\partial^{n+1}}{\partial t^{n+1}} \left[\frac{n+1}{n+2} \vec{j}_{\text{T}}(\vec{r}', t) \right. \\ \left. - \frac{n-1}{n+2} \frac{\vec{j}_{\text{T}}(\vec{r}', t) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} (\vec{r} - \vec{r}') \right] d^3 r d^3 r' - \vec{F}_{\text{ext}} \\ = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! c^{n+2}} \iiint \iiint |\vec{r} - \vec{r}'|^{n-1} \rho_{\text{T}}(\vec{r}, t) \rho_{\text{T}}(\vec{r}', t) \times \\ \times \frac{\partial^{n+1}}{\partial t^{n+1}} \left[\frac{n+1}{n+2} \vec{v}(t) - \frac{n-1}{n+2} \frac{\vec{v}(t) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} (\vec{r} - \vec{r}') \right] d^3 r d^3 r' - \vec{F}_{\text{ext}}.$$


 Abbildung 1.3: Zerlegung des Vektors $\vec{r} - \vec{r}'$

Zur Auswertung der Integrale zerlegen wir den Vektor $\vec{r} - \vec{r}'$ in einen zu \vec{v} parallelen und einen dazu senkrechten Anteil (siehe Abbildung 1.3), das heißt, wir schreiben

$$\vec{r} - \vec{r}' = \frac{\vec{v}}{v} \left[(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \frac{\vec{v}}{v} \right] + \frac{\vec{v}}{v} \times \left[(\vec{r} - \vec{r}') \times \frac{\vec{v}}{v} \right]$$

und erhalten damit

$$\begin{aligned} m_0 \ddot{\vec{r}}(t) = & - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! c^{n+2}} \iiint \iiint |\vec{r} - \vec{r}'|^{n-1} \rho_T(\vec{r}, t) \rho_T(\vec{r}', t) \times \\ & \times \frac{\partial^{n+1}}{\partial t^{n+1}} \left\{ \frac{n+1}{n+2} \vec{v}(t) - \frac{n-1}{n+2} \left[\left(\frac{(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \vec{v}(t)}{|\vec{r} - \vec{r}'| v} \right)^2 \vec{v}(t) \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{\vec{v}(t) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \left[\frac{\vec{v}}{v} \times \left((\vec{r} - \vec{r}') \times \frac{\vec{v}}{v} \right) \right] \right\} d^3r d^3r' - \vec{F}_{\text{ext}}. \quad (1.18) \end{aligned}$$

Da sich bei der Integration über eine kugelsymmetrische Ladungsverteilung alle Komponenten senkrecht zu \vec{v} gegenseitig wegheben und somit nur die Komponenten in Richtung von \vec{v} einen Beitrag liefern, fällt der dritte Summand in der geschweiften Klammer bei (1.18) weg. Der zweite Summand enthält den Term

$$\left(\frac{(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \vec{v}(t)}{|\vec{r} - \vec{r}'| v} \right)^2 = \cos^2 \alpha, \quad (1.19)$$

wobei α der Winkel zwischen den Vektoren $\vec{r} - \vec{r}'$ und \vec{v} ist; hierbei sind alle Richtungen von $\vec{r} - \vec{r}'$ gleichberechtigt, und folglich kann man (1.19) durch dessen Mittelwert $1/3$ ersetzen. Das liefert für die geschweifte Klammer

$$\left[\frac{n+1}{n+2} - \frac{n-1}{n+2} \left(\frac{(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \vec{v}(t)}{|\vec{r} - \vec{r}'| v} \right)^2 \right] \vec{v}(t) = \left[\frac{n+1}{n+2} - \frac{1}{3} \frac{n-1}{n+2} \right] \vec{v}(t) = \frac{2}{3} \vec{v}(t)$$

und für die Bewegungsgleichung folglich

$$m_0 \ddot{\vec{r}}(t) = -\frac{2}{3} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! c^{n+2}} \frac{\partial^{n+1}}{\partial t^{n+1}} \vec{v}(t) \iiint \iiint |\vec{r} - \vec{r}'|^{n-1} \rho_T(\vec{r}, t) \rho_T(\vec{r}', t) d^3 r d^3 r' - \vec{F}_{\text{ext}}.$$

Mit der elektrostatischen Selbstenergie

$$U = \frac{1}{2} \iiint \iiint \frac{\rho_T(\vec{r}, t) \rho_T(\vec{r}', t)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r d^3 r'$$

und dem Quadrat der Ladung

$$q^2 = \iiint \iiint \rho_T(\vec{r}, t) \rho_T(\vec{r}', t) d^3 r d^3 r'$$

wird daraus

$$m_0 \ddot{\vec{r}} + \vec{F}_{\text{ext}} = \frac{4U}{3c^2} \dot{\vec{v}} + \frac{2q^2}{3c^3} \ddot{\vec{v}} + \dots$$

oder

$$\left(m_0 - \frac{4U}{3c^2} \right) \ddot{\vec{r}} + \vec{F}_{\text{ext}} = \frac{2q^2}{3c^3} \ddot{\vec{r}} + \dots$$

Definieren wir mit $m = m_0 - 4U/3c^2$ die effektive Masse des geladenen Teilchens, erhalten wir

$$m \ddot{\vec{r}} + \vec{F}_{\text{ext}} = \frac{2q^2}{3c^3} \ddot{\vec{r}} + \dots \quad (1.20)$$

Für Teilchen mit stark lokalisierter Ladungsverteilung ist ρ_T nur in einer sehr kleinen Umgebung desselben nicht Null und daher $|\vec{r} - \vec{r}'| \ll 1$, sodaß man in (1.20) die Terme mit $n > 2$ vernachlässigen kann; damit gelangt man zur *Abraham-Lorentz-Gleichung* [2], [556]⁴¹

$$m \ddot{\vec{r}} + \vec{F}_{\text{ext}} = \frac{2q^2}{3c^3} \ddot{\vec{r}}$$

als phänomenologische approximative Bewegungsgleichung eines beschleunigt bewegten geladenen Teilchens unter Berücksichtigung von dessen Strahlungsrückwirkung⁴².

⁴¹Die Abraham-Lorentz-Gleichung ist ein ehrwürdiges Stück klassische Physik mit allen typischen Einschränkungen. Sie ist, trotz des c auf der rechten Seite, nichtrelativistisch, und wenn man die Feldenergie des betrachteten geladenen Teilchens als Masse mitberücksichtigt, führt das für Punktteilchen zu unendlichen Massen. Außerdem macht die dritte Ableitung Schwierigkeiten. Diese ermöglicht sogenannte *Runaway-Lösungen*, wodurch Teilchen beschrieben werden, die trotz endlicher Anfangsbeschleunigung in endlicher Zeit unendliche Geschwindigkeiten annehmen. Dennoch ist die Abraham-Lorentz-Gleichung in der nichtrelativistischen Näherung gut geeignet, das Prinzip der Strahlungsrückwirkung zu veranschaulichen.

⁴²Für die abgestrahlte Leistung folgt daraus

$$P = \frac{2e^2 \dot{v}^2}{3c^3}.$$

Diese Relation wurde von Larmor gefunden [539]; vergleiche auch [540].

Im hier betrachteten Fall gilt $q = e$, und die äußere Kraft ist durch das Coulombsche Gesetz

$$\vec{F}_{\text{ext}} = -\frac{e^2 \vec{r}}{r^3}$$

gegeben. Für eine Kreisbahn ist r konstant, und außerdem erhält die Coulomb-Kraft die Aufgabe der Zentripetalkraft, woraus

$$\frac{e^2}{r^2} = m\omega^2 r$$

oder

$$\frac{1}{r^3} = \frac{m\omega^2}{e^2}$$

folgt. Die Abraham-Lorentz-Gleichung lautet hier demnach

$$m\ddot{r} + m\omega^2 r = \frac{2e^2}{3c^3} \ddot{r}$$

und nimmt mit der Abkürzung $\alpha = 3mc^3/2e^2$ die Form

$$\ddot{r} - \alpha \dot{r} - \alpha \omega^2 r = 0$$

an. Als Folge der Strahlungsrückwirkung erwartet man eine zeitliche Veränderlichkeit von Frequenz und Bahnradius des Elektrons. Konsequenterweise macht man daher den Ansatz

$$r(t) = \hat{r} e^{i(\omega+\lambda)t}$$

mit einer *komplexen* Konstanten λ , deren Realteil ein Maß für die Frequenzverschiebung und deren Imaginärteil eines für die Veränderung des Bahnradius ist; dieser Ansatz führt auf

$$i \left(1 + \frac{\lambda}{\omega}\right)^3 - \frac{\alpha}{\omega} \left(1 + \frac{\lambda}{\omega}\right)^2 + \frac{\alpha}{\omega} = 0. \quad (1.21)$$

Nimmt man an, daß die Abweichungen von der Kreisbahn während eines Umlaufs klein sind und folglich $|\lambda/\omega| \ll 1$ gilt, um alle quadratischen und höheren Terme in λ/ω zu vernachlässigen, bleibt von (1.21) nur

$$i \left(1 + \frac{3\lambda}{\omega}\right) - \frac{2\alpha\lambda}{\omega^2} = 0,$$

und man findet

$$\lambda = -\frac{3\omega^3 + 2i\alpha\omega^2}{9\omega^2 + 4\alpha^2}.$$

Da einerseits $\alpha = 1,6 \cdot 10^{23}$ Hz ist, andererseits ein typischer Bahnradius von 1 \AA eine ungestörte Umlauffrequenz von $\omega = 1,6 \cdot 10^{16}$ Hz nach sich zieht, bestätigt sich die Annahme

$|\lambda/\omega| \ll 1$, und man kann zusätzlich auch noch den ersten Summanden im Nenner von λ streichen, so daß der Näherungsausdruck

$$\lambda = -\frac{3\omega^3}{4\alpha^2} - i\frac{\omega^2}{2\alpha}$$

herauskommt. Das führt auf

$$r(t) = \hat{r} \exp \left\{ \left[i \left(\omega - \frac{3\omega^3}{4\alpha^2} \right) - \frac{\omega^2}{2\alpha} \right] t \right\} = \hat{r} e^{i(\omega - \Delta\omega)t} e^{-\delta t},$$

also eine Bewegung mit einer um $\Delta\omega = 3\omega^3/4\alpha^2$ verschobenen Frequenz und einem Dämpfungsterm $\delta = \omega^2/2\alpha$. Der Bahnradius des Elektrons geht in diesem Modell folglich in $2\alpha/\omega^2 = 1,25 \cdot 10^{-9}$ s jeweils auf das $1/e$ -fache des vorherigen Wertes zurück. Das bedeutet, daß Elektronen, die den Atomkern umkreisen, sich auf Spiralbahnen zum Kern bewegen und sehr schnell in diesen hineinstürzen würden; die Bahnen der Elektronen, die Atome selbst und damit alle Materie wären somit *instabil*. Das Planetensystem-Modell der Atome war tatsächlich zu schön, um wahr zu sein. Wieder war die klassische Physik völlig ratlos, und auch hier stellte sich heraus, daß das Problem in deren Rahmen unlösbar ist.

1.2.4 Was ist mit dem Photoeffekt?

Wir ergänzen den vorliegenden Abschnitt um einen weiteren Teil, der genau besehen aus dem Rahmen fällt. Denn während die drei bisher geschilderten Sachverhalte für die klassische Physik *unlösbare* Probleme darstellen und damit zu *unumgänglichen* Neuformulierungen der Physik führten, ist die Neuvorstellung, um die es hier geht, keineswegs unumgänglich; im Gegenteil sind die betrachteten Phänomene auf (zumindest teilweise) klassischem Wege ebenfalls erklärbar. Daß die Sache dennoch eine wenn auch erst mit zwanzigjähriger Verspätung eintretende das physikalische Weltbild erschütternde Wirkung zeigte, ist ein historischer Zufall, rechtfertigt andererseits jedoch auch deren Diskussion im vorliegenden Kapitel.

Bekanntlich läßt sich die klassische Physik in einen diskreten und einen kontinuierlichen Bereich unterteilen. Wenn wir diese Unterteilung hier einmal inhaltlich stark verkürzt durch die Aspekte Licht und Materie zum Ausdruck bringen, so äußert sie sich in der Vorstellung, daß Materie aus Teilchen besteht, während Licht ein Wellenphänomen ist. Diese Unterteilung war nebenbei bemerkt nicht immer unumstritten; man denke zum Beispiel an die Newtonsche Korpuskulartheorie des Lichts. Der Streit, ob Licht aus Teilchen oder aus Wellen bestehe, galt aber seit der Zeit von Christian Huygens im allgemeinen als zu Gunsten der Wellenhypothese entschieden. Zwei weitere Meilensteine ihrer Akzeptanz waren 1799 das Youngsche Doppelspaltexperiment [938], [939], das die Interferenzfähigkeit von Licht zeigte⁴³, und insbesondere 1888 der direkte Nachweis elektromagnetischer Wellen durch H. Hertz [421], [424], [425]. Zu

⁴³Thomas Young führte sein berühmtes Doppelspaltexperiment ursprünglich gar nicht mit einem Doppelspalt aus, sondern er betrachtete die physikalisch äquivalente Situation der Beugung eines durch eine Lochblende erzeugten Strahlenbündels an der Kante eines Stücks Papier.

Beginn des 20. Jahrhunderts geriet diese klassische Wellenvorstellung des Lichts jedoch wieder ins Wanken.

Einer der Auslöser dieser Entwicklung – keineswegs der einzige – war der Photoeffekt. Nachdem Hertz 1887 bereits erste Beobachtungen in diesem Bereich gemacht hatte [422], [423], entdeckte Hallwachs wenig später die aus damaliger Sicht überraschenden Gesetzmäßigkeiten der durch Licht verursachten Auslösung eines Photostroms aus Metallen [375], [376], [377], die heutzutage Eingang in jedes Schulbuch gefunden haben. Lenard [543] und Thomson [875] konnten 1899 unabhängig voneinander nachweisen, daß es tatsächlich Elektronen sind, die bei solchen Vorgängen aus Metallen ausgelöst werden. Wird eine Photokathode mit Licht bestrahlt, so kann dieses Licht Elektronen aus der Kathode freisetzen. Um die kinetische Energie der emittierten Elektronen zu messen, verwendet man üblicherweise die *Gegenfeld-Methode*. Man läßt die Elektronen gegen eine Spannung zwischen der Photokathode und einer Anode anlaufen, dreht diese Spannung langsam hoch und mißt, bei welchem Wert der Spannung der Photostrom gerade verschwindet. Diese Stop-Spannung entspricht dann der Summe des Kontaktpotentials von Kathode und Anode und der kinetischen Energie pro Ladung, die von den ausgelösten Elektronen mitgebracht wird. Von Interesse ist dabei vor allen Dingen die Abhängigkeit des Verhaltens der Photoelektronen von der Frequenz des eingestrahlt Lichts. Dabei stellt man zunächst fest, daß der Photostrom anfangs überhaupt nicht vorhanden ist und erst bei einer für das Photokathoden- und Anodenmaterial charakteristischen Grenzfrequenz einsetzt; diese ist von der Arbeit abhängig, die jeweils erforderlich, um einem Metallelektron den Austritt aus der Kathode beziehungsweise der Anode zu ermöglichen. Mißt man bei größeren Frequenzen dann die Stromstärke und die maximale Energie der Elektronen mit der eben beschriebenen Methode, so stellt man fest, daß der Photostrom von der *Intensität*⁴⁴, die Spannung der freigesetzten Elektronen jedoch von der *Wellenlänge* des verwendeten Lichts abhängt⁴⁵. Genauer gesagt findet man für die Stop-Spannung die Relation

$$e U_S = h\nu - W_A = E_{\max} + e \Delta U \quad (1.22)$$

und für die maximale kinetische Energie der Photoelektronen folglich

$$E_{\max} = h\nu - W_K;$$

dabei ist W_K die Austrittsarbeit der Photokathode, W_A diejenige der Anode und $\Delta U = (W_K - W_A)/e$ das Kontaktpotential zwischen dem Kathoden- und dem Anodenmaterial (siehe Abbildung 1.4)⁴⁶. Auf den ersten Blick wäre zu erwarten, daß die elektrische Feldstärke für die

⁴⁴Das wurde erstmals 1899 von J. Elster und H. Geitel nachgewiesen.

⁴⁵Der Nachweis hierfür gelang Lenard 1902 [544].

⁴⁶In Physiklehrbüchern findet man die ebenso weitverbreitete wie fehlerhafte Aussage, die maximale kinetische Energie der Photoelektronen könne mit der oben beschriebenen Gegenfeldmethode direkt bestimmt werden; dabei wird von der Relation

$$e U_S = h\nu - W$$

Gebrauch gemacht und behauptet, W sei die Austrittsarbeit der *Kathode* und nicht, wie es richtig wäre, der *Anode*, woraus das ebenso falsche Resultat $e U_S = E_{\max}$ anstelle der korrekten Gleichung (1.22) gefolgert

Beschleunigung und Ablösung der Elektronen aus dem Elektrodenmaterial verantwortlich ist. Folglich müßte die Energie der ausgelösten Elektronen und damit deren Spannung proportional zur Intensität des eingestrahlten Lichtes, also zum Quadrat der Amplitude der zugehörigen elektromagnetischen Wellen sein. Dies widerspricht jedoch wie oben beschrieben auf der ganzen Linie den Beobachtungen. Somit war festzustellen, daß der Photoeffekt in Verbindung mit der Vorstellung einer kontinuierlichen Verteilung der Energie des Lichts zumindest zu erheblichen Schwierigkeiten führte. Das änderte allerdings vorläufig an der Überzeugung eines Großteils der Physiker der damaligen Zeit, die Wellenvorstellung des Lichts für die einzig richtige zu halten, nicht das Geringste. Diese Haltung wurde noch dadurch verfestigt, daß in den folgenden Jahren bis 1912 Erklärungen des Photoeffekts auftauchten, die mit der konventionellen Wellenvorstellung des Lichts auskamen. Erwähnung verdient hierbei in erster Linie die Theorie von Richardson [733], [734], da sie gegenüber ihren Konkurrenzprodukten den Vorteil aufwies, nicht fehlerhaft zu sein.

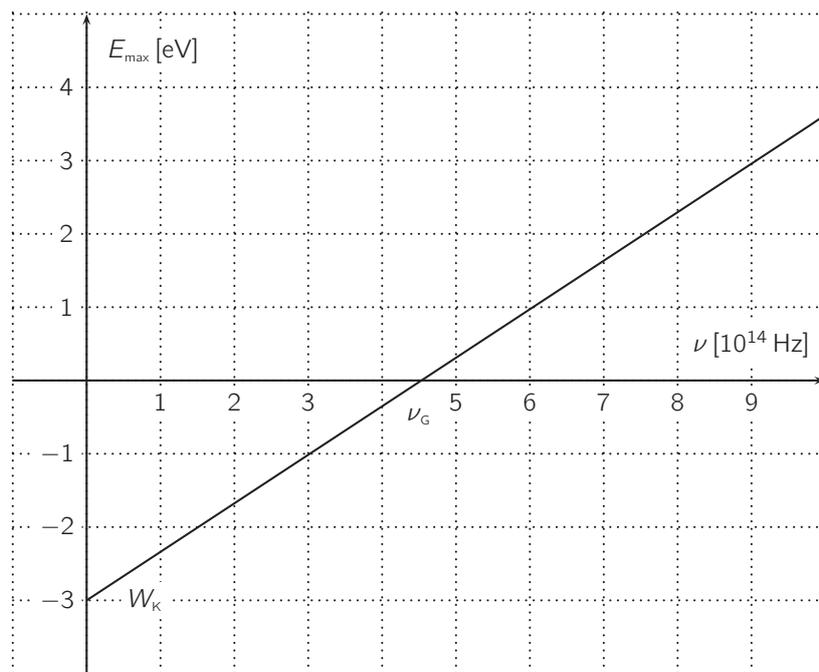


Abbildung 1.4: Beispiel für ein Energie-Frequenz-Diagramm für die herausgelösten Elektronen beim Photoeffekt

wird. Hierbei vergißt man die Kontaktspannung zwischen Kathode und Anode, sodaß diese Darstellung nur für den Spezialfall gleichen Kathoden- und Anodenmaterials gültig ist. Rednick und Tannhauser haben bereits 1976 auf diesen immer wieder anzutreffenden Fehler hingewiesen [748].

Wentzel [920], [922] und Beck [45] zeigten in den Jahren 1926 und 1927 mit halbklassischen Rechnungen erneut, daß zur Deutung des Photoeffekts eine Beschreibung des Lichts ganz im Rahmen der klassischen Maxwellschen Elektrodynamik völlig ausreicht. Zu dieser Zeit hatte jedoch eine andere, ebenfalls überzeugende, aber keinesfalls allein mögliche Erklärung die weitere Entwicklung der Physik bereits unübersehbar beeinflußt. Wir werden uns im Abschnitt 2.3 ausführlich mit dem Photoeffekt einschließlich seiner Deutungen und Auswirkungen auf die Physikgeschichte beschäftigen.

Kapitel 2

Die ältere Quantenmechanik

Sämtliche Versuche, die oben geschilderten Probleme auf dem Boden der klassischen Physik zu lösen, erwiesen sich als erfolglos. Es sollte sich zeigen, daß im Rahmen oder besser gesagt als Folge der Reparaturmaßnahmen, die in den ersten Jahrzehnten des zwanzigsten Jahrhunderts vorgenommen wurden, das *gesamte Gebäude der klassischen Physik* zum Einsturz gebracht wurde. Das geschah natürlich nicht auf einmal, und da als Werkzeugkiste im wesentlichen gerade die klassische Physik selbst zur Verfügung stand, kamen zunächst abgesehen von einigen revolutionären Ideen hauptsächlich die Methoden und Begriffe der klassischen Physik beim Versuch zum Einsatz, neue nichtklassische Physik zu entwickeln. Die quantitativ sehr erfolgreichen, qualitativ jedoch teilweise höchst merkwürdigen Konstruktionen dieser Phase haben unter der Bezeichnung *ältere Quantenmechanik* ihren Weg in die Wissenschaftsgeschichte gefunden.

2.1 Die Plancksche Strahlungsformel

2.1.1 Die ursprüngliche Ableitung durch Planck

Das Ereignis, das im allgemeinen als „Geburt der Quantenmechanik“ angesehen wird, steht im Zusammenhang mit dem Versuch, das erste der drei im vorigen Abschnitt beschriebenen Probleme zu lösen, das heißt also, ein universelles Gesetz zu finden, das die Energiedichte $\rho(\nu, T)$ von elektromagnetischen Wellen in Abhängigkeit der Frequenz beziehungsweise der Wellenlänge und der Temperatur beschreibt, die von schwarzen Strahlern emittiert werden. Hierfür lagen wie beschrieben mit dem Rayleigh-Jeansschen Strahlungsgesetz

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T$$

sowie dem Wienschen Strahlungsgesetz

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} e^{-h\nu/k_B T}$$

zwar zwei Versuche vor, doch beide funktionierten nur in bestimmten Frequenzbereichen gut: Während ersteres im kurzwelligen Bereich Unsinn produzierte, versagte letzteres im langwelligen. Die Lösung gelang Max Planck mit seiner berühmten Strahlungsformel, die er zunächst gewissermaßen erriet [698] und kurz danach herleitete [700]¹. Dabei versuchte Planck zunächst gar nicht, eine neue Strahlungsformel zu finden, sondern vielmehr diejenige seines Kollegen Wien einer strengen Ableitung zuzuführen, da er wie die gesamte zeitgenössische physikalische Szene von deren Richtigkeit überzeugt war². Hierzu entwickelte er eine grundlegende, später vielfach wieder aufgegriffene und verfeinerte Idee zur modellmäßigen Beschreibung der Wechselwirkung von Strahlung und Materie: Ausgehend von der Erkenntnis Kirchhoffs, daß die Energiedichte der thermischen Strahlung völlig unabhängig von der Beschaffenheit des Behälters der Strahlung ist, erkannte er, daß man hier auch ein Phantasiematerial betrachten kann, dessen Aufbau nur durch seine physikalische Beschreibbarkeit bestimmt zu sein braucht, und gerade diese war für reale Materialien zur damaligen Zeit natürlich nicht gegeben. Man durfte also etwa davon ausgehen, daß die Innenwände des schwarzen Körpers aus vielen kleinen harmonischen Oszillatoren aufgebaut sind, die bei der Wechselwirkung mit elektromagnetischer Strahlung resonant schwingen und dadurch ihrerseits elektromagnetische Wellen aussenden³; Planck nennt sie *Resonatoren*. Kurz nachdem es ihm tatsächlich gelang, auf der Basis eines solchen Modells mit Hilfe eines Entropie-Arguments das Wiensche Strahlungsgesetz plausibel zu machen [697]⁴, zeigten wie bereits erwähnt Messungen der Physikalisch-Technischen Reichsanstalt in Berlin, daß dieses im niederfrequenten Bereich von der Realität abweicht. Planck konnte jedoch schon wenig später eine durch Probieren gefundene Abänderung von Wiens Formel angeben, die den Messungen extrem genau entsprach, und das war bereits seine Strahlungsformel.

In der Folgezeit versuchte Planck zunächst vergeblich, seine Strahlungsformel herzuleiten. Ein Erfolg stellte sich erst ein, als er zur Lösung des Problems postulierte, daß die Energie der elektromagnetischen Strahlung nicht kontinuierlich, sondern *diskret*, das heißt in kleinsten Paketen abgegeben werde, deren Größe nur von der Frequenz abhängt, genauer gesagt proportional zu dieser ist [699]⁵. Der Anstoß zu dieser Idee ging in zweifacher Hinsicht auf Boltzmann zurück. Dieser hatte Planck bereits drei Jahre zuvor den Rat gegeben, es bei der

¹Planck stellte diese Formel am 14. 12. 1900 auf der Sitzung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft in Berlin vor; die Quantenmechanik feierte somit am 14. 12. 2000 gewissermaßen ihren hundertsten Geburtstag, was die Deutsche Physikalische Gesellschaft dazu veranlaßte, das Jahr 2000 zum Jahr der Physik zu erklären.

²Das Rayleigh-Jeanssche Strahlungsgesetz spielte in Plancks Überlegungen überhaupt keine Rolle und wird von ihm in diesem Zusammenhang auch nirgends erwähnt. Die dabei auftretende Divergenz für $\nu \rightarrow \infty$ führte erst ab 1905 zu Diskussionen.

³Er dachte dabei an ein Gitter aus kleinen elektrischen Ladungen, die an Federn elastisch an der Innenwand des Resonators befestigt sind.

⁴Eine tatsächliche Ableitung im Sinne des Wortes ist das nicht; Planck wies lediglich nach, daß das Wiensche Strahlungsgesetz mit dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik in Einklang gebracht werden kann.

⁵Dieses Konzept tauchte erstmals am 19. 12. 1900 auf. Planck sprach später in einem Brief an Robert Williams Wood aus dem Jahr 1931 von einem „Akt der Verzweiflung“, zu dem er sich gedrängt sah, um sein bis dahin nur intuitiv formuliertes Gesetz herleiten zu können [415].

Lösung des Problems der spektralen Verteilung thermischer Strahlung mit demselben Trick zu versuchen, mit dem ihm selbst die statistische Deutung der Entropie gelungen war, nämlich mit der Einführung diskreter und damit abzählbarer Einheiten, um damit statistische Methoden anwenden zu können [102]⁶. Außerdem begründete Planck die Vorstellung diskreter Energiepakete, indem er die von ihm eigentlich strikt abgelehnte statistische Entropiedefinition nun doch akzeptierte. Das Boltzmannsche Prinzip lautet

$$S_{\text{ges}} = k_{\text{B}} \ln W, \quad (2.1)$$

wobei S_{ges} die gesamte Entropie des betrachteten Makrozustands eines physikalischen Systems ist und W dessen thermodynamische Wahrscheinlichkeit, also die Anzahl der den Makrozustand repräsentierenden Mikrozustände. Stellt man sich nun den Hohlraum mit Innenwänden aus N Oszillatoren der Eigenfrequenz ν und der Gesamtenergie E_{ges} vor, so kommt die Entropie als Maß für die Unordnung ins Spiel, die durch Unregelmäßigkeiten, mit welchen die Oszillatoren ihre Frequenzen und Phasen wechseln, in das System gebracht wird. Schreibt man die Gesamtenergie der N Oszillatoren in der Form

$$E_{\text{ges}} = N E, \quad (2.2)$$

läßt sich danach E nur als mittlere Energie eines Oszillators auffassen. Damit erhält man W als Anzahl der Möglichkeiten, die Energie E_{ges} auf die N Oszillatoren zu verteilen. Klassisch ist davon auszugehen, daß die Oszillatoren in kontinuierlicher Weise jeden beliebigen Energiebetrag zwischen 0 und E_{ges} absorbieren und emittieren können, das hätte jedoch zur Folge, daß W unendlich wird und damit auch S divergiert. Wird die Energie jedoch nur in ganzzahligen Vielfachen eines kleinstmöglichen Energiebetrags ε abgegeben oder aufgenommen, dann gibt es nur endlich viele Energieportionen zu verteilen, und sowohl W als auch S nehmen reguläre Werte an. Planck betonte jedoch, daß er diese Energiepakete als rein hypothetische Hilfskonstruktion betrachtete, ihnen also keine reale Existenz zumaß.

Bei der Herleitung der Strahlungsformel aus seiner Quantenhypothese setzt Planck ein wichtiges Resultat der Elektrodynamik als bekannt voraus, das auch für die Strahlungsgesetze von Rayleigh-Jeans und Wien zentral ist; wir beschäftigen uns vorab kurz damit. Um die Energiedichte der Strahlung eines Hohlraumstrahlers der Temperatur T zu berechnen, braucht man die Anzahl $dN(\nu)$ der Eigenschwingungen des elektromagnetischen Feldes im Frequenzintervall $[\nu, \nu + d\nu]$. Dazu sei das Feld in einem würfelförmigen Hohlraum der Kantenlänge a mit ideal verspiegelten Wänden eingesperrt. Das zugehörige Vektorpotential \vec{A} ist, wie man aus der Elektrodynamik weiß, Lösung der Wellengleichung

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \nabla^2 \vec{A} = 0,$$

⁶Boltzmann hatte dieses Konzept nicht nur allgemein, sondern insbesondere auch im Sinn von diskreten Energiequanten angewandt [98], [99]. Seine generelle naturphilosophische Grundhaltung und insbesondere konkrete Äußerungen von seiner Seite zu dieser Thematik lassen keine Zweifel daran, daß er solche diskreten Vorstellungen durchaus nicht nur als formale Hilfsmittel, sondern als auf reale physikalische Gegebenheiten zurückgehend erachtete.

und nach der üblichen Separation des zeitabhängigen Teils gemäß $\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}(\vec{r}) e^{2\pi i \nu t}$ erhält man für den raumabhängigen Teil die *Helmholtzgleichung*

$$\left(\nabla^2 + \frac{4\pi^2 \nu^2}{c^2} \right) \vec{A} = 0.$$

Unter den Randbedingungen, daß die Tangentialkomponenten des Vektorpotentials an den Wänden verschwinden, findet man als Lösungen stehende Wellen der Form

$$\vec{A}(\vec{r}) = \hat{A} \left(\frac{1}{a} \right)^{3/2} e^{i\pi(n_1 x_1 + n_2 x_2 + n_3 x_3)/a}$$

mit den Eigenwertbedingungen

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = \left(\frac{2 a \nu}{c} \right)^2, \quad n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{N};$$

Diese Eigenwertbedingungen legen im durch die Koordinaten n_1, n_2, n_3 aufgespannten Raum eine Kugel fest. Da Frequenzen nur positive Werte annehmen, befinden sich alle Zahlentripel (n_1, n_2, n_3) , die zu Eigenfrequenzen aus dem Frequenzintervall $[\nu, \nu + d\nu]$ gehören, in einer Achtelkugelschale mit dem Radius $n = 2 a \nu / c$ und der Dicke $2 a d\nu / c$. Die durch solche Koordinaten definierten Punkte sind zwar diskret, also anschaulich gesehen Gitterpunkte, für große Abmessungen des betrachteten Hohlraumes liegen sie jedoch sehr dicht, so daß man sie in guter Näherung als kontinuierlich verteilt betrachten kann. Daher betrachtet man den Grenzfall des Kontinuums, dann ist die Anzahl der Gitterpunkte gleich dem Volumen der Achtelkugelschale

$$dV = \frac{1}{8} 4\pi n^2 dn = \frac{4\pi a^3}{c^3} \nu^2 d\nu,$$

und für die zugehörige Anzahl der Eigenschwingungen erhält man wegen $a^3 = V$, und weil zu jedem Gitterpunkt zwei Polarisationsrichtungen gehören⁷,

$$dN(\nu) = \frac{8\pi V}{c^3} \nu^2 d\nu.$$

Für die Energiedichte des Hohlraumstrahlers erhält man somit

$$u(\nu, T) = \frac{1}{V} \frac{dN(\nu)}{d\nu} E = \frac{8\pi \nu^2}{c^3} E. \quad (2.3)$$

Nun kommen wir zur eigentlichen Ableitung der Strahlungsformel. Im Mittelpunkt steht dabei der Begriff der Entropie beziehungsweise deren statistische Definition (2.1). Um sie zu berechnen, identifiziert Planck wie gesagt die statistische Wahrscheinlichkeit W eines Zustands des Schwarzen Körpers mit der Anzahl der Möglichkeiten, die Gesamtenergie

$$E_{\text{ges}} = n \varepsilon, \quad (2.4)$$

⁷Bei Photonen treten nur transversale, nicht aber longitudinale Polarisierungen auf. Das war zur damaligen Zeit experimentell bereits wohlbekannt.

aufgeteilt in n Paketen der Größe ε , auf N Oszillatoren zu verteilen. Dabei ist für jeden Oszillator jede Anzahl von 0 bis n erlaubt. Um diese kombinatorische Aufgabe zu lösen, stellen wir uns die N Oszillatoren als in einer Reihe aufgestellte Kästchen vor und bemerken, daß auf dieser Reihe n Energiepakete und zusätzlich die $N - 1$ Begrenzungen der Oszillatorkästchen, also insgesamt $n + N - 1$ Elemente in beliebiger Reihenfolge unterzubringen sind (siehe Abbildung 2.1). Die Aufgabe ist daher äquivalent zu der Frage, in wievielen Kombinationen die $N - 1$ Begrenzungslinien auf die $n + N - 1$ möglichen Plätze verteilt werden können⁸. Dafür gibt es

$$W = \binom{n + N - 1}{N - 1} = \frac{(n + N - 1)!}{(N - 1)! n!} \quad (2.5)$$

Möglichkeiten, denn die $n + N - 1$ Pakete und Begrenzungen lassen sich auf $(n + N - 1)!$ Arten anordnen, aber da es dabei nicht auf die Reihenfolge ankommt, muß man diese Anzahl noch die $n!$ möglichen Anordnungen der Pakete und die $(N - 1)!$ möglichen Anordnungen der Begrenzungen dividieren⁹. Diesen Ausdruck approximiert Planck nun mit der Stirlingschen Formel, allerdings nur bis zur ersten Ordnung¹⁰, das heißt er verwendet

$$n! \approx n^n$$

sowie außerdem $N - 1 \approx N$ und erhält damit

$$W \approx \frac{(n + N)^{n+N}}{N^N n^n} = \left[\frac{(1 + n/N)^{1+n/N}}{(n/N)^{n/N}} \right]^N.$$

Das führt für die Entropie des Systems auf den Ausdruck

$$S_{\text{ges}} = k_B N \left[\left(1 + \frac{n}{N}\right) \ln \left(1 + \frac{n}{N}\right) - \frac{n}{N} \ln \frac{n}{N} \right]$$

⁸In Plancks Originaltext ist hier von *Komplexionen* die Rede, ein Ausdruck, der später auch bei Einstein auftaucht [249].

⁹Planck beschränkt sich bei der Begründung des Resultats (2.5) auf wenige etwas undurchsichtige Bemerkungen. Die hier beschriebene Ableitung der Formel wurde erstmals von Ehrenfest und Kammerlingh Onnes angegeben [232]; die Abbildung 2.1 ist ebenfalls eine Idee von Ehrenfest.

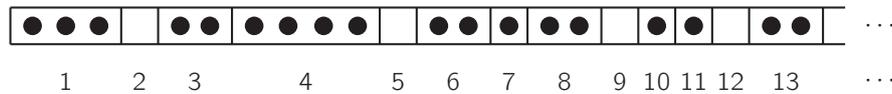
¹⁰Derselbe Ausdruck in Stirlingscher Näherung bis zur zweiten Ordnung kommt bei den Herleitungen der Planckschen Strahlungsformel nach Debye und nach Bose zum Einsatz; siehe dazu den nächsten Abschnitt sowie Abschnitt 2.5.1. Die vollständige Stirlingsche Formel lautet

$$\ln(x!) \approx x \ln x - x + \frac{1}{2} \ln(2\pi x) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1} B_n}{(2n-1) 2n} \frac{1}{x^{2n-1}},$$

mit den Bernoullischen Zahlen

$$B_n = \frac{(2n)!}{2^{2n-1} \pi^{2n}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^{2n}}.$$

Das Mitnehmen des ersten Termes liefert für $x > 10^{44}$ einen relativen Fehler von unter einem Prozent; für die ersten beiden Terme liegt er bereits für $x > 1000$ deutlich unter einem Promille.


 Abbildung 2.1: Zur Verteilung der Energie $E = n\varepsilon$ auf N Oszillatoren

oder mit (2.4) und (2.2) auf

$$S_{\text{ges}} = k_B N \left[\left(1 + \frac{E}{\varepsilon}\right) \ln \left(1 + \frac{E}{\varepsilon}\right) - \frac{E}{\varepsilon} \ln \frac{E}{\varepsilon} \right],$$

sodaß auf jeden einzelnen Oszillator die mittlere Entropie

$$S = k_B \left[\left(1 + \frac{E}{\varepsilon}\right) \ln \left(1 + \frac{E}{\varepsilon}\right) - \frac{E}{\varepsilon} \ln \frac{E}{\varepsilon} \right] \quad (2.6)$$

entfällt.

Als nächstes nimmt sich Planck die Energiepakete ε quantitativ vor. Dazu verwendet er eine von Wien [927] und M. Thiesen [868] gefundene „Proto-Strahlungsformel“ in der Gestalt

$$u(\nu, T) = T^5 \frac{C}{\nu^3} \psi(cT/\nu),$$

wobei ψ eine gewisse nur von dem Quotienten cT/ν abhängigen Funktion ist¹¹, schreibt dafür wegen $u \propto 1/c^2$

$$u(\nu, T) = \frac{\nu^3}{c^3} f(T/\nu)$$

mit einer neuen nur von T/ν abhängigen Funktion f und findet unter Verwendung von (2.3) schließlich für die mittlere Energie eines Oszillators

$$E = \nu f(T/\nu).$$

Auflösen nach T liefert

$$T = \nu g(E/\nu)$$

mit einer weiteren, diesmal nur von E/ν abhängigen Funktion g . Wegen

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} \quad (2.7)$$

folgt daraus

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{\nu} g(E/\nu)$$

oder

$$S = \frac{1}{\nu} \int g(E/\nu) dE + \text{const.},$$

¹¹Die Ableitung der Planckschen Strahlungsformel bedeutet natürlich nichts anderes als die Bestimmung dieser Funktion.

also

$$S = G(E/\nu),$$

das heißt, die Entropie ist nur von der einzigen Variablen E/ν abhängig. Ein Vergleich mit (2.6) zeigt, daß $\varepsilon \propto \nu$ und damit

$$\varepsilon = h\nu$$

gelten muß, wobei h Plancks später nach ihm selbst benannte berühmte Konstante ist.

Für die mittlere Entropie eines Oszillators erhält man nun

$$S = k_B \left[\left(1 + \frac{E}{h\nu}\right) \ln \left(1 + \frac{E}{h\nu}\right) - \frac{E}{h\nu} \ln \frac{E}{h\nu} \right]$$

und durch Einsetzen in (2.7) weiter

$$\frac{1}{T} = \frac{k_B}{h\nu} \left[\ln \left(1 + \frac{E}{h\nu}\right) - \ln \frac{E}{h\nu} \right] = \frac{k_B}{h\nu} \ln \frac{1 + E/h\nu}{E/h\nu} = \frac{k_B}{h\nu} \ln \left(1 + \frac{h\nu}{E}\right).$$

Auflösen nach der mittleren Energie führt auf

$$E = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B} - 1},$$

was eingesetzt in (2.3)

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B} - 1} \quad (2.8)$$

ergibt, und das ist die Plancksche Strahlungsformel.

Die hier beschriebene Herleitung ist die erste, die in der Literatur auftaucht; sie ist heute allerdings ziemlich in Vergessenheit geraten. In Lehrbüchern der statistischen Mechanik stößt man verbreitet auf eine Variante, die ebenfalls von Planck stammt – er fand in der Folgezeit mehrere unterschiedliche Ableitungen – und die sehr viel direkter zum Ziel führt. Man startet dabei mit der klassischen *Boltzmann-Verteilung*

$$P(E) = e^{-E/k_B T},$$

die bis auf Normierung die Wahrscheinlichkeit angibt, im thermischen Gleichgewicht bei der Temperatur T ein Teilchen mit der Energie E zu finden. Die mittlere Energie eines klassischen Gleichgewichtssystems ergibt sich damit zu

$$\bar{E} = \frac{\int_0^{\infty} E e^{-E/k_B T} dE}{\int_0^{\infty} e^{-E/k_B T} dE}.$$

Die (elementare) Berechnung der Integrale führt in Verbindung mit (2.3) natürlich unmittelbar zum Rayleigh-Jeans-Gesetz. Baut man nun jedoch wieder die Energiequantenhypothese mit einer diskreten Abfolge

$$E_n = nh\nu, \quad n \in \mathbb{N}$$

der für die betrachteten Teilsysteme erlaubten Energiewerte ein, werden aus den Integralen unendliche Summen, man findet

$$\bar{E} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-nh\nu/k_B T}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu/k_B T}}$$

und kann aufgrund von $e^{-h\nu/k_B T} < 1$ Zähler und Nenner mit Hilfe der Summenformeln für die geometrische Reihe sowie die „abgeleitete“ geometrische Reihe,

$$\sum_{n=0}^{\infty} q^n = \frac{1}{1-q}, \quad \sum_{n=0}^{\infty} nq^n = \frac{q}{(1-q)^2},$$

aufsummieren, was auf

$$\bar{E} = \frac{h\nu e^{-h\nu/k_B T}}{1 - e^{-h\nu/k_B T}} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$

führt. Zusammen mit (2.3) erhält man das gewünschte Ergebnis

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}.$$

Die Plancksche Strahlungsformel beschreibt die Energiedichte der Strahlung von schwarzen Körpern genau und vor allen Dingen für alle Frequenzbereiche. Darüberhinaus lassen sich daraus im langwelligen und im kurzwelligen Bereich die beiden alten Formeln jeweils als Näherungen herleiten: Für $h\nu/k_B T \ll 1$ wird (2.8) zum Rayleigh-Jeansschen Strahlungsgesetz, für $h\nu/k_B T \gg 1$ ergibt sich das Wiensche Strahlungsgesetz.

Mit der Theorie der thermischen Strahlung war ein wesentlicher Aspekt der späteren Quantentheorie, nämlich das Auftreten von kleinsten, diskreten Paketen bei einem vermeintlich kontinuierlichen Substrat, das erste Mal in der Physik aufgetaucht – allerdings auch nicht mehr. Insofern ist es leicht übertrieben, hier von der Begründung der Quantentheorie zu sprechen, denn bis zu deren allgemeiner Formulierung war es zwar nicht aus zeitlicher, wohl aber aus begrifflicher Sicht noch ein weiter und schwieriger Weg; ein erster Grundstein war aber auf jeden Fall gelegt. Daß das Konzept der Postulierung gewisser physikalischer Größen in diskreten Paketen in die richtige Richtung wies, zeigte sich in der Folgezeit gleich mehrfach, als weitere bis dahin ungelöste Probleme in ähnlicher Weise erstmals physikalisch zugänglich wurden; auch die nächsten drei Abschnitte belegen dies¹².

¹²Als Millikan wenig später die Existenz der Elementarladung nachwies und diese in den Jahren darauf mit wachsender Genauigkeit messen konnte [608] - [611], schien ein weiteres Indiz der Tendenz der Natur zu gequantelten Größen hinzugekommen zu sein. Das wird zwar von populärer Seite bis heute so dargestellt, ist jedoch nicht korrekt, da es sich hier um eine ganz andere diskrete Größe handelt, die mit denjenigen der elementaren Quantenmechanik nicht in einen Topf geworfen werden darf.

2.1.2 Anwendungen der Planckschen Strahlungsformel

Das Plancksche Strahlungsgesetz erlaubte es nun erstmals, auch die anderen, bis dahin eher empirisch begründeten Gesetzmäßigkeiten der thermischen Strahlung abzuleiten. Man kann beispielsweise das Maximum der Energiedichte $\rho(\nu, T)$ berechnen, indem man die Plancksche Strahlungsformel nach ν ableitet. Dabei erhält man

$$\frac{\partial \rho}{\partial \nu} = \frac{8\pi h\nu^2}{c^3} \left[\frac{3}{e^{h\nu/k_B T} - 1} - \frac{h\nu}{k_B T} \frac{e^{h\nu/k_B T}}{(e^{h\nu/k_B T} - 1)^2} \right];$$

aus $\partial \rho / \partial \nu = 0$ folgt dann entweder $\nu = 0$ (langweilig) oder

$$e^{h\nu/k_B T} \left(3 - \frac{h\nu}{k_B T} \right) = 3, \quad (2.9)$$

eine transzendente Gleichung, deren Lösung mit Hilfe der *Lambertschen W-Funktion*¹³ ausgedrückt werden kann. Diese ist als Umkehrfunktion der Funktion

$$f(W) = W e^W$$

definiert, läßt sich jedoch nicht geschlossen analytisch angeben. Man kann sie in eine Potenzreihe entwickeln, beispielsweise

$$W(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-n)^{n-1}}{n!} x^n.$$

Mit der *W-Funktion* schreibt sich die Lösung von (2.9)

$$\nu_{\max} = \frac{k_B T}{h} [3 + W(-3 e^{-3})].$$

Der Zahlenwert muß numerisch berechnet werden, mit dem Resultat

$$\nu_{\max} = K \frac{k_B T}{h}$$

und der Konstanten $K = 2,812$. Das ist das *Wiensche Verschiebungsgesetz*. Es beschreibt, wie sich die Lage des Strahlungsmaximums mit steigender Temperatur zu größeren Frequenzen verschiebt.

¹³Benannt nach Johann Heinrich Lambert, der in einer Arbeit von 1758 die später nach ihm benannte Gleichung

$$x^a - x^b = (a - b) c x^{a+b}$$

untersuchte [526]. Euler betrachtete 1783 den Spezialfall

$$cx = wa^w,$$

zu deren Lösung er die *W-Funktion* einführte [274], wobei er Lambert ausdrücklich als Entdecker der ursprünglichen Gleichung erwähnte.

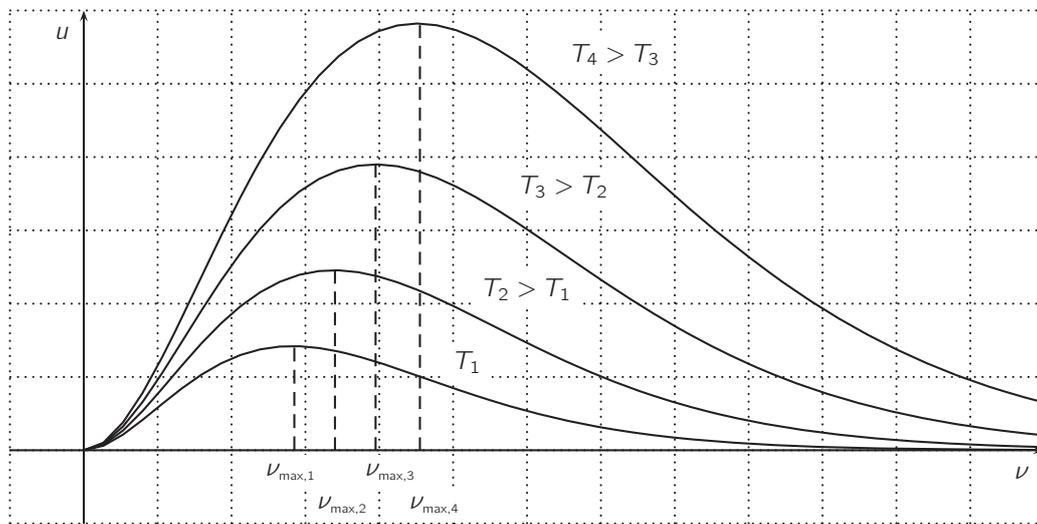


Abbildung 2.2: Plancksche Strahlungsformel und Wiensches Verschiebungsgesetz

Bestimmt man andererseits die gesamte Energiedichte

$$u = \int_0^{\infty} \rho(\nu, T) d\nu,$$

so liefert die Substitution $x = h\nu/k_B T$ zunächst

$$u = \frac{8\pi(k_B T)^4}{(hc)^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx.$$

Das Integral auf der rechten Seite hat die Gestalt $\int_0^{\infty} \frac{x^{r-1}}{e^x - 1} dx$. Um Integrale dieser Form auszuwerten, verwendet man die *Riemannsche Zetafunktion*

$$\zeta(x) = \sum_1^{\infty} \frac{1}{n^x}$$

sowie die *Gamma-Funktion*

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt.$$

Letztere stellt eine Erweiterung der Fakultät $n! = 1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot n$ auf beliebige Zahlen dar, es gilt nämlich $\Gamma(n+1) = n!$ für alle $n \in \mathbb{N}$. Das obige Integral läßt sich mit Hilfe der Summenformel für geometrische Reihen umformen; wir erhalten

$$\int_0^{\infty} \frac{x^{r-1}}{e^x - 1} dx = \int_0^{\infty} \frac{x^{r-1} e^{-x}}{1 - e^{-x}} dx = \int_0^{\infty} x^{r-1} e^{-x} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} dx = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} x^{r-1} e^{-(n+1)x} dx,$$

mit der Substitution $t = (n+1)x$ weiter

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} x^{r-1} e^{-(n+1)x} dx &= \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \left(\frac{t}{n+1}\right)^{r-1} \frac{e^{-t}}{n+1} dt \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \left(\frac{t}{n}\right)^{r-1} \frac{e^{-t}}{n} dt = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^r} \int_0^{\infty} t^{r-1} e^{-t} dt \end{aligned}$$

und folglich

$$\int_0^{\infty} \frac{x^{r-1}}{e^x - 1} dx = \zeta(r) \Gamma(r).$$

Aufgrund von $\zeta(4) = \pi^4/90$ und $\Gamma(4) = 3! = 6$ gilt speziell

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15},$$

und es folgt das *Stefan-Boltzmann-Gesetz*

$$u = \frac{8\pi^5}{15} \frac{(k_B T)^4}{(hc)^3}$$

mit seiner typischen T^4 -Abhängigkeit der Energiedichte.

2.1.3 Weitere Ableitungen der Planckschen Strahlungsformel

So beeindruckend die quantitative Übereinstimmung der Planckschen Strahlungsformel mit sämtlichen experimentellen Resultaten von Beginn an auch war, sie konnte nicht verhindern, daß ebenfalls von Beginn an massive Kritik gegen Plancks Herleitung, wie sie im vorigen Abschnitt beschrieben ist, vorgebracht wurde, im übrigen auch von Planck selbst. Im wesentlichen konzentrierte sich diese Kritik auf zwei Aspekte. Erstens ist die Herleitung in gewissem Sinn hybrid, da sie einerseits von der aus der klassischen Maxwellschen Elektrodynamik stammenden Formel (2.3) und damit von einem *kontinuierlichen* Energieaustausch zwischen den Oszillatoren der Behälterinnenwände und dem Strahlungsfeld ausgeht, andererseits aber mit der Quantisierungsannahme (2.4), wonach sich die Gesamtenergie nur in ganzzahligen Vielfachen einer festen Grundeinheit auf die Oszillatoren verteilen läßt, eine grundsätzlich *diskontinuierliche* Vorstellung ins Spiel bringt. Zweitens wird bei der Anwendung des Boltzmannschen

Prinzips stillschweigend vorausgesetzt, daß sämtliche Mikrozustände gleich wahrscheinlich sind. Diese Wahrscheinlichkeiten werden durch die Dynamik des Systems bestimmt, im Fall von Plancks Herleitung also von der klassischen Maxwellschen Dynamik. Folglich müßte die Anwendung des Boltzmannschen Prinzips notwendigerweise zum entsprechenden klassischen Strahlungsgesetz, also zur Rayleigh-Jeans-Formel führen. An der Gültigkeit der Planckschen Strahlungsformel wurde natürlich nicht gezweifelt; diese stand angesichts der damals schon präzisen empirischen Bestätigung nicht zur Diskussion. Die Konsequenz war jedoch in den Folgejahren eine ganze Reihe von weiteren Herleitungen und Herleitungsversuchen.

2.1.3.1 Quantenhypothese, aber richtig

Das prominenteste Beispiel dafür ist Albert Einstein, der die geschilderten Argumente besonders nachdrücklich vertrat und 1906 als einer der ersten zeigte, wie zumindest für das erste der beiden Abhilfe geleistet werden kann, indem er nachwies, daß die konsequente Beschreitung der von Planck vorgeschlagenen Gangart eine diskrete Natur nicht nur der Verteilung der Gesamtenergie auf die Oszillatoren, sondern auch des Energieaustauschs zwischen Oszillatoren und Strahlungsfeld geradezu erzwingt [238], wobei er ausgiebig auf eigene Vorleistungen im Bereich des thermodynamischen Formalismus [236] und insbesondere der Lichtquantenhypothese¹⁴ zurückgreift¹⁵. Ausgangspunkt ist dabei die in der Form

$$S = \frac{\bar{E}}{T} + k_B \ln \iint \dots \int e^{-E(p_1, p_2, \dots, p_n)/k_B T} dp_1 dp_2 \dots dp_n$$

geschriebene Entropie S eines physikalischen Systems, das durch die n Zustandsvariablen p_1, p_2, \dots, p_n vollkommen beschrieben sei, bei der absoluten Temperatur T ; dabei sei \bar{E} die Energie des Systems bei der Temperatur T . Das Integral läuft über alle möglichen Wertekombinationen der p_1, p_2, \dots, p_n . Der erste Term ist dabei die Entropie des thermodynamischen Gleichgewichts und der zweite die Abweichung davon gemäß dem Boltzmannschen Prinzip. Unter der Voraussetzung, daß das System aus sehr vielen Teilsystemen besteht und n daher eine sehr große Zahl ist, läßt sich dieser Ausdruck durch eine Näherung ersetzen, denn in diesem Fall liefern nur Wertekombinationen der p_1, p_2, \dots, p_n mit $E(p_1, p_2, \dots, p_n) \approx \bar{E}$ einen merklichen Beitrag zu S . Ist ΔE die Abweichung von \bar{E} und einerseits sehr klein, andererseits aber immer noch so groß, daß $k_B \ln \bar{E}$ ebenfalls sehr klein ist, dann gilt mit den obigen Annahmen

$$S = \frac{\bar{E}}{T} + k_B \ln \left(e^{-\bar{E}/k_B T} \int_E^{E+\Delta E} \int_E^{E+\Delta E} \dots \int_E^{E+\Delta E} dp_1 dp_2 \dots dp_n \right)$$

¹⁴Siehe Abschnitt 2.3.

¹⁵Vergleiche auch [227], wo Ehrenfest ebenfalls zur Forderung gelangt, die Energieniveaus der Oszillatoren konsequent zu quantisieren.

$$= k_B \ln \int_E^{E+\Delta E} \int_E^{E+\Delta E} \cdots \int_E^{E+\Delta E} dp_1 dp_2 \dots dp_n, \quad (2.10)$$

unabhängig von ΔE .

Zur Auswertung dieses Integrals modelliert Einstein die Planckschen Resonatoren durch Ionen, die geradlinige harmonische Schwingungen um ihre Ruhelage ausführen können. Die Zustandsgrößen p_j der Resonatoren werden dann durch die momentanen Abweichungen x_j der Ionen von den Gleichgewichtslagen sowie deren Momentangeschwindigkeiten $v_j = dx_j/dt$ realisiert; für die Energie des j -ten Resonators gilt somit

$$E_j = \frac{1}{2} (D_j x_j^2 + m_j v_j^2)$$

oder

$$\int_{E_j}^{E_j+dE_j} dx_j dv_j \propto dE_j.$$

Setzt man das in (2.10) ein, so folgt

$$S = k_B \ln \int_E^{E+\Delta E} \int_E^{E+\Delta E} \cdots \int_E^{E+\Delta E} dE_1 dE_2 \dots dE_n \equiv k_B \ln W. \quad (2.11)$$

Einstein betont nun, daß die Berechnung der Entropie mit Hilfe dieses Ausdrucks zur Rayleigh-Jeansschen Strahlungsformel führt und liefert sogleich den entscheidenden Hinweis, wie man das verhindern kann. Nimmt man nämlich an, daß nicht nur die Verteilung der Gesamtenergie auf die Resonatoren, sondern auch die Wechselwirkung zwischen diesen grundsätzlich von diskontinuierlicher Natur ist, so folgt daraus, daß die Energieänderung eines Resonators durch Absorption und Emission nur sprungweise erfolgen kann. Genauer gesagt sollen solche Energieänderungen nur in ganzzahligen Vielfachen von

$$\varepsilon = h\nu$$

erfolgen, und damit kann die Energie E_j eines jeden Resonators selbst ebenfalls nicht jeden beliebigen Wert, sondern nur ganzzahlige Vielfache von ε annehmen. Folglich hat man oben $\Delta E = \varepsilon$ zu setzen, und da das nunmehr diskrete Integral über alle möglichen Wertekombinationen der E_1, E_2, \dots, E_n läuft, erhält man für W aus (2.11) sofort das Resultat (2.5) aus Abschnitt 2.1.1 und damit auf dem selben Weg wie dort die Plancksche Strahlungsformel.

Der entscheidende Unterschied ist die hier im Gegensatz zur ursprünglichen Planckschen Überlegung konsequent durchgehaltene Lichtquantenhypothese, die Einstein selbst kurz zuvor auf ganz andere Weise, aber nicht weniger konsequent in die Physik eingeführt hatte¹⁶.

¹⁶Wir kommen in Abschnitt 2.3 ausführlich darauf zurück.

Planck selbst hielt diese Vorstellung für ein reines Behelfskonzept ohne konkrete Bedeutung; im Nachhinein war nun jedoch deutlich geworden, daß die Lichtquanten als reale physikalische Objekte mit der Planckschen Strahlungsformel bereits einige Jahre vor ihrer „amtlichen“ Entdeckung Einzug in die Physik gehalten hatten.

2.1.3.2 Die erste Quantisierung des Strahlungsfeldes

Die Vorstellung von Resonatoren, die harmonische Schwingungen ausführen und aus denen die Innenwände eines Temperaturstrahlers aufgebaut sind, wirkt natürlich reichlich künstlich. 1910 zog Peter Debye daraus die Konsequenz, bei der Ableitung der Planckschen Strahlungsformel ganz auf dieses Modell zu verzichten; stattdessen verwendete er Strahlungszustände des elektromagnetischen Feldes unter der Prämisse, daß deren Energie nur in diskreten Energiequanten auftritt, und berechnete deren thermodynamische Wahrscheinlichkeiten und damit deren Entropie nur auf Basis dieser Annahme [182]. Das gewünschte Ergebnis erhält man dann durch die Forderung, daß die thermodynamische Wahrscheinlichkeit und damit die Entropie im Fall des thermodynamischen Gleichgewichts und damit für die schwarze Strahlung maximal sein muß. Debye betrachtet hierzu ebenfalls einen mit Strahlung gefüllten würfelförmigen Raum der Kantenlänge l , leitet für diesen zunächst in der üblichen Weise die Relation (2.3) her, die er in der Form

$$N d\nu = \frac{8\pi l^3 \nu^2}{c^3} d\nu \quad (2.12)$$

schreibt; dabei ist N die Anzahl der Schwingungsmoden pro Frequenz und $N d\nu$ deren Anzahl im Frequenzintervall $[\nu, \nu + d\nu]$. Folglich erhält man alle möglichen Schwingungsmoden in diesem Frequenzbereich, indem man $N f d\nu$ Energiequanten in allen möglichen Kombinationen auf die $N d\nu$ Schwingungsmoden verteilt. Die thermodynamische Wahrscheinlichkeit eines durch $f(\nu)$ charakterisierten elektromagnetischen Feldes ist dann für $[\nu, \nu + d\nu]$ mit der Formel (2.5) und aufgrund von $N d\nu \gg 1$ sowie $N f d\nu \gg 1$ näherungsweise

$$W(\nu) = \frac{(N d\nu + N f d\nu)!}{(N d\nu)! (N f d\nu)!},$$

und die gesamte Wahrscheinlichkeit für alle Frequenzen

$$W = \prod_{\nu=0}^{\infty} \frac{(N d\nu + N f d\nu)!}{(N d\nu)! (N f d\nu)!},$$

was für die gesamte Entropie auf

$$S = k_B \ln W = k_B \sum_{\nu=0}^{\infty} \ln \frac{(N d\nu + N f d\nu)!}{(N d\nu)! (N f d\nu)!}$$

führt. Anwendung der Stirlingschen Formel bis zur zweiten Ordnung,

$$\ln(n!) = n \ln n - n, \quad (2.13)$$

liefert weiter

$$\begin{aligned}
 S &= k_B \sum_{\nu=0}^{\infty} N d\nu \{ (1+f) \ln [N d\nu (1+f)] - \ln (N d\nu) - f \ln (N f d\nu) \} \\
 &= k_B \sum_{\nu=0}^{\infty} N d\nu \{ (1+f) [\ln (1+f) + \ln (N d\nu)] - \ln (N d\nu) - f [\ln f + \ln (N d\nu)] \} \\
 &= k_B \sum_{\nu=0}^{\infty} N d\nu [(1+f) \ln (1+f) - f \ln f].
 \end{aligned}$$

Debye erklärt nicht näher, wie er sich Produkte und Summen über einen kontinuierlichen Parameter vorstellt; stattdessen geht er nun von Summen zu Integralen über, wodurch sich das Problem in physikalisch robuster Weise von selbst erledigt. Es ergibt sich aufgrund von (2.12) für die Entropie

$$S = k_B \frac{8\pi l^3}{c^3} \int_0^{\infty} [(1+f) \ln (1+f) - f \ln f] \nu^2 d\nu$$

und für die Entropiedichte

$$s = k_B \frac{8\pi}{c^3} \int_0^{\infty} [(1+f) \ln (1+f) - f \ln f] \nu^2 d\nu,$$

bezogen auf einen beliebigen Strahlungszustand mit einer Frequenz aus dem Intervall $[\nu, \nu + d\nu]$ und mit der Energie

$$E(\nu) = \frac{8\pi l^3 h \nu^3}{c^3} f(\nu) d\nu$$

beziehungsweise der spektralen Energiedichte

$$u(\nu) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} f(\nu).$$

Die gesamte Energiedichte ist dann

$$u = \int_0^{\infty} u(\nu) d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^{\infty} \nu^3 f(\nu) d\nu.$$

Nun betrachtet man das System im thermischen Gleichgewicht, das heißt, es gilt diejenige Funktion $f(\nu)$ zu finden, für welche die Entropie maximal wird, unter der Nebenbedingung

$$u - \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^{\infty} \nu^3 f d\nu = 0.$$

Nach Einführung eines Lagrange-Multiplikators erhält man so die Zielfunktion

$$g(f) = k_B \frac{8\pi}{c^3} \int_0^\infty [(1+f) \ln(1+f) - f \ln f] \nu^2 d\nu + a \left[u - \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^\infty \nu^3 f d\nu \right]$$

und die Bedingung

$$\frac{\partial g}{\partial f} = k_B \frac{8\pi}{c^3} \int_0^\infty [\ln(1+f) - \ln f] \nu^2 d\nu - a \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^\infty \nu^3 d\nu = 0,$$

die äquivalent zu

$$\ln(1+f) - \ln f = ah\nu \quad (2.14)$$

ist. Auflösen nach f liefert schließlich

$$f = \frac{1}{e^{ah\nu} - 1}.$$

Zur Bestimmung des Lagrange-Multiplikators a führt man nun über

$$\frac{\partial s}{\partial u} = \frac{1}{T}$$

die absolute Temperatur T ein. Da sowohl s als auch u als Funktionen von f auch von a abhängig sind, läßt sich das auch in der Form

$$\frac{1}{T} = \frac{\frac{\partial s}{\partial a} da}{\frac{\partial u}{\partial a} da} = \frac{\frac{\partial s}{\partial a}}{\frac{\partial u}{\partial a}} \quad (2.15)$$

schreiben, wofür man nun Zähler und Nenner getrennt berechnet. Man findet mit

$$\frac{\partial f}{\partial a} = -h\nu \frac{e^{ah\nu}}{(e^{ah\nu} - 1)^2} = -h\nu \frac{1}{e^{ah\nu} - 1} \left(1 + \frac{1}{e^{ah\nu} - 1} \right) = -h\nu f(1+f)$$

und (2.14) einerseits

$$\frac{\partial s}{\partial a} = -h\nu k_B \frac{8\pi}{c^3} \int_0^\infty [\ln(1+f) - \ln f] f(1+f) \nu^3 d\nu = -a h^2 k_B \frac{8\pi}{c^3} \int_0^\infty f(1+f) \nu^4 d\nu,$$

andererseits

$$\frac{\partial u}{\partial a} = -\frac{8\pi h^2}{c^3} \int_0^\infty f(1+f) \nu^3 d\nu,$$

und damit nach Einsetzen in (2.15)

$$a = \frac{1}{k_B T}.$$

Damit erhält man

$$f = \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$

und folglich für die Energiedichte

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$

sowie für die gesamte Energie

$$u = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^\infty \frac{\nu^3 d\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}.$$

Die Auswertung dieses Integrals führt, wie wir in Abschnitt 2.1.2 gesehen haben, auf das Stefan-Boltzmann-Gesetz.

2.1.3.3 Einsteins zweite Herleitung

In Lehrbüchern wird heutzutage sehr häufig eine weitere Herleitung beschrieben, die ebenfalls von Einstein gefunden wurde. Die zentrale Idee dieses Zugangs besteht in einer Bilanzierung der Wahrscheinlichkeiten von Emission und Absorption elektromagnetischer Wellen durch ein System, das mit thermischer Strahlung im statistischen Gleichgewicht steht. Fundamental neu war dabei die Unterscheidung zweier unterschiedlicher Sorten der Emission, nämlich von *spontaner Emission*, die ohne äußere Einwirkung erfolgt, und *stimulierter* oder *induzierter Emission*, die durch eingestrahlte elektromagnetische Wellen ausgelöst wird. Erstere war nichts neues, letztere dagegen war bis dahin unbekannt; sie wurde von Einstein bei dieser Gelegenheit postuliert¹⁷. Hierin lag die eigentliche Bedeutung dieser Herleitung, denn der Vorgang der induzierten Emission erwies sich bald als fundamental für das neu entstehende Gebiet der Quantenoptik. Sie ist insbesondere für die Funktionsweise des Lasers von großer Wichtigkeit¹⁸.

Einstein hatte 1912 mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitsbetrachtungen zur spontanen Emission und zur Absorption von elektromagnetischen Wellen das Wiensche Strahlungsgesetz hergeleitet [244]; durch zusätzliche Berücksichtigung auch der induzierten Emission konnte er diese Herleitung 1916 auf die Plancksche Strahlungsformel verallgemeinern [245], [246]¹⁹. Um das nachzuvollziehen, betrachten wir ein monomolekulares Gas mit diskreten Energieniveaus E_1, E_2, \dots im Gleichgewicht mit thermischer Strahlung. Absorbiert das System ein

¹⁷Experimentell nachgewiesen wurde sie erst 1928 von Hans Kopfermann und Rudolf Ladenburg [512].

¹⁸Der erste funktionsfähige Laser wurde 1960 von Theodore Maiman gebaut [580].

¹⁹Einstein verwendet diese Begriffe noch nicht; er spricht von Übergängen der Ausstrahlung und Übergängen der Einstrahlung, wobei letztere sowohl zu einer Energiezunahme wie auch zu einer Energieabnahme führen können. Mit solchen auf tiefere Energieniveaus führenden, mit Einstrahlung verbundenen Übergängen ist natürlich genau die induzierte Emission gemeint.

Photon der Energie $\varepsilon_{mn} \equiv E_m - E_n$, so führt das zu Übergängen vom Zustand n zum Zustand m , während die Emission eines solchen Photons Übergänge von m nach n nach sich zieht. Dabei ist wie oben schon erwähnt zu berücksichtigen, daß es zwei unterschiedliche Arten der Emission gibt. Diese kann spontan erfolgen, indem das System von selbst von einem energetisch höheren in einen energetisch tieferen Zustand übergeht und dabei ein Photon der entsprechenden Energie aussendet, oder aber induziert, das heißt, sie wird durch ein Photon aus dem äußeren Strahlungsfeld ausgelöst; die Energie dieses Photons muß dabei genau der Energiedifferenz zweier Zustände des Systems entsprechen, sodaß zwei identische Photonen emittiert werden, nämlich das eingestrahlte und ein weiteres, das beim Übergang vom energetisch höheren in den energetisch tieferen Zustand ausgesendet wird.

Für beliebige Indexpaare m, n liegt dabei jeweils thermodynamisches Gleichgewicht vor. Das bedeutet, daß pro Zeiteinheit stets genau soviele Moleküle bei Absorption von n nach m übergehen, wie bei Emission von m nach n . Bezeichnen wir mit N_j die Anzahl der Moleküle im Zustand mit der Energie E_j und mit dN/dt die Anzahl der Übergänge pro Zeiteinheit, so können wir diese wie folgt bilanzieren:

- a) Die Zahl der Übergänge von n nach m durch *Absorption* ist zur Energiedichte u und zu N_n proportional, das heißt, es gilt

$$\frac{dN_A}{dt} = B_n^m N_n u,$$

mit einem Proportionalitätsfaktor B_n^m .

- b) Die Zahl der Übergänge von m nach n durch *spontane Emission* ist nur zu N_m proportional, folglich gilt

$$\frac{dN_{E,s}}{dt} = A_m^n N_m,$$

mit einem weiteren Proportionalitätsfaktor A_m^n .

- c) Die Zahl der Übergänge von m nach n durch *induzierte Emission* ist wiederum zu u und zu N_m proportional, es gilt also

$$\frac{dN_{E,i}}{dt} = B_m^n N_m u,$$

mit einem dritten Proportionalitätsfaktor B_m^n ²⁰.

Die Forderung nach thermischem Gleichgewicht führt damit auf die Relation

$$A_m^n N_m + B_m^n N_m u = B_n^m N_n u. \quad (2.16)$$

Die Wahrscheinlichkeit für die Besetzung des Zustands n ist gemäß der statistischen Thermodynamik

$$W(n) = g(n) e^{-E_n/k_B T};$$

²⁰Die Konstanten A_m^n , B_m^n und B_n^m werden insbesondere in der Lehrbuchliteratur auch als *Einstein-Koeffizienten* bezeichnet.

dabei ist $g(n)$ der Entartungsgrad des Zustands n ²¹. Das führt unmittelbar auf

$$\frac{N_n}{N_m} = \frac{g(n)}{g(m)} e^{(E_m - E_n)/k_B T}$$

und nach Einsetzen in (2.16) und Auflösen nach u weiter auf

$$u = \frac{A_m^n g(m)}{B_n^m g(n) e^{(E_m - E_n)/k_B T} - B_m^n g(m)}.$$

Aufgrund der Lichtquantenhypothese kann man hier zusätzlich $E_m - E_n = h\nu$ setzen und erhält damit

$$u = \frac{A_m^n g(m)}{B_n^m g(n) e^{h\nu/k_B T} - B_m^n g(m)}.$$

Zur Bestimmung der Proportionalitätsfaktoren ist einerseits zu beachten, daß

$$\lim_{T \rightarrow \infty} u = \infty$$

gelten muß; das zieht notwendigerweise

$$\lim_{T \rightarrow \infty} (B_n^m g(n) e^{h\nu/k_B T} - B_m^n g(m)) = B_n^m g(n) - B_m^n g(m) = 0$$

und damit

$$B_n^m g(n) = B_m^n g(m)$$

nach sich, und für die Energiedichte folgt

$$u = \frac{A_m^n / B_m^n}{e^{h\nu/k_B T} - 1}.$$

Andererseits soll u für große Frequenzen in das Wiensche Strahlungsgesetz übergehen, woraus

$$\frac{A_m^n}{B_m^n} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}$$

folgt. Insgesamt ergibt so gerade wieder die Plancksche Strahlungsformel

$$u = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}.$$

²¹Einstein spricht hier vom statistischen Gewicht des Zustands n .

2.2 Die Anfänge der Tieftemperaturphysik

Nachdem das Problem des schwarzen Strahlers einer ersten Lösung zugeführt worden war, lag der Versuch nahe, in ähnlicher Weise auch andere drängende Fragestellungen der zeitgenössischen Physik in Angriff zu nehmen. Der nächste Erfolg dieser Art ließ in der Tat nicht lange auf sich warten und gelang wenig später im Zusammenhang mit dem ungelösten Problem der spezifischen Wärme von Festkörpern bei tiefen Temperaturen. Einstein hatte als erster die Idee, in Analogie zu den quantisierten elektromagnetischen Wellen auch für die Schwingungen von Kristallgittern bei Festkörpern nur diskrete Energiewerte zuzulassen. Solche quantisierten Gitterschwingungen nennt man heute *Phononen*²², in Anlehnung an die Photonen des quantisierten elektromagnetischen Feldes. Sie spielen in der Festkörperphysik eine fundamentale Rolle.

Zur Berechnung der inneren Energie eines Kristallgitters ging Einstein 1907 völlig analog zur Herleitung der Planckschen Strahlungsformel vor [239]. Anstelle eines elektrischen Feldes betrachtete er die Gitteratome des Festkörpers als in einen Kasten eingesperrte voneinander unabhängige harmonische Oszillatoren der selben Eigenfrequenz ν_E mit den diskreten Energieniveaus

$$\varepsilon_n = n h \nu_E; \quad n \in \mathbb{N}. \quad (2.17)$$

Für die mittlere Energie eines solchen Oszillators ergibt sich wie im vorigen Abschnitt²³

$$\bar{\varepsilon} = \frac{h \nu_E}{e^{h \nu_E / k_B T} - 1},$$

und da jedes Gitteratom drei Freiheitsgrade besitzt, erhält man für die innere Energie eines Gitters aus N_A Gitteratomen²⁴

$$U = \frac{3 N_A h \nu_E}{e^{h \nu_E / k_B T} - 1}. \quad (2.18)$$

Für die molare Wärmekapazität des Festkörpers liefert das

$$c_{\text{mol}} = \frac{\partial U}{\partial T} = 3R \left(\frac{h \nu_E}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{h \nu_E / k_B T}}{(e^{h \nu_E / k_B T} - 1)^2}$$

oder

$$c_{\text{mol}} = 3R \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\theta_E / T}}{(e^{\theta_E / T} - 1)^2}, \quad (2.19)$$

²²Dieser Begriff wurde erstmals 1932 von J. I. Frenkel in seinem Buch [307] verwendet.

²³Hier ebenso wie an der entsprechenden Stelle des vorigen Abschnitts deutet sich die Bose-Einstein-Verteilung der Quantenstatistik der Bosonen an, zu der man gelangt, wenn man von der mittleren Energie zur mittleren Besetzungszahl in Abhängigkeit von der Temperatur übergeht. Die Fermi-Dirac-Verteilung, also die entsprechende Statistik der Fermionen, wurde erst später entdeckt.

²⁴Aus heutiger Sicht muß hier noch die Nullpunktenergie addiert werden. Da sie jedoch nichts zur Wärmekapazität beiträgt, braucht sie in diesem Zusammenhang nicht berücksichtigt zu werden.

mit der Einstein-Temperatur $\theta_E = h\nu_E/k_B$. Für hohe Temperaturen geht das in das Gesetz von Dulong-Petit über, denn für $x \ll 1$ gilt $e^x \approx 1 + x$ und damit $c_{\text{mol}} \approx 3R$. Für tiefe Temperaturen liefert das Einstein-Modell wegen $e^{\theta_E/T} \gg 1$

$$c_{\text{mol}} = 3R \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 e^{-\theta_E/T}$$

und damit zwar wunschgemäß $c_{\text{mol}} \rightarrow 0$ für $T \rightarrow 0$, darüberhinaus ergeben sich jedoch systematische Abweichungen von den gemessenen Werten.

Debye konnte 1912 eine wesentliche Verbesserung erreichen, indem er von der Vorstellung einer einheitlichen Eigenfrequenz der Gitter-Oszillatoren abwich und eine kontinuierliche Verteilung derselben betrachtete [183]²⁵. Das ist eigentlich auch unmittelbar einleuchtend, denn die Gitteratome schwingen nicht unabhängig voneinander, sondern stellen gekoppelte Oszillatoren dar. Gleichung (2.18) ist damit zunächst durch

$$U = V \int_0^{\infty} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} g(\nu) d\nu$$

zu ersetzen, mit einer Verteilungsfunktion $g(\nu)$, die man in der statistischen Mechanik *Zustandsdichte* nennt; V ist das Volumen des Festkörpers. $g(\nu) d\nu$ gibt die Anzahl der Gitterschwingungen pro Volumen im Frequenzintervall der Zustände mit Frequenzen im Intervall $[\nu, \nu + d\nu]$ an, und da die Gesamtzahl der Eigenschwingungen eines N -atomigen Kristalls $3N$ ist, gilt folglich

$$\int_0^{\infty} g(\nu) d\nu = \frac{3N}{V}.$$

Analog zur Formel (2.1.1) des vorigen Abschnitts, aber unter Berücksichtigung der für Schallwellen drei möglichen Polarisationsrichtungen²⁶ findet man für die Zustandsdichte der Phononen den Ausdruck

$$g(\nu) = \frac{dN(\nu)}{d\nu} = \frac{6\nu^2}{c_S^3}.$$

²⁵Diese Idee hatten Nernst und Lindemann schon etwas früher, indem sie zusätzlich zur Frequenz ν_E als zweite Frequenz $\nu_E/2$ verwendeten und anstelle von (2.19) die Formel

$$c_{\text{mol}} = \frac{3R}{2} \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \left[\frac{e^{\theta_E/T}}{(e^{\theta_E/T} - 1)^2} + \frac{e^{\theta_E/2T}}{4(e^{\theta_E/2T} - 1)^2} \right]$$

fanden, womit sie Resultate erzielten, die wesentlich besser mit den empirischen Werten übereinstimmten als jene von Einstein [644], [645], [646]. Sie konnten jedoch keine plausible Begründung für diese Vorgehensweise angeben, sodaß dieselbe ad hoc bleibt. Auch Einstein selbst wies etwa zur selben Zeit auf die Notwendigkeit der Einführung mehrerer oder sogar sehr vieler unterschiedlicher Schwingungsfrequenzen hin [243]. Grundsätzlich neu an Debyes Idee ist die *kontinuierliche* Verteilung der Frequenzen.

²⁶Im Gegensatz zu Photonen gibt es für Phononen zwei transversale und eine longitudinale Polarisationsrichtung.

Hier ist c_S die Schallgeschwindigkeit in dem betrachteten Festkörper. Da es nur maximal soviele Phononen wie Gitteratome geben kann, darf die Integration natürlich nicht bis ∞ erfolgen. Debye berücksichtigt dies durch Einführung einer *Abschneidefrequenz* ν_D und einer entsprechend abgewandelten Zustandsdichte

$$g_D(\nu) = \begin{cases} \frac{6\nu^2}{c_S^3} & \text{für } \nu < \nu_D \\ 0 & \text{für } \nu > \nu_D \end{cases}$$

Die Abschneidefrequenz kann über die Forderung

$$\frac{6}{c_S^3} \int_0^{\nu_D} \nu^2 d\nu = \frac{3N}{V}$$

bestimmt werden; das liefert

$$\nu_D = c_S \left(\frac{3N}{2V} \right)^{1/3}.$$

Für die innere Energie eines Festkörpers mit N_A Atomen findet man nun²⁷

$$U = \frac{9N_A}{h\nu_D} \int_0^{\nu_D} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} d\nu$$

oder nach Einführung der Debye-Temperatur $\theta_D = h\nu_D/k_B$ sowie mit der Substitution $x = h\nu/k_B T$

$$U = \frac{9N_A k_B T^4}{\theta_D^3} \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx.$$

Für die spezifische Wärmekapazität erhalten wir damit

$$c_{\text{mol}} = 9N_A k_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx. \quad (2.20)$$

Das Integral auf der rechten Seite ist nicht elementar auswertbar und muß numerisch berechnet werden.

Das Debye-Modell stimmt sehr gut mit experimentell ermittelten Werten überein; es liefert auch in guter Näherung das richtige Verhalten in den Grenzfällen sehr hoher beziehungsweise sehr tiefer Temperaturen. Einerseits führt $T \gg \theta_D$ auf

$$\int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \approx \int_0^{\theta_D/T} x^2 dx = \frac{1}{3} \left(\frac{h\nu_D}{k_B T} \right)^3$$

²⁷Hier gilt hinsichtlich der Nullpunktsenergie dasselbe wie oben.

und damit auf

$$U = 3N_A k_B T,$$

sodaß man wieder bei

$$c_{\text{mol}} = 3N_A k_B$$

landet, also beim Gesetz von Dulong und Petit. Für $T \ll \theta_D$ dagegen kann man die obere Grenze des Integrals auf der rechten Seite von (2.20) durch ∞ ersetzen und dieses dann auswerten. Partielle Integration liefert dabei zunächst

$$\int_0^{\infty} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx = \left[x^4 \int \frac{e^t}{(e^t - 1)^2} dt \right]_0^{\infty} - 4 \int_0^{\infty} x^3 \int \frac{e^t}{(e^t - 1)^2} dt dx.$$

Das dabei neu auftauchende Integral ergibt mit Hilfe der Substitution $z = e^t - 1$

$$\int \frac{e^t}{(e^t - 1)^2} dt = \int \frac{dz}{z^2} = -\frac{1}{z - 1} = \frac{1}{1 - e^x};$$

daraus und mit der Regel von de l'Hospital folgt

$$\int_0^{\infty} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx = \left[\frac{x^4}{1 - e^x} \right]_0^{\infty} - 4 \int_0^{\infty} \frac{x^3}{1 - e^x} dx = 4 \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx,$$

Dieses Integral wurde in Abschnitt 2.1.2 berechnet. Man erhält

$$\int_0^{\infty} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx = \frac{4\pi^4}{15},$$

und damit wird (2.20) zu

$$c_{\text{mol}} = N_A k_B \frac{12\pi^4}{5} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3.$$

Das ist das *Debyesche* T^3 -Gesetz der spezifischen Wärme von Festkörpern. Selbstverständlich wird dadurch auch der Grenzfall $c_{\text{mol}} \rightarrow 0$ für $T \rightarrow 0$ korrekt beschrieben.

2.3 Die Lichtquantenhypothese

Es wurde bereits erwähnt, daß der Photoeffekt gewissermaßen unfreiwillig in die Rolle eines vermeintlichen Entscheidungsexperiments in Bezug auf die Natur des Lichts geriet. Man sah sich beim Versuch, solche Phänomene im Rahmen einer klassischen, kontinuierlichen Vorstellung des Lichts zu erklären, mit beträchtlichen und zunächst scheinbar nicht zu überwindenden Schwierigkeiten konfrontiert. Das änderte sich mit Einsteins Lichtquantenhypothese von

1905²⁸, bei der er annahm, daß das Licht seine Energie in Form von Quanten, also kleinsten Portionen abgibt, den Photonen [237]²⁹. Die Idee war oberflächlich betrachtet nicht völlig neu, aber im Gegensatz zu Planck betrachtete Einstein diese Photonen nicht als rein formalen Trick, sondern als real existierende Objekte³⁰. Inwieweit er sie zu diesem Zeitpunkt bereits als *Teilchen* auffaßte, ist schwer zu sagen; später tat er dies jedoch zweifellos, wie wir noch sehen werden.

Mit der Lichtquantenhypothese läßt sich der Photoeffekt zwanglos erklären. Jedes Photon mit genügend Energie löst ein Elektron aus. Die aus der Sicht der klassischen Physik scheinbar merkwürdige Tatsache, daß die Spannung dieser sogenannten Photoelektronen nicht von der Intensität des verwendeten Lichts, sondern von dessen Frequenz, die Stromstärke dagegen von der Intensität des Lichts, also von der Anzahl der einlaufenden Photonen abhängt, wird dadurch unmittelbar einsichtig. Höhere Frequenzen bedeuten energiereichere Photonen, höhere Intensitäten dagegen mehr Photonen. Außerdem kann nur dann überhaupt ein Photostrom auftreten, wenn die Energie, welche die einlaufenden Photonen an die Elektroden des Leiters übertragen, ausreicht, um eine materialspezifische Ablöseenergie aufzubringen, die mindestens erforderlich ist, um den Leiter zu verlassen³¹. Quantitativ gesehen ergibt sich daraus beim Photoeffekt für die maximale Energie der herausgelösten Photoelektronen die in Abschnitt 1.2.4 beschriebene Beziehung

$$E_{\max} = h\nu - W_K, \quad (2.21)$$

eine Relation, die gut mit Lenards Resultaten übereinstimmte und 1916 von Millikan mit großer Präzision bestätigt werden konnte [611], [612].

2.3.1 Vom Rechenrick zur physikalischen Realität

Einstein war sich sehr wohl im klaren, daß die Lichtquantenhypothese keineswegs eine unvermeidliche Folgerung aus den Experimenten zum Photoeffekt darstellte; das geht schon aus dem Titel seines Aufsatzes von 1905, den er „Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt“ nannte, unmißverständlich hervor. Es war nicht in erster Linie die Absicht dieser Arbeit, eine Erklärung des Photoeffekts zu liefern;

²⁸Einen ausführlichen Überblick über deren physikalischen Inhalt und den historischen Ablauf ihrer Etablierung in der wissenschaftlichen Welt liefert [845]. Einsteins gesamter Beitrag zur Entwicklung der Quantentheorie im Überblick wird in [661] beschrieben.

²⁹Der Begriff „Photonen“ tauchte allerdings erst später auf; er wurde von dem amerikanischen Chemiker G. N. Lewis 1926 eingeführt [549].

³⁰Um keinen falschen Eindruck aufkommen zu lassen, muß an dieser Stelle erwähnt werden, daß sich die beschriebene antirealistische Haltung bei Planck ausschließlich auf die Lichtquanten beschränkte; ansonsten war er durch und durch ein Vertreter des naturwissenschaftlichen Realismus. Das wird besonders anhand einer heftigen Debatte deutlich, die 1910 zwischen Planck und Mach als Vertreter einer gegenteiligen Auffassung ausbrach [702], [703]. In diesem Streit hatte Planck zwar alle sachlichen Argumente auf seiner Seite, dennoch führte er die Diskussion in einer ins persönliche gehenden und damit äußerst unfairen Art und Weise. Genaueres darüber findet man bei [767].

³¹Die Materialabhängigkeit dieser Ablösearbeit wurde 1903 von Lenard nachgewiesen [545].

letzterer ist lediglich einer von drei experimentellen Indizien, die Einstein für seine Lichtenergiequanten anführte. Die anderen beiden sind die Stokesche Regel der Photolumineszenz und die Gasionisation durch ultraviolettes Licht. Die Stokesche Regel besagt, daß die Frequenz des ausgestrahlten Lichts diejenige des eingestrahlten Lichts nicht überschreiten kann. Das läßt sich mit dem Energieerhaltungssatz und der Vorstellung erklären, daß bei solchen Prozessen Photonen der Energie $h\nu_1$ in die photolumineszierende Substanz eindringen und dadurch angeregt dort Photonen der Energie $h\nu_2$ mit $\nu_1 \geq \nu_2$ abgegeben werden. Bei der Gasionisation stellt man eine vom Material abhängige maximale wirksame Wellenlänge des verwendeten Lichts fest, die durch die materialabhängige Ionisationsarbeit pro Gasmolekül in Verbindung mit der Energieübertragung von jeweils einem Photon an jeweils ein Gasmolekül verstanden werden kann.

Die Einführung der Lichtenergiequanten begründet Einstein weiter vorne im Hauptteil der selben Arbeit auf ganz andere Weise, nämlich mit Hilfe der Anwendung der statistischen Mechanik auf thermische Strahlung. Er leitet dabei zunächst mit Hilfe des Äquipartitionstheorems³² das Rayleigh-Jeans-Gesetz

$$\rho(\nu) = \frac{8\pi k_B T \nu^2}{c^3}$$

her und zeigt, daß dieses zur Ultraviolett-Katastrophe führt, das heißt, die daraus folgende gesamte Energiedichte divergiert, denn es gilt

$$\int_0^{\infty} \rho(\nu) d\nu = \frac{8\pi k_B T}{c^3} \int_0^{\infty} \nu^2 d\nu = \infty.$$

Er kommt damit und nach einer Berechnung der Avogadro-Konstanten mit Hilfe der Planckschen Strahlungsformel zum Schluß, daß letztere mit den Erfahrungen übereinstimmt, die entsprechenden klassischen, auf der Wellenvorstellung des Lichts beruhenden Relationen jedoch bei kleinen Wellenlängen und kleinen Energiedichten versagen. Es folgt eine sorgfältige Analyse der Entropie thermischer Strahlung. Für diese gilt gemäß der Thermodynamik

$$S = V \int_0^{\infty} \sigma(\rho, \nu) d\nu;$$

dabei ist V das Volumen, in dem die thermische Strahlung eingeschlossen ist, und σ die spektrale Entropiedichte, für die

$$\frac{d\sigma}{d\rho} = \frac{1}{T}$$

gilt. Einstein beschränkt sich auf den Fall hoher Frequenzen, für die das Wiensche Strahlungsgesetz

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} e^{h\nu/k_B T}$$

³²Zu diesem und den weiteren hier auftretenden statistisch-mechanischen Fachbegriffen siehe beispielsweise [830].

und daraus folgend

$$\frac{1}{T} = -\frac{k_B}{h\nu} \ln \frac{\rho c^3}{8\pi h\nu^3}$$

gilt. Das liefert

$$\sigma(\rho, \nu) = -\frac{k_B \rho}{h\nu} \ln \left(\frac{\rho c^3}{8\pi h\nu^3} - 1 \right).$$

Für die Entropie einer thermischen Strahlung mit Energie E und einer Frequenz im Intervall $[\nu, \nu + d\nu]$ im Volumen V ergibt das

$$S = -\frac{k_B E}{h\nu} \ln \left(\frac{E c^3}{8\pi h V \nu^3 d\nu} - 1 \right),$$

und weiter, wenn man das mit der Entropie einer Strahlung im Volumen V_0 vergleicht,

$$S - S_0 = k_B \frac{E}{h\nu} \ln \frac{V_0}{V}. \quad (2.22)$$

Andererseits gilt nach dem Boltzmannschen Prinzip für die Entropie

$$S = k_B \ln W;$$

W ist hier die Anzahl der mikroskopischen Zustände eines Systems, die zum selben makroskopischen Zustand des Systems führen. Ist V_0 ein Volumen mit irgendwelchen n beweglichen Teilchen, etwa Gasmolekülen oder Molekülen einer verdünnten Flüssigkeit, dann erhält man für die Konstellation, daß alle Teilchen zufällig in einem Teilvolumen V von V_0 sind,

$$W = \left(\frac{V_0}{V} \right)^n$$

und damit

$$S(V, T) - S(V_0, T) = k_B n \ln \frac{V_0}{V}. \quad (2.23)$$

Vergleicht man (2.23) mit (2.22), so drängt sich die Vorstellung des Auftretens der elektromagnetischen Strahlung in Form von Quanten geradezu auf. Die Strahlung im Volumen V besteht im oben betrachteten Fall aus n Photonen mit der Gesamtenergie $E = nh\nu$; jedes einzelne trägt die Energie $E_{\text{photon}} = h\nu$, womit diese zuerst bei Planck aufgetauchte Relation ihre Bestätigung findet³³.

Die Wirkung auf das zeitgenössische physikalische Weltbild blieb zunächst völlig aus. Die Mehrzahl der Physiker hielt verbissen an der Annahme der universellen Gültigkeit des Wellenbildes für Licht fest, man unternahm große, teilweise vorübergehend verbreitet akzeptierte, aber bei genauerer Betrachtung zunächst fruchtlose Anstrengungen, etwa den Photoeffekt im Rahmen der klassischen Elektrodynamik zu erklären und behandelte die Lichtquantenhypothese mit klarer, teilweise sogar spöttischer Ablehnung.

³³In einer weiteren Arbeit zum selben Thema bemerkt Einstein, daß Plancks Strahlungsformel entgegen seiner ursprünglichen Überzeugung keinen Gegensatz zu seiner Quantenhypothese bilde, sondern diese sogar in gewissem Sinne vorweggenommen habe [238] – natürlich mit dem Unterschied, daß die Photonen bei Planck einen Rechenrick ohne Anspruch auf physikalischen Gehalt, bei Einstein jedoch einen sehr realen Bestandteil der Wirklichkeit darstellen. Klar wird dabei erneut die untergeordnete Rolle, die der Photoeffekt bei alledem spielt. Von einem Entscheidungsexperiment kann überhaupt keine Rede sein.

2.3.2 Einsteins Fluktuationsformel

Das änderte sich auch nicht nach Einsteins nächstem bedeutendem Beitrag zum selben Thema, bei dem er sich 1909 mit Fluktuationen thermischer Strahlung beschäftigte [240], [241], [242]. Er betrachtete dabei (wie schon andere zuvor) einen mit thermischer Strahlung angefüllten Behälter mit Volumen V und verspiegelten Wänden. Die Frequenz der Strahlung soll im Intervall $[\nu, \nu + d\nu]$ liegen. Steht der Behälter in thermischem Kontakt mit einem zweiten, ebenfalls mit Strahlung gefüllten verspiegelten Behälter des Volumens V' , dann darf für die Mittelwerte der Energie der Strahlung nach einer gewissen Zeit näherungsweise $\bar{E}'/\bar{E} = V'/V$ angenommen werden. Zu einem beliebigen Zeitpunkt weichen die momentanen Werte der Energie in zufälliger Weise von den Mittelwerten ab; für V gelte etwa $E = \bar{E} + \varepsilon$. Gleichzeitig gelte für die Entropie $S = S_0 + \sigma$. Wir berechnen nun die Stärke der Fluktuationen oder genauer gesagt die mittleren quadratischen Abweichungen vom Energiemittelwert \bar{E} . Diese erhält man als Breite der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Mikrozustände, die das System im Volumen V annehmen kann, also gemäß dem Boltzmannschen Prinzip

$$S = k_B \ln W$$

aus der Entropie des Systems. Daraus folgt für die Anzahl der Mikrozustände eines Makrozustands mit Energie E

$$W = e^{S/k_B}$$

und für die Wahrscheinlichkeitsdichte der Verteilung der Mikrozustände entsprechend

$$\frac{dW}{dE} = C e^{S/k_B} \quad (2.24)$$

mit einer gewissen Konstante C . Nehmen wir an, daß zum Mittelwert \bar{E} das Maximum $S_0 + \sigma_0$ der Entropie gehört, so folgt

$$\left(\frac{d\sigma}{dE} \right)_{\bar{E}} = 0$$

und

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE^2} \right)_{\bar{E}} < 0.$$

Die Entwicklung der Entropie bis zur zweiten Ordnung in ε lautet dann

$$S = S_0 + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\sigma}{dE^2} \right)_{\bar{E}} \varepsilon^2,$$

und (2.24) wird zu

$$\frac{dW}{dE} = C' \exp \left[\frac{1}{2k_B} \left(\frac{d^2\sigma}{dE^2} \right)_{\bar{E}} \varepsilon^2 \right]$$

mit einer weiteren Konstanten C' . Das ist eine Gauß-Verteilung mit der Breite

$$\Delta E^2 = \overline{(E - \bar{E})^2} = \bar{\varepsilon}^2 = \left(\frac{1}{k_B} \left| \frac{d^2\sigma}{dE^2} \right|_{\bar{E}} \right)^{-1} \quad (2.25)$$

Für die Entropie gilt andererseits nach Clausius [160]

$$S = \int \frac{dQ}{T} + \text{konst.},$$

und für deren Änderung

$$dS = \frac{dQ}{T},$$

was für obige Konstellation die Gestalt

$$\frac{d\sigma}{dE} = \frac{1}{T}$$

annimmt. Löst man die Plancksche Strahlungsformel

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$

nach $1/T$ auf, so ergibt sich wegen $\rho = E/V d\nu$

$$\frac{d\sigma}{dE} = \frac{k_B T}{h\nu} \ln \left(\frac{8\pi h V \nu^3 d\nu}{E c^3} + 1 \right)$$

und weiter

$$\frac{d^2\sigma}{dE^2} = -\frac{8\pi k_B T V \nu^2 d\nu}{8\pi h V E \nu^3 d\nu + E^2 c^3}.$$

Setzt man das in (2.25) ein, erhält man für die Energiefluktuationen

$$\Delta E^2 = h\nu E + \frac{c^3}{8\pi V \nu^2 d\nu} E^2. \quad (2.26)$$

Das ist Einsteins *Fluktuationsformel*³⁴.

Max von Laue fand 1915 eine alternative Herleitung der Fluktuationsformel, die auf eine übersichtlichere Form derselben führt [541]. Ausgehend von der Relation

$$\overline{n^2} = \bar{n} + 2\bar{n}^2$$

erhält man bei diesem Zugang

$$\Delta n^2 = \overline{n^2} - \bar{n}^2 = \bar{n} + \bar{n}^2$$

und damit weiter

$$\Delta E_\nu^2 = N_\nu (h\nu)^2 \Delta n^2 = N_\nu (h\nu)^2 (\bar{n} + \bar{n}^2),$$

³⁴Eine detaillierte Diskussion dieser Formel samt alternativer und verallgemeinernder Herleitungen aus historischer und moderner Sicht sowie der zugehörigen Interpretationen findet der Leser bei [892].

wobei $N_\nu = 8\pi V \nu^2 d\nu / c^3$ die Anzahl der Eigenschwingungen im Volumen V mit Frequenzen aus dem Frequenzintervall $[\nu, \nu + d\nu]$ ist³⁵. Identifiziert man $\bar{E}_\nu = N_\nu h\nu \bar{n}$ mit der mittleren Energie aller Oszillatoren der Frequenz ν , so gelangt man zur Relation

$$\Delta E_\nu^2 = h\nu \bar{E}_\nu + \bar{E}_\nu^2 / N_\nu$$

und damit zur Fluktuationsformel (2.26). Da die Energie hier stets auf das Volumen V bezogen wird, kann man dieses Resultat in modernerer Sprechweise als Relation zwischen der Varianz und dem Erwartungswert der spektralen Energiedichte $\rho(\omega, T)$ des elektromagnetischen Feldes auffassen und sie auch in der Form

$$\text{Var}(\rho) = \hbar\omega E(\rho) + E^2(\rho) / N_\omega \quad (2.27)$$

schreiben.

Die Interpretation von (2.26) beziehungsweise (2.27), die Einstein im Anschluß an seine Herleitung liefert, ist natürlich in erster Linie zur Untermauerung seiner Lichtquantenhypothese gedacht. Dazu leitet er die beiden Summanden jeweils getrennt als Grenzfälle sehr kleiner beziehungsweise sehr großer Frequenzen her. Der erste Summand in (2.26), der allein auftauchen würde, wenn man in Einsteins Herleitung vom Wienschen Strahlungsgesetz anstelle desjenigen von Planck ausgegangen wäre, kann auch aus der Annahme einer Poissonverteilung der Anzahl der Photonen im betrachteten Hohlraum gewonnen und folglich den zufälligen Fluktuationen der Photonenzahl, also den Dichteschwankungen und damit den Energiefluktuationen des Photonengases im Hohlraum zugeordnet werden. Der zweite tritt bei Verwendung des Jeansschen anstatt des Planckschen Strahlungsgesetzes allein auf und läßt sich im Sinne zufälliger Interferenzen sich gegenseitig durchdringender Wellenzüge des elektromagnetischen Feldes im Hohlraum deuten. Danach ist der erste Term derjenige Beitrag der Fluktuationen des Strahlungsfeldes, der von teilchenähnlichem Verhalten, und der zweite derjenige, der von wellenähnlichem Verhalten kommt. Insbesondere steht hier zum ersten Mal ganz offensichtlich die Vorstellungen von Photonen als Teilchen im Sinne von Partikeln im Vordergrund. Einstein geht dabei jedoch noch einen erheblichen Schritt weiter, indem er die rechte Seite von (2.27) als Summe zweier Varianzen auffaßt. Unter Verwendung der Relation

$$\text{Var}(A + B) = \text{Var}(A) + \text{Var}(B) \quad (2.28)$$

für zwei unkorrelierte Zufallsgrößen A und B faßt er seine Fluktuationsformel zwar nicht formal explizit, aber verbal unmißverständlich im Sinne von

$$\text{Var}(\rho) = \text{Var}(\rho_p) + \text{Var}(\rho_w)$$

auf und postuliert somit, daß die Energiedichte des elektromagnetischen Feldes additiv aus zwei voneinander unabhängigen Anteilen zusammengesetzt ist, einem Teilchenanteil ρ_p und einem Wellenanteil ρ_w . Folglich kommt Einstein zum Schluß, daß sich thermische Strahlung

³⁵Man beachte wieder den Faktor 2 wegen der beiden Polarisationsrichtungen es Lichts.

aus Teilchen und aus Wellen zusammensetzt und diese beiden Bestandteile völlig unabhängig voneinander sind.

Diese Auffassung rief sogleich Widerspruch hervor, beispielsweise bei Planck [701] und insbesondere Ehrenfest [228], später auch bei Wien [930], von Laue [541] und anderen. Nur Lorentz zeigte sich nach anfänglichen Zweifeln [555] etwas später zustimmend [557]³⁶. Im Zuge weiterer Entwicklungen der noch jungen Quantenmechanik³⁷ geriet diese spezielle Diskussion seit den späten Zwanzigerjahren in Vergessenheit; daß die Skeptiker Recht hatten, konnte Alexander Bach Jahrzehnte später in formal rigoroser Weise zeigen. Grundlage seines Beweises ist die Übertragung der in den Originalarbeiten physikalisch-robust eingeführten Begriffe auf mathematisch streng definierte Größen [34]. Um das ganze nachzuvollziehen, betrachten wir einen geeigneten Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, \mathcal{S}, P) , wobei Ω die Wertemenge der als Zufallsvariable aufgefaßten Energiedichte ρ ist, $\mathcal{S} \subset \mathcal{P}(\Omega)$ eine σ -Algebra über Ω und $P: \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ das verwendete Wahrscheinlichkeitsmaß auf \mathcal{S} . Außerdem seien ρ_w und ρ_p die aus ρ im Wienschen Grenzfall $\beta\hbar \gg 1/\omega$ beziehungsweise im Rayleigh-Jeansschen Grenzfall $\beta\hbar \ll \omega$ hervorgehenden Zufallsvariablen und P_w beziehungsweise P_p die zugehörigen Wahrscheinlichkeitsmaße auf \mathcal{S} . Die jeweiligen Erwartungswerte und Varianzen seien entsprechend E, E_w und E_p beziehungsweise Var, Var_w und Var_p . In dieser formalen Sprache lautet die Fluktuationsformel wie bereits gesehen

$$\text{Var}(\rho) = \hbar\omega E(\rho) + E^2(\rho)/N_\omega$$

und Einsteins Interpretation derselben folgendermaßen: Es gibt auf der rechten Seite der Fluktuationsformel einen Term $\text{Var}(\rho_p) = E^2(\rho_p)/N_\omega$, der auf Teilchenverhalten, also auf Photonen, und einen Term $\text{Var}(\rho_w) = \hbar\omega E(\rho_w)$, der auf Wellenverhalten, also auf Interferenzeffekte des elektromagnetischen Feldes zurückzuführen ist, dabei sind ρ_p und ρ_w statistisch unabhängig und es gilt $\rho = \rho_p + \rho_w$. Akzeptiert man das so und setzt es in die Fluktuationsformel ein, erhält man einerseits unter Berücksichtigung der Additivität der Varianz von statistisch unabhängigen Zufallsvariablen

$$\text{Var}(\rho) = \text{Var}(\rho_p + \rho_w) = \text{Var}(\rho_p) + \text{Var}(\rho_w) = \hbar\omega E(\rho_p) + E^2(\rho_w)/N_\omega \quad (2.29)$$

und andererseits aufgrund desselben Verhaltens des Erwartungswerts

$$\begin{aligned} \hbar\omega E(\rho_p + \rho_w) + E^2(\rho_p + \rho_w)/N_\omega &= \hbar\omega E(\rho_p) + \hbar\omega E(\rho_w) \\ &+ [E^2(\rho_p) + E^2(\rho_w) + 2E(\rho_p)E(\rho_w)]/N_\omega. \end{aligned}$$

Damit heben sich je zwei Terme heraus, und aus der Fluktuationsformel wird die Relation

$$N_\omega \hbar\omega E(\rho_w) + E^2(\rho_p) + 2E(\rho_p)E(\rho_w) = 0.$$

³⁶Die Tatsache, daß Lorentz hier den zweiten Term der Fluktuationsformel mit Hilfe der klassischen Elektrodynamik und des zentralen Grenzwertsatzes herleitete, belegt allerdings nur, daß die Annahme der Herkunft dieses Terms aus der Interferenz elektromagnetischer Wellen gerechtfertigt ist, nicht aber die Stichhaltigkeit der statistischen Unabhängigkeit des Teilchen- und des Wellenanteils.

³⁷Siehe weiter unten.

Offensichtlich gilt $\rho_w, \rho_p \geq 0$, sodaß diese Gleichung nur erfüllbar ist, wenn

$$E(\rho_p) = E(\rho_w) = 0$$

gilt, woraus wiederum

$$\text{Var}(\rho_p) = \text{Var}(\rho_w) = 0$$

folgt. Das führt auf die unsinnige Aussage, daß die Zufallsvariablen ρ_p und ρ_w bezüglich dem Wahrscheinlichkeitsmaß P fast sicher verschwinden. Einsteins Interpretation der Fluktuationsformel führt somit zu einem Widerspruch. Dieser Widerspruch verschwindet, wenn man die beiden Terme der Fluktuationsformel korrekt in der Form $\text{Var}(\rho_p) = E_p^2(\rho_p)/N_w$ beziehungsweise $\text{Var}(\rho_w) = \hbar\omega E_w(\rho_w)$ schreibt und damit deren fehlerhafte Version (2.29) durch die richtige Fassung

$$\text{Var}(\rho) = \text{Var}_p(\rho_p) + \text{Var}_w(\rho_w)$$

ersetzt – womit man gleichzeitig die Voraussetzung statistisch unabhängiger Größen ρ_p und ρ_w und der daraus folgenden Additivität der Varianz aufgibt. Formale Ursache der Fehlinterpretation ist das unzulässige Weglassen der Indizes auf der rechten Seite, wie es in der physikalischen Literatur häufig geschieht. Bach war der erste, der diese Ungenauigkeit mit allen ihren Konsequenzen detailliert beschrieb [29] - [34], sieht man von einem beiläufigen Hinweis durch Pais einige Jahre früher ab [661].

Trotz ihrer Fehlerhaftigkeit im Detail ist Einsteins Interpretation seiner Fluktuationsformel von überragender wissenschaftshistorischer Bedeutung, denn die Idee einer gleichzeitigen, sich klassisch widersprechenden teilchen- und wellenähnlichen Natur quantenmechanischer Systeme stellt gleichzeitig den Ursprung des Konzepts des *Welle-Teilchen-Dualismus* dar, das später so wichtig werden sollte, daß man es inzwischen ohne weiteres als einen der Grundpfeiler der Quantenmechanik betrachten darf. Der Weg zu dessen korrekter Form war jedoch verwinkelt und führte zunächst in eine Sackgasse; erst in den neunziger Jahren sollte man aus dieser wieder restlos herausfinden.

Interessanterweise ist das Abdriften in diese Sackgasse eng mit der Tatsache verbunden, daß die Fluktuationsformel auch *quantenmechanisch herleitbar ist*. Pascual Jordan demonstrierte das in einer gemeinsam mit Born und Heisenberg verfaßten berühmten Arbeit von 1926 [113]³⁸. Schon aus historischem Interesse ist es mehr als angebracht, diese Herleitung im Detail nachzuvollziehen. Wir folgen hier Jordans Originalrechnung mit nur ganz wenigen Zugeständnissen an moderne formale Gepflogenheiten.

Jordan betrachtet der Einfachheit halber ein eindimensionales Analogon zum eigentlich interessierenden dreidimensionalen Fall eines elektromagnetischen Feldes in einem Kasten, genauer gesagt eine an beiden Seiten fest eingespannte schwingende Saite der Länge l , und berechnet für diese das Schwankungsquadrat ΔE^2 zunächst aus klassischer Sicht. Die seitliche

³⁸Dieser Aufsatz ist unter der Bezeichnung „Dreimännerarbeit“ auch weit über den deutschen Sprachgebrauch hinaus bekannt geworden.

Auslenkung der Saite sei durch die Funktion $u(x, t)$ beschrieben; setzt man deren Fourier-Entwicklung

$$u(x, t) = \sum_{k=1}^{\infty} q_k(t) \sin k \frac{\pi}{l} x,$$

$$q_k(t) = \frac{2}{l} \int_0^l u(x, t) \sin k \frac{\pi}{l} x \, dx$$

in die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{1}{2} \int_0^l \left[\dot{u}^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right] dx$$

ein, erhält man

$$H = \frac{1}{2} \int_0^l \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\dot{q}_j \dot{q}_k \sin j \frac{\pi}{l} x \sin k \frac{\pi}{l} x + q_j q_k \left(\frac{\pi}{l} \right)^2 \cos j \frac{\pi}{l} x \cos k \frac{\pi}{l} x \right] dx$$

und wegen

$$\frac{2}{l} \int_0^l \sin j \frac{\pi}{l} x \sin k \frac{\pi}{l} x \, dx = \delta_{jk} \quad (2.30)$$

weiter

$$H = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ [\dot{q}_k(t)]^2 + \left[k \frac{\pi}{l} q_k(t) \right]^2 \right\}.$$

Das ist eine unendliche Summe ungekoppelter harmonischer Oszillatoren der Frequenzen $\omega_k = k\pi/l$ und der jeweiligen Masse $l/2$, was nicht nur die Analogie zur thermischen Strahlung illustriert, sondern auch zeigt, daß nicht nur die gesamte Summe, sondern auch jeder einzelne Summand zeitlich konstant ist. Als nächstes berechnet Jordan die mittlere quadratische Schwankung der Energie in einem kleinen Abschnitt $(0, a)$ der Saite. Da (2.30) auf diesem Intervall nicht gilt, erhält man für die Energie auf diesem Abschnitt

$$E = \frac{1}{2} \int_0^a \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\dot{q}_j \dot{q}_k \sin j \frac{\pi}{l} x \sin k \frac{\pi}{l} x + q_j q_k \left(\frac{\pi}{l} \right)^2 \cos j \frac{\pi}{l} x \cos k \frac{\pi}{l} x \right] dx.$$

Betrachten wir die Diagonal- und die Außerdiagonalterme dieses Ausdrucks getrennt, finden wir für $j = k$

$$E(j = k) = \frac{a}{4} \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ [\dot{q}_k(t)]^2 + \left[k \frac{\pi}{l} q_k(t) \right]^2 \right\} = \frac{a}{l} H,$$

während wir für $j \neq k$

$$E(j \neq k) = \frac{1}{2} \int_0^l \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^{\infty} \left[\dot{q}_j \dot{q}_k \sin j \frac{\pi}{l} x \sin k \frac{\pi}{l} x + q_j q_k \left(\frac{\pi}{l} \right)^2 \cos j \frac{\pi}{l} x \cos k \frac{\pi}{l} x \right] dx.$$

erhalten. Für die jeweiligen zeitlichen Mittelwerte gilt einerseits

$$\overline{E(j = k)} = E(j = k),$$

weil sämtliche Summenden von $E(j = k)$ konstant sind, und andererseits

$$\overline{E(j \neq k)} = 0$$

wegen $\overline{\dot{q}_j \dot{q}_k} = \overline{q_j q_k} = 0$ für alle $j \neq k$, und folglich insgesamt

$$\bar{E} = E(j = k).$$

Für die Abweichung der Energie von ihrem Mittelwert auf dem Intervall $(0, a)$ gilt daher

$$\Delta E = E - \bar{E} = E(j \neq k) = \frac{1}{4} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^{\infty} \left[\dot{q}_j \dot{q}_k K_{jk} + j k q_j q_k \left(\frac{\pi}{l} \right)^2 K'_{jk} \right],$$

mit

$$K_{jk} = \frac{\sin [(j - k) \pi l / a]}{(j - k) \pi l / a} - \frac{\sin [(j + k) \pi l / a]}{(j + k) \pi l / a},$$

$$K'_{jk} = \frac{\sin [(j - k) \pi l / a]}{(j - k) \pi l / a} + \frac{\sin [(j + k) \pi l / a]}{(j + k) \pi l / a}.$$

Daraus folgt weiter

$$\Delta E^2 = \frac{1}{16} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^{\infty} \sum_{\substack{j',k'=1 \\ j' \neq k'}}^{\infty} \left[\dot{q}_j \dot{q}_k \dot{q}_{j'} \dot{q}_{k'} K_{jk} K_{j'k'} + j k j' k' q_j q_k q_{j'} q_{k'} \left(\frac{\pi}{l} \right)^4 K'_{jk} K'_{j'k'} \right. \\ \left. + \left(\frac{\pi}{l} \right)^2 (j k q_j q_k \dot{q}_{j'} \dot{q}_{k'} K'_{jk} K'_{j'k'} + j' k' \dot{q}_j \dot{q}_k q_{j'} q_{k'} K_{jk} K_{j'k'}) \right].$$

Geht man zum zeitlichen Mittelwert über, verschwinden die Außerdiagonalelemente wegen $\overline{q_j q_k \dot{q}_{j'} \dot{q}_{k'}} = \overline{\dot{q}_j \dot{q}_k q_{j'} q_{k'}} = 0$ wieder, und es bleibt

$$\overline{\Delta E^2} = \frac{1}{8} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\overline{\dot{q}_j^2 \dot{q}_k^2} K_{jk}^2 + j^2 k^2 \overline{q_j^2 q_k^2} \left(\frac{\pi}{l} \right)^4 K'_{jk}{}^2 \right].$$

Für große Saitenlängen l sind die einzelnen Eigenfrequenzen $\omega_k = k\pi/l$ sehr nahe beieinander und können näherungsweise als kontinuierlich betrachtet werden, sodaß man die Doppelsumme durch ein Doppelintegral ersetzen und für das Schwankungsquadrat

$$\overline{\Delta E^2} = \frac{1}{8} \int_0^\infty \int_0^\infty \left(\frac{l}{\pi}\right)^2 \left[\overline{\dot{q}_j^2} \overline{\dot{q}_k^2} K_{jk}^2 + j^2 k^2 \overline{q_j^2} \overline{q_k^2} \left(\frac{\pi}{l}\right)^4 K_{jk}^{\prime 2} \right] d\omega_j d\omega_k$$

schreiben kann. Ist auch die Intervalllänge a sehr groß, kann man von der Darstellung

$$\delta(\omega - \omega') = \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{1}{a\pi} \int_{-\alpha}^{\alpha'} \frac{\sin^2[(\omega - \omega') a]}{(\omega - \omega')^2} d\omega \quad \text{für } \alpha, \alpha' > 0$$

für die Delta-Funktion und damit von der Relation

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \frac{1}{a\pi} \int_{-\alpha}^{\alpha'} \frac{\sin^2[(\omega - \omega') a]}{(\omega - \omega')^2} f(\omega) d\omega = f(\omega')$$

Gebrauch machen und erhält mit $q_k \equiv q_\omega$ für $\omega = k\pi/l$

$$\overline{\Delta E^2} = \frac{al}{8\pi} \int_0^\infty \left[(\overline{\dot{q}_\omega^2})^2 + (\omega^2 \overline{q_\omega^2})^2 \right] d\omega.$$

Um nun das Schwankungsquadrat der spektralen Energiedichte, also diejenige im Frequenzintervall $[\nu, \nu + d\nu]$ zu erhalten, greift man aus dem Integral diejenigen Anteile heraus, die dem genannten Bereich liegen und dividiert diese durch $d\nu = d\omega/2\pi$. Verwendet man den Virialsatz, folgt zusätzlich $\overline{\dot{q}_\omega^2} = \omega^2 \overline{q_\omega^2} = \bar{E}/2$, mit der mittleren thermischen Energie \bar{E} . Das führt auf

$$\overline{\Delta E^2}_\nu = \frac{\bar{E}^2}{2 a d\nu}$$

und damit genau auf denjenigen Anteil der Fluktuationsformel, der vom Rayleigh-Jeans-Gesetz folgt und aus der klassischen Elektrodynamik erklärbar ist³⁹.

Wechselt man zur Quantenmechanik, so werden alle Größen mit Ausnahme des Ortes x auf der Saite zu linearen Operatoren, beziehungsweise im von Jordan verwendeten Formalismus zu unendlichen Matrizen⁴⁰. Dabei erhält man Mittelwerte von Matrizen durch Nullsetzen aller Matrixelemente mit Ausnahme derjenigen auf der Diagonalen⁴¹. Das Schwankungsquadrat lautet nun

³⁹Dieses Resultat konnte Lorentz schon 1912 herleiten, siehe [557].

⁴⁰Auf die Matrizenmechanik kommen wir im Detail in Abschnitt 3.3 zurück.

⁴¹Das entspricht in der modernen Formulierung dem Erwartungswert eines Operators und damit der Formel $\langle \hat{A} \rangle = (\psi, \hat{A} \psi)$.

$$\Delta E^2 = \frac{1}{16} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^{\infty} \sum_{\substack{j',k'=1 \\ j' \neq k'}}^{\infty} \left[\dot{\mathbf{q}}_j \dot{\mathbf{q}}_k \dot{\mathbf{q}}_{j'} \dot{\mathbf{q}}_{k'} K_{jk} K_{j'k'} + j k j' k' \mathbf{q}_j \mathbf{q}_k \mathbf{q}_{j'} \mathbf{q}_{k'} \left(\frac{\pi}{l}\right)^4 K'_{jk} K'_{j'k'} \right. \\ \left. + \left(\frac{\pi}{l}\right)^2 (j k \mathbf{q}_j \mathbf{q}_k \dot{\mathbf{q}}_{j'} \dot{\mathbf{q}}_{k'} K'_{jk} K'_{j'k'} + j' k' \dot{\mathbf{q}}_j \dot{\mathbf{q}}_k \mathbf{q}_{j'} \mathbf{q}_{k'} K_{jk} K_{j'k'}) \right].$$

Beim Übergang zum zeitlichen Mittelwert liefern die Diagonalelemente formal dasselbe Resultat wie im klassischen Fall, also

$$\overline{\Delta E^2}_{\nu,j=k} = \frac{\bar{E}^{*2}}{2 a d\nu};$$

allerdings ist hier \bar{E}^* die Summe der Nullpunktenergie und der mittleren thermischen Energie, sodaß jetzt

$$\overline{\Delta E^2}_{\nu,j=k} = \frac{(\hbar\nu a d\nu + \bar{E})^2}{2 a d\nu} = \frac{\hbar^2 \nu^2 a}{2 d\nu} + \hbar\nu \bar{E} + \frac{\bar{E}^2}{2 a d\nu} \quad (2.31)$$

gilt. Die Nichtdiagonalelemente verschwinden nun nicht mehr, sondern liefern den Beitrag

$$\overline{\Delta E^2}_{j \neq k} = \frac{a l^2}{8\pi} \int_0^{\infty} \left(\overline{\dot{\mathbf{q}}_{\omega} \dot{\mathbf{q}}_{\omega}^2} + \overline{\dot{\mathbf{q}}_{\omega} \mathbf{q}_{\omega}^2} \right) \omega^2 d\omega. \quad (2.32)$$

Die Matrizen \mathbf{q}_k und $\dot{\mathbf{q}}_k$ erfüllen weiterhin die klassischen Bewegungsgleichungen⁴², in diesem Fall also

$$\ddot{\mathbf{q}}_k = -\omega_k^2 \mathbf{q}_k.$$

Die allgemeine Lösung dieser Differentialgleichung läßt sich beispielsweise in der Form

$$\mathbf{q}_k(t) = \mathbf{q}_k(0) \cos(\omega_k t) + \frac{\dot{\mathbf{q}}_k(0)}{\omega_k} \sin(\omega_k t)$$

schreiben, oder mit $l \dot{\mathbf{q}}_k/2 \equiv \mathbf{p}_k$ auch

$$\mathbf{q}_k(t) = \mathbf{q}_k(0) \cos(\omega_k t) + \frac{2 \mathbf{p}_k(0)}{l \omega_k} \sin(\omega_k t).$$

Damit lassen sich die Mittelwerte in (2.32) direkt berechnen. Unter Verwendung von

$$\overline{\sin^2(\omega t)} = \overline{\cos^2(\omega t)} = \frac{1}{2}$$

und

$$\overline{\sin(\omega t) \cos(\omega t)} = 0$$

⁴²Siehe Abschnitt 3.3.

erhält man

$$\begin{aligned} & \overline{\mathbf{q}_k(t) \dot{\mathbf{q}}_k(t)} \\ &= \overline{\left[\mathbf{q}_k(0) \cos(\omega_k t) + \frac{2 \mathbf{p}_k(0)}{l \omega_k} \sin(\omega_k t) \right] \left[\frac{2 \mathbf{p}_k(0)}{l} \cos(\omega_k t) - \omega_k \mathbf{q}_k(0) \sin(\omega_k t) \right]} \\ &= \frac{1}{l} [\mathbf{q}_k(0) \mathbf{p}_k(0) - \mathbf{q}_k(0) \mathbf{p}_k(0)] = \frac{1}{l} [\mathbf{q}_k(0), \mathbf{p}_k(0)] \end{aligned}$$

und mit den kanonischen Vertauschungsrelationen weiter

$$\overline{\mathbf{q}_k(t) \dot{\mathbf{q}}_k(t)} = \frac{ih}{2\pi l}$$

sowie ganz analog

$$\overline{\dot{\mathbf{q}}_k(t) \mathbf{q}_k(t)} = -\frac{ih}{2\pi l}.$$

Einsetzen in (2.32) und Übergang zur spektralen Energiedichte liefern folglich

$$\overline{\Delta \mathbf{E}^2}_{j \neq k} = -\frac{h^2 \nu^2 a}{2 d \nu}. \quad (2.33)$$

Durch Zusammenbau von (2.31) und (2.33) erhält man dann

$$\overline{\Delta \mathbf{E}^2}_\nu = h\nu \bar{E} + \frac{\bar{E}^2}{2 a d \nu} \quad (2.34)$$

und damit ein Resultat, das genau die Form der Fluktuationsformel hat. (2.34) gilt in großer Allgemeinheit; die einzige Einschränkung ist die für den Übergang von Summen zu Integralen notwendige Forderung der stetigen Abhängigkeit der auftretenden Größen von der Frequenz ν . Außerdem ist die quantenmechanische Fluktuationsformel in keiner Weise auf Gleichgewichtszustände beschränkt. Besondere Bedeutung erhält sie jedoch durch die Eigenschaft, die erste Quantisierung eines kontinuierlichen Systems darzustellen. In diesem Sinn handelt es sich hierbei um den Anfang der Quantenfeldtheorie.

Die quantenmechanische Fluktuationsformel hat zwar die Form des Originals, ist aber genau genommen nicht mit diesem identisch. Denn (2.34) ist eine *quantenmechanische Unschärfe*, also die Varianz eines quantenmechanischen Operators, wogegen (2.26) das *Schwankungsquadrat thermodynamischer Fluktuationen* beschreibt. Eine solche Aussage ist aus (2.34) nur zu gewinnen, wenn man auf beiden Seiten den thermischen Mittelwert bildet. Duncan und Janssen konnten jedoch 2007 zeigen, daß sich dadurch eine Formel von exakt derselben Form wie (2.34) und damit genau die Einsteinsche Fluktuationsformel (2.26) ergibt [222]⁴³. Damit ist die Möglichkeit ihrer quantenmechanischen Herleitung auch unter formal wie physikalisch strengen Anforderungen gesichert – wobei die Möglichkeit keineswegs die Notwendigkeit

⁴³In dieser Arbeit wird außerdem das oben beschriebene Resultat von Jordan in quantenmechanisch moderner Form abgeleitet.

einer solchen Herleitung einschließt, auch wenn Jordans Rechnung essentiell auf der Nichtvertauschbarkeit quantenmechanischer Größen aufbaut. Bach zeigte 1989, daß die Einsteinsche Fluktuationsformel prinzipiell auch mit Mitteln der klassischen Wahrscheinlichkeitstheorie herleitbar sein muß [34], was einschlägige Herleitungen, wie sie von Laue [541], Planck [709] und Ehrenfest [229] jeweils vor der Entdeckung der Matrizenmechanik vorlegten, nachträglich rechtfertigt⁴⁴.

Dennoch setzte sich ab 1925 die fehlerhafte Auffassung durch, die Fluktuationsformel sei auf korrektem Weg nur im Rahmen der neuen Quantentheorie zu bekommen, was natürlich die Rezeption der Lichtquantenhypothese und des noch unfertigen, bis dahin nur in der oben beschriebenen Einsteinschen Fassung vorliegenden Welle-Teilchen-Dualismus heftig beeinflusste. Erstere hatte sich gerade erst etabliert, wie wir gleich noch sehen werden, letzterer dagegen war weiterhin auf verbreitete Ablehnung gestoßen. Die neue Quantentheorie änderte das insofern drastisch, als sie weit über beide Auffassungen hinausging und sowohl die Teilchen- als auch die Wellenvorstellung gewissermaßen auflöste. Welle-Teilchen-Dualismus bedeutete in diesem Sinn, die klassischen Begriffe von Welle und Teilchen praktisch aufzugeben, sie zumindest aber als völlig austauschbar und damit ohne tatsächliche Entsprechung in der Realität zu betrachten. Die Hohlraumstrahlung wäre danach ganz nach Belieben als ein System von Wellen oder ein System von Teilchen oder auch als ein System von Wellen und Teilchen auffaßbar [34], ohne daß man der (völlig abstrakten) Realität mit irgendeinem dieser drei Bilder wirklich nahegekommen wäre. Diese Version des Welle-Teilchen-Dualismus war neben der Wahrscheinlichkeitsdeutung, die uns ebenfalls noch beschäftigen wird, der zweite Aspekt der Quantentheorie, den Einstein nie akzeptierte, zu Recht, wie wir heute wissen. Der Nebel verzog sich jedoch erst zu Beginn der neunziger Jahre, dann allerdings mit spektakulären neuen Entwicklungen. Die Entdeckung der aktuellen Form des Welle-Teilchen-Dualismus ist insbesondere Englert, Walter und Scully zuzuschreiben, die nicht nur die Unabhängigkeit desselben von der Heisenbergschen Unschärferelation nachweisen konnten, sondern ersteren als eigenständiges quantenmechanisches Grundprinzip etablierten [262], [264], [805]. Dieses besagt, daß bei Interferenzexperimenten mit einzelnen Quantenobjekten deren Fähigkeit zum Ausbilden von Interferenzmustern umso geringer ist, je besser ihre klassisch möglichen Wege im verwendeten Interferometer voneinander unterscheidbar sind⁴⁵. Englert gelang es wenig später, diesen Sachverhalt zu formalisieren, indem er eine quantitative Dualitätsrelation herleitete [260], [261]. Bei geeigneter Definition der Unterscheidbarkeit \mathcal{D} der Wege des Interferometers und der Sichtbarkeit \mathcal{V} der Interferenzmuster lautet diese Relation

$$\mathcal{D}^2 + \mathcal{V}^2 \leq 1.$$

Diese Dualitätsrelation wurde inzwischen mehrfach experimentell bestätigt⁴⁶.

⁴⁴Bach führte dazu das Konzept der klassischen ununterscheidbaren Teilchen ein, womit ein vermeintlich rein quantenmechanischer Sachverhalt in den klassischen Bereich übertragbar wird [31], [33].

⁴⁵Eine frühe, allerdings nicht weiter ausgearbeitete Andeutung dieser Idee findet man bei Wolfgang Büchel [136].

⁴⁶Einen aktuellen Überblick des Konzepts des Welle-Teilchen-Dualismus in seiner modernen Formulierung mit umfangreichen Literaturangaben findet man in [897].

Die wirkliche Bedeutung der quantenmechanischen Herleitung der Fluktuationsformel liegt in ihrer Eigenschaft, die erste rudimentär quantenfeldtheoretische Beschreibung eines kontinuierlichen Systems darzustellen. Ungeachtet der Tatsache, daß ihre Herleitung auch nicht-quantenmechanisch möglich ist, findet sich hier die korrekte Interpretation der Fluktuationsformel. Der erste Term in der Fluktuationsformel, der teilchenähnliche Fluktuationen beschreibt, läßt sich danach auf Anzahlfluktuationen individueller, unkorrelierter Teilchen zurückführen; seine Ursache liegt in der Nullpunktsenergie des quantisierten elektromagnetischen Feldes. Der zweite Term, der wellenähnlichen Fluktuationen zuzuordnen ist, berücksichtigt typische quantenmechanische Korrelationen des Photonenfeldes, die auf Interferenzeffekte zurückzuführen sind. Damit wird außerdem der grundlegenden Bedeutung der relativistischen Quantenfeldtheorie Rechnung getragen, die ihr in ihrer Eigenschaft als Vereinigung der Quantenmechanik und der speziellen Relativitätstheorie zukommt.

2.3.3 Photoeffekt und Quantentheorie

Konnte schon Einsteins Fluktuationsformel nicht zu einer früheren Etablierung der Lichtquantenhypothese beitragen, so wurde letztere erst recht weiterhin nicht ernst genommen, als verschiedentlich quantitative Deutungen des Photoeffekts veröffentlicht wurden, die allein vom Wellenbild elektromagnetischer Felder Gebrauch machten. Zwar war zunächst mit der Theorie von Richardson [733], [734] nur eine Version dabei, die sich dauerhaft als korrekt erwies, damit blieb aber die jeweils baldige Wiederlegung der übrigen Vorschläge wirkungslos.

1926 und 1927 zeigten wie erwähnt Wentzel und Beck erneut, daß man zur Deutung des Photoeffekts sehr gut auch ohne Photonen auskommen kann. Sie betrachteten dabei die beteiligten Elektronen zwar als quantenmechanische Objekte, das mit ihnen wechselwirkende Licht jedoch als kontinuierliche elektromagnetische Wellen und gelangten so ebenfalls zum Resultat (2.21). Beide verwendeten zur quantenmechanischen Beschreibung des Elektrons Resultate aus Schrödingers vierter Mitteilung [789] seiner Artikelserie zur Wellenmechanik; Wentzel betrachtete klassische Lichtwellen als Störung von Atomen [920], [922], Beck benutzte Schrödingers relativistische Wellengleichung mit angekoppeltem klassischen elektromagnetischen Feld [45]. Im übrigen kann man mit Hilfe der zeitabhängigen Störungstheorie die Herleitung der Gleichung (2.21) noch sehr viel direkter bewerkstelligen, wovon wir uns im folgenden überzeugen werden.

Wir betrachten ein quantenmechanisches System mit Hamiltonoperator \hat{H}_0 , das in Wechselwirkung mit einem *klassischen elektromagnetischen Feld* mit der Frequenz ω und der Amplitude V tritt; letzteres ist durch einen Störungs-Hamiltonoperator der Form

$$\hat{H}'(t) = V e^{-i\omega t} + V^* e^{i\omega t} \quad (2.35)$$

beschreibbar. Wir interessieren uns für die Übergangsrate der durch $\hat{H}'(t)$ induzierten Übergänge vom Anfangszustand ψ_i in den dadurch entstehenden Endzustand ψ_f des betrachteten Systems; beide Zustände seien Eigenzustände des ungestörten Hamiltonoperators \hat{H}_0 , es gelte also etwa

$$\hat{H}_0 \psi_i = E_i \psi_i, \quad \hat{H}_0 \psi_f = E_f \psi_f.$$

Die zeitabhängige Störungstheorie liefert für die Wahrscheinlichkeit eines Übergangs in erster Ordnung

$$\mathcal{P}_{i \rightarrow f}(t) = |(\psi_f, \widehat{U}'^{(1)}(\infty, -\infty) \psi_i)|^2, \quad (2.36)$$

dabei ist $\widehat{U}'^{(1)}$ der Term erster Ordnung in der zeitgeordneten Dyson-Reihe

$$\begin{aligned} \widehat{U}'(t, t_0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \widehat{U}'^{(n)}(t, t_0) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t \cdots \int_{t_0}^t T[\widehat{H}'(t'), \widehat{H}'(t''), \dots, \widehat{H}'(t^{(n)})] dt' dt'' \cdots dt^{(n)}. \end{aligned}$$

des Zeitentwicklungsoperators im Wechselwirkungsbild bezüglich $\widehat{H}'(t)$. Die gesuchte Übergangsrate erhält man durch Division der Übergangswahrscheinlichkeit durch die Zeit. Mit (2.35) findet man

$$\begin{aligned} (\psi_f, \widehat{U}'^{(1)}(\infty, -\infty) \psi_i) &= \frac{1}{i\hbar} \left\{ (\psi_f, V \psi_i) \int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(E_f - E_i - \hbar\omega)t/\hbar] dt \right. \\ &\quad \left. + (\psi_f, V^* \psi_i) \int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(E_f - E_i + \hbar\omega)t/\hbar] dt \right\} \\ &= \frac{2\pi}{i} [(\psi_f, V \psi_i) \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \\ &\quad + (\psi_f, V^* \psi_i) \delta(E_f - E_i + \hbar\omega)]. \end{aligned}$$

Der erste Summand liefert einen Delta-Peak für $E_f - E_i = \hbar\omega$ und beschreibt die Absorption eines Photons der Energie $\hbar\omega$, der zweite liefert einen Delta-Peak für $E_i - E_f = \hbar\omega$ und steht für die Emission eines solchen Photons; hier interessiert uns folglich nur der erste der beiden. Einsetzen in (2.36) liefert

$$\mathcal{P}_{i \rightarrow f}(t) = 4\pi^2 |(\psi_f, V \psi_i)|^2 \delta^2(E_f - E_i - \hbar\omega),$$

das heißt, wir benötigen das Quadrat der Delta-Funktion. Dieses können wir uns mit einem Trick beschaffen; wir schreiben dazu

$$\begin{aligned} \delta^2(E_f - E_i - \hbar\omega) &= \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(E_f - E_i - \hbar\omega)t/\hbar] dt \\ &= \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \frac{1}{2\pi\hbar} [t]_{-\infty}^{+\infty} = \infty \end{aligned}$$

und erhalten zunächst einen divergenten Ausdruck. Division der unendlichen Übergangswahrscheinlichkeit durch unendliches t liefert daraus jedoch eine definierte Übergangsrate

$$W_{i \rightarrow f} = \left[\frac{\mathcal{P}_{i \rightarrow f}(t)}{t} \right]_{-\infty}^{+\infty} = \frac{2\pi}{\hbar} |(\psi_f, V \psi_i)|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$$

für die Absorption eines Photons⁴⁷. Für die Energieeigenwerte folgt daraus

$$E_f = \hbar\omega + E_i.$$

Im speziellen Fall des Photoeffekts beschreibt ψ_i den Zustand eines in der Photokathode gebundenen Metallelektrons und ψ_f denjenigen eines freien Elektrons; entsprechend ist $-E_f = E_K$ die Austrittsenergie des Kathodenmaterials und $E_f = E_{\max}$ die maximale kinetische Energie der Photoelektronen. Wir erhalten folglich

$$E_{\max} = h\nu - E_K,$$

also genau Gleichung (2.21), und damit die typische Frequenzabhängigkeit der kinetischen Energie der freigesetzten Elektronen beim Photoeffekt⁴⁸. Dabei wurde ausschließlich von klassischen elektromagnetischen Wellen und damit an keiner Stelle von Photonen Gebrauch gemacht.

Wir stellen fest: Die nach wie vor weitverbreiteten Behauptungen, der Photoeffekt sei nur durch teilchenartiges Verhalten des Lichts zu erklären und folglich ein Beweis für die Existenz von Photonen, *treffen nicht zu*. Experimente, bei denen das Licht tatsächlich und unvermeidlich teilchenartig zu erklärendes Verhalten zeigt, gibt es sehr wohl, sie waren in den Pioniertagen der Quantenmechanik jedoch noch nicht durchführbar⁴⁹.

2.3.4 Der Compton-Effekt

Wirklich entscheidend für die allgemeine Akzeptanz der Lichtquantenhypothese war erst der Compton-Effekt, also die Streuung von Licht an freien oder schwach gebundenen Elektronen. Solche Phänomene wurden erstmals 1923 von A. H. Compton eingehend beschrieben [163], [164], [165]. Dabei stellt man einen Impulsübertrag von Licht auf Elektronen fest, und zwar nicht nur betrags- sondern auch richtungsmäßig. Dies äußert sich in einer Verschiebung der Wellenlänge λ des gestreuten Lichts; für diese gilt unabhängig vom Streumaterial

$$\lambda = \lambda_0 + \lambda_C (1 - \cos \theta), \quad (2.37)$$

⁴⁷Das geht natürlich auch in formal strenger Weise unter Verwendung von *Fermis goldener Regel*; siehe beispielsweise [519]. Obwohl nach Fermi benannt, wurde die goldene Regel im wesentlichen von Dirac entdeckt [200]; diese Arbeit stellt gleichzeitig einen der ersten Beiträge zur späteren Quantenfeldtheorie dar; vergleiche hierzu auch Abschnitt 2.3.2. Die Bezeichnung „goldene Regel“ indes stammt von Fermi selbst [282], weswegen sie später dessen Namen als Zusatz erhielt.

⁴⁸Man beachte aber Anmerkung 46 in Abschnitt 1.2.4.

⁴⁹Dazu gehören unter anderem die Tatsache, daß Atome bei der Emission von Licht einen Rückstoß erfahren, was nur mit der Vorstellung von Photonen erklärbar ist, und insbesondere die modernen quantenoptischen Experimente mit einzelnen Photonen. Siehe hierzu beispielsweise [119] und [328].

wobei $\lambda_C = h/m_e c = 0,024 \text{ \AA}$ die sogenannte Comptonwellenlänge und θ der Streuwinkel ist. Die Hypothese, das Licht bestehe aus Teilchen führt dabei auf eine zwanglose Erklärung in Form eines relativistischen Stoßprozesses zwischen Elektronen und Photonen. Allerdings läßt sich auch dieser Effekt ebenso mit einer reinen Wellenvorstellung des Lichts erklären, was Compton selbst bereits feststellte, als er (2.37) in ein und derselben Veröffentlichung sowohl mit Hilfe von Photonen als auch klassischen elektromagnetischen Wellen herleitete⁵⁰.

Ersteres ist so etwas wie physikalisches Allgemeingut, daher dürfte es interessanter sein, sich etwas genauer mit letzterem zu beschäftigen⁵¹. Dazu betrachten wir eine zirkular polarisierte elektromagnetische Welle⁵², die an einem zunächst im Laborsystem ruhenden Teilchen der Ruhemasse m gestreut wird. Die Welle bewege sich im Laborsystem in positive z -Richtung, was durch die Feldstärken

$$\begin{aligned}\vec{E}(z, t) &= \hat{E} \{ \vec{e}_x \cos [\omega_0 (t - z/c)] + \vec{e}_y \sin [\omega_0 (t - z/c)] \}, \\ \vec{B}(z, t) &= \frac{\hat{E}}{c} \{ -\vec{e}_x \sin [\omega_0 (t - z/c)] + \vec{e}_y \cos [\omega_0 (t - z/c)] \}\end{aligned}$$

beschrieben werden kann; dabei sind \vec{e}_x und \vec{e}_y Einheitsvektoren in x - beziehungsweise y -Richtung. Die Wechselwirkung mit dem Feld führt zu einer Schraubenbahn des Teilchens als Resultat der Überlagerung zweier Teilbewegungen. Dabei handelt es sich einerseits um eine Kreisbahn, die durch das rotierende elektrische Feld verursacht wird und gegenphasig zu diesem verläuft; auf dieser bewegt sich das Teilchen stets antiparallel zum ebenfalls rotierenden magnetischen Feld, so daß *keine magnetische Kraft auftritt*⁵³. Damit tritt andererseits eine geradlinig-gleichförmige Bewegung längs der Ausbreitungsrichtung der Welle auf. Für die Geschwindigkeit dieser geradlinigen Bewegung schreiben wir

$$\vec{v} = \beta c \vec{e}_z.$$

Nun betrachten wir den denselben Vorgang im Ruhesystem des Teilchens nach der Wechselwirkung, das heißt, in einem Inertialsystem, das sich mit der Geschwindigkeit $v = \beta c$ relativ zum Laborsystem in Richtung der positiven z -Achse bewegt, und dessen Ursprung zum Zeitpunkt der Wechselwirkung mit demjenigen des Laborsystems zusammenfällt. Da die Phase der Welle Lorentz-invariant ist, gilt hier

$$\begin{aligned}\vec{E}'(z', t') &= \hat{E}' \{ \vec{e}_x \cos [\omega_0 (t - z/c)] + \vec{e}_y \sin [\omega_0 (t - z/c)] \}, \\ \vec{B}'(z', t') &= \frac{\hat{E}'}{c} \{ -\vec{e}_x \sin [\omega_0 (t - z/c)] + \vec{e}_y \cos [\omega_0 (t - z/c)] \}\end{aligned}$$

⁵⁰Näheres dazu sowie weitere Literaturangaben findet man in [519].

⁵¹Wir folgen hier im wesentlichen der Darstellung in [209].

⁵²Das erfolgt aus reiner Bequemlichkeit der Darstellung und ist keine Einschränkung der Allgemeinheit, da man zirkular polarisierte Wellen als Basis für beliebige Polarisierungen verwenden kann; beispielsweise kann man linear polarisierte Wellen stets als Linearkombinationen gegenläufig zirkular polarisierter Wellen darstellen.

⁵³Wir vernachlässigen sowohl die Strahlungsrückwirkungskraft des beschleunigt bewegten Teilchens, vergleiche Abschnitt 1.2.3.3, als auch die Wechselwirkung des Magnetfelds mit dem magnetischen Moment des Teilchens.

mit dem transformierten elektrischen Feld

$$\hat{E}' = \hat{E} \sqrt{\frac{1-\beta}{1+\beta}}$$

Das magnetische Feld und die Frequenz transformieren sich entsprechend gemäß

$$B' = \hat{B} \sqrt{\frac{1-\beta}{1+\beta}}$$

beziehungsweise

$$\omega' = \omega_0 \sqrt{\frac{1-\beta}{1+\beta}}; \quad (2.38)$$

dabei ist die Relation für die Frequenz gerade der *relativistische Doppler-Effekt*.

Ein Beobachter an einem Punkt P , dessen Ortsvektor im Laborsystem mit dessen z -Achse den Winkel θ bildet, stellt fest, daß das beschleunigt bewegte, geladene Teilchen eine elektromagnetische Welle aussendet. Deren Frequenz ist im bewegten System ω' und im Laborsystem

$$\omega = \omega' \frac{1 + \beta \cos \theta}{\sqrt{1 - \beta^2}}. \quad (2.39)$$

Aus dem Winkel θ wird im bewegten Bezugssystem θ' , wobei für die beiden Winkel die Relation

$$\cos \theta' = \frac{\cos \theta - \beta}{1 - \beta \cos \theta} \quad (2.40)$$

gilt. Einsetzen von (2.38) und (2.40) in (2.39) liefert

$$\omega = \frac{\omega_0}{1 + \frac{\beta}{1-\beta} (1 - \cos \theta)}$$

oder, auf die Wellenlänge umgeschrieben und unter Verwendung der Abkürzung $\varepsilon = \beta/(1 - \beta)$,

$$\lambda = \lambda_0 [1 + \varepsilon (1 - \cos \theta)].$$

Ein Vergleich mit der Comptonschen Formel (2.37) zeigt, daß die beiden Resultate identisch sind, wenn man $\varepsilon \lambda_0 = \lambda_c$ setzt⁵⁴.

Damit fällt auch der Compton-Effekt als Entscheidungsexperiment für oder wider die Wellennatur des Lichts aus – entgegen anderslautender Darstellungen, die hier genauso weitverbreitet zu finden sind wie beim Photoeffekt, und die den Comptoneffekt als einen der wesentlichen Beweise für die Existenz von Photonen verkaufen. Compton war nicht der einzige, der um die Unrichtigkeit solcher Ausführungen wußte; auf klassische und halbklassische

⁵⁴Die Relation $\lambda_c = h/mc$ ist intrinsisch quantenmechanisch und läßt sich im obigen klassischen Modell natürlich nicht herleiten.

Beschreibungen der Streuung von Photonen und Elektronen wurde auch in der Folgezeit verschiedentlich hingewiesen⁵⁵. Immerhin demonstriert er sehr deutlich, daß dem Licht ein Impuls zugeschrieben werden kann⁵⁶.

Erstaunlicherweise verhalf der Compton-Effekt dennoch der Lichtquantenhypothese zum Durchbruch, was sich nahtlos an die Rezeption der etwa gleichzeitig aufgetauchten quantenmechanischen Herleitung der Einsteinschen Fluktuationsformel durch Jordan anschloß⁵⁷. Die Vorstellung, Licht könne auch teilchenhaftes Verhalten an den Tag legen, war fortan in der physikalischen Welt salonfähig, und die Teilchenvorstellung des Lichts war von da an als gleichberechtigte Sichtweise neben der Wellenvorstellung anerkannt, wenn auch in unreflektierter und vermeintlich nahezu beliebig austauschbarer Weise. Bis zu einem wirklich tiefgehenden Verständnis der tatsächlichen Natur des Welle-Teilchen-Dualismus sollte es indes noch Jahrzehnte dauern.

Es sollte an dieser Stelle auch erwähnt werden, daß klassische oder halbklassische Beschreibungen welcher Art auch immer des Photoeffekts wie auch des Compton-Effekts natürlich nicht das geringste daran ändern, daß es sich bei beiden um *genuin quantenfeldtheoretische* und damit beliebig nichtklassische Sachverhalte handelt. Bei genauerer Betrachtung stellt man dann auch fest, daß gewisse subtile Details in beiden Fällen ausschließlich unter Zuhilfenahme quantisierter elektromagnetischer Felder und damit dem, was im Volksmund „Photonen“ genannt wird, verstanden werden können⁵⁸. Das ändert jedoch nichts daran, daß die populäreren, in der elementaren Lehrbuchliteratur beschriebenen Eigenschaften der beiden Effekte nicht dazu gehören.

2.4 Die Atommodelle von Bohr und Sommerfeld

Die Theorie der Lichtquanten stellte nur den allerersten Anfang einer Umwälzung der gesamten Physik dar, die insbesondere auch zu völlig neuen Vorstellungen vom Aufbau der Atome führen sollte. Die Probleme, die als Folge des Rutherford'schen Streuexperimentes bei der Modellvorstellung der Atome und in diesem Zusammenhang bei der Erklärung der Atomspetren mit ihren diskreten Linien auftraten, machten auch hier die Notwendigkeit einer solchen Umwälzung sehr deutlich. Das Planetensystemmodell der Atome mit seinen die Atomkerne umkreisenden Elektronen, das die Spektrallinien durch Übergänge dieser Elektronen zwischen

⁵⁵Beispielsweise 1926 von H. Kallmann und H. Mark, die ausdrücklich bemerkten, daß eine Entscheidung zwischen Wellen- und Teilchenvorstellung des Lichts aufgrund des Compton-Effekts *nicht möglich ist* [484], oder von Schrödinger, der 1927 eine halbklassische Herleitung auf Basis der Klein-Gordon-Gleichung präsentierte [791]; siehe dazu auch [843]. Vergleiche auch den klassischen Zugang von S. Björck aus dem Jahr 1932 [69].

⁵⁶Die Vorstellung eines Photonenimpulses taucht erstmals 1909 bei J. Stark auf [832].

⁵⁷Siehe Abschnitt 2.3.2.

⁵⁸Beispielsweise ist es beim Photoeffekt nicht möglich, durch einen Strahlteiler gleichzeitig an zwei Detektoren Photoelektronen auszulösen, was im Modell klassischer Lichtwellen selbst dann geschehen sollte, wenn die Energie des Lichtstrahls nurmehr einzelnen Photonen entspricht [158]. Ein Beispiel für den Compton-Effekt ist die genaue Beschreibung von dessen Streuquerschnitt durch die Klein-Nishina-Formel [502].

verschiedenen Bahnen erklärt, führte bekanntlich zu den in Abschnitt 1.2.3 beschriebenen Widersprüchen; es konnte weder die diskrete statt kontinuierliche Struktur der Spektrallinien noch die Stabilität der Atome erklären. Bohr und Sommerfeld gelang es unter Zuhilfenahme gewisser Ad-Hoc-Annahmen Atommodelle zu konstruieren, die die Berechnung der einfachsten Atomspektren gestatteten. Bei komplexeren Atomspektren und bei Molekülspektren funktionierten die Atommodelle allerdings schon nicht mehr, und von einer Erklärung der Stabilität der Atome konnte dabei erst recht keine Rede sein. Dennoch ist es aus historischer und auch mathematischer Sicht sehr lohnend, sich damit zu beschäftigen.

2.4.1 Das Bohrsche Atommodell

Auslöser für die Suche nach einer neuen Atomtheorie war wie erwähnt einerseits das Problem der fehlenden Stabilität des Rutherford'schen Planetensystemmodells der Atome, und andererseits die bereits in der Mitte des 19. Jahrhunderts zuerst von Bunsen und Kirchhoff gemachte Beobachtung der charakteristischen Spektren, die alle Elemente besitzen. Insbesondere für Wasserstoff wurde dies in der Folgezeit sehr eingehend weiter untersucht. Dabei fand zunächst Balmer 1885 eine Formel, mit der die Frequenzen einer prominenten, im sichtbaren beginnenden und im nahe Ultraviolett weitergehenden Serie von Spektrallinien des Emissionsspektrums von Wasserstoff berechnet werden können [37]; die Balmer-Formel lautet

$$\nu = \nu_R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (2.41)$$

mit $n = 3, 4, \dots$. Die Konstante $\nu_R = 3,29 \cdot 10^{15}$ Hz wurde später *Rydbergfrequenz* genannt, denn das Resultat konnte 1889 von Rydberg verallgemeinert werden. Dieser stellte fest, daß sich das gesamte Spektrum des Wasserstoffatoms, das aus mehreren Serien von Spektrallinien besteht, durch eine Formel beschreiben läßt, bei der sich (2.41) als Spezialfall erweist, nämlich durch

$$\nu = \nu_R \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (2.42)$$

mit $n' < n$, $n' = 1, 2, \dots$, $n = 2, 3, \dots$ (2.42) heißt *Rydberg-Formel*. Ähnliche Linienspektren und entsprechende Formeln wurden von H. Kayser, C. Runge⁵⁹ und F. Paschen auch für viele andere Atome gefunden [486] - [490], [749], [750], [752] - [756], wobei insbesondere die Konstante vor der Klammer materialabhängig und nur experimentell bestimmbar war. Die Übergänge waren also *quantisiert*, wenn auch dieser Begriff in der damaligen Zeit noch nicht verwendet wurde.

Nachdem sich die klassische Physik als außerstande erwiesen hatte, diese Phänomene zu beschreiben, fand Bohr 1913 ein Modell, daß tatsächlich in der Lage war, zumindest

⁵⁹Das ist derselbe Runge, der zusammen mit M. W. Kutta das Runge-Kutta-Verfahren zur numerischen Lösung von Differentialgleichungen entdeckt hat. Runge war promovierter Mathematiker und erstreckte seine Tätigkeiten von der Mathematik bis zur Experimentalphysik.

die Spektren wasserstoffähnlicher Atome im wesentlichen richtig voraussagen [84]⁶⁰. Die entscheidende Grundidee war hierbei (und darüberhinaus für die gesamte Mikrophysik der folgenden Jahre) das sogenannte *Korrespondenzprinzip*, wonach mit wachsendem Bahnradius r , das heißt mit wachsenden Werten von n und n' , die quantisierte Atomphysik in die klassische Physik übergehen soll. Bohr behielt für sein Atommodell die Rutherford'sche Vorstellung von sich auf Kreisbahnen um die Kerne bewegenden Elektronen bei und schaltete die damit verbundenen Schwierigkeiten kurzerhand durch drei nicht weiter begründete und im Rahmen dieses Modells auch gar nicht weiter begründbare Ad-Hoc-Annahmen aus, den berühmten *Bohrschen Postulaten*. Im Einzelnen beinhalten diese folgendes:

1. Bohrsches Postulat: *Elektronen dürfen sich nur auf ganz bestimmten, diskreten Bahnen mit diskreten Energien E_n bewegen.*

2. Bohrsches Postulat: *Die Bewegung der Elektronen auf diesen Bahnen erfolgt strahlungsfrei. Ein Elektron kann von einer Bahn mit höherer Energie E_n unter Emission von Strahlung auf eine Bahn mit tieferer Energie $E_{n'}$ übergehen und bei Absorption von Strahlung einen umgekehrten Übergang durchführen. Die Frequenz der dabei emittierten beziehungsweise absorbierten Strahlung beträgt*

$$E_n - E_{n'} = h\nu.$$

3. Bohrsches Postulat: *Die Bestimmung der Rydberg-Frequenz muß durch Vergleich der Umlauffrequenzen der Elektronen mit der Frequenz der emittierten und absorbierten Strahlung erfolgen.*

Mit diesen Postulaten als Ausgangspunkt lassen sich nun die Radien und die Energieniveaus der Bahnen der Rutherford'schen Atomhüllenelektronen auf einfachste Weise berechnen. Zunächst betrachtet man ein durch die elektrische Kraft F_{el} des Kerns auf eine Kreisbahn gezwungenes Elektron, sodaß diese Coulomb-Kraft als Zentripetalkraft aufgefaßt werden kann. Es gilt also $F_{\text{el}} = F_Z$ oder

$$m_e r \omega^2 = \frac{e^2}{r^2}. \quad (2.43)$$

Die potentielle Energie des Elektrons im Coulombfeld beträgt

$$E_{\text{pot}} = - \int_r^\infty F_{\text{el}} dr = -e^2 \int_r^\infty \frac{1}{r^2} dr = -\frac{e^2}{r}.$$

Für die Gesamtenergie gilt daher

$$E = \frac{1}{2} m_e r^2 \omega^2 - \frac{e^2}{r}$$

und mit (2.43)

$$E = -\frac{e^2}{2r}. \quad (2.44)$$

⁶⁰Bohr publizierte noch im selben Jahr umfangreiche Erweiterungen seiner Theorie [85], [86]. Eine ausführliche Beschreibung des Bohrschen Atommodells findet sich bei [373] sowie [500].

Gemäß dem ersten Bohrschen Postulat müssen diese Energiewerte quantisiert sein. Aus dem zweiten Bohrschen Postulat folgt zusammen mit der Rydbergformel (2.42) für diese Energiewerte die Beziehung

$$E_n = -\frac{\nu_R h}{n^2}. \quad (2.45)$$

Entsprechend dem dritten Bohrschen Postulat vergleicht man nun die Umlauffrequenz des Elektrons mit den Übergangsfrequenzen. Dazu wird der Ausdruck (2.44) für die Gesamtenergie des Elektrons mit Hilfe von (2.43) umgeformt auf

$$E = -\frac{1}{2} (e^4 m_e \omega^2)^{1/3}. \quad (2.46)$$

Mit (2.42) findet man für große n, n' ($n - n' = \Delta n$),

$$\nu = \nu_R \frac{1}{n^2} \left[\frac{1}{(1 - \Delta n/n)^2} - 1 \right] \approx \nu_R \frac{2\Delta n}{n^3}. \quad (2.47)$$

Gemäß dem Korrespondenzprinzip wird diese Frequenz nun mit der klassischen Umlauffrequenz des Elektrons gleichgesetzt. Für $\Delta n = 1$ wird (2.47) zu

$$\nu = \frac{2\nu_R}{n^3},$$

und diese Frequenz wird nun in (2.46) eingesetzt. Damit ergibt sich für die Gesamtenergie

$$E_n = -\frac{\nu_R h}{n^2} = -\left(\frac{8\pi^2 e^4 m_e \nu_R^2}{n^6} \right)^{1/3},$$

und Auflösen nach der Rydberg-Frequenz liefert

$$\nu_R = \frac{2\pi^2 m_e e^4}{h^3}, \quad (2.48)$$

was zum korrekten numerischen Wert führt. Für die Gesamtenergie des Elektrons im n -ten Niveau findet man damit

$$E_n = -\frac{2\pi^2 m_e e^4}{h^2 n^2}, \quad (2.49)$$

und für die Übergangsenergie beim Übergang vom Niveau n_1 in das Niveau n_2

$$E_{n_1, n_2} = \frac{2\pi^2 m_e e^4}{h^2} \left(\frac{1}{n_1} - \frac{1}{n_2} \right), \quad n_1, n_2 \in \mathbb{N} \setminus \{0\}, \quad n_2 \geq n_1.$$

Für die entsprechenden Übergangsfrequenzen gilt

$$\nu_{n_1, n_2} = \frac{2\pi^2 m_e e^4}{h^3} \left(\frac{1}{n_1} - \frac{1}{n_2} \right), \quad n_1, n_2 \in \mathbb{N} \setminus \{0\}.$$

Hiermit können die Spektrallinien des Wasserstoffs recht genau vorausberechnet werden. Ersetzt man die Elektronenmasse m_e durch die reduzierte Masse und schreibt

$$\nu_{n_1, n_2} = \frac{2\pi^2 m_e M e^4}{h^3 (m_e + M)} \left(\frac{1}{n_1} - \frac{1}{n_2} \right), \quad n_1, n_2 \in \mathbb{N} \setminus \{0\}, \quad (2.50)$$

wobei M die Masse des Atomkerns ist und wodurch die Mitbewegung des Kerns berücksichtigt wird, so läßt sich die Übereinstimmung mit den Meßwerten noch verbessern.

Einige weitere Folgerungen aus dem Bohrschen Atommodell seien an dieser Stelle gleichfalls angemerkt. Zunächst liefert Gleichsetzen von (2.44) und (2.45) unter Verwendung von (2.48) für die Radien der Elektronenbahnen den Ausdruck

$$r_n = \frac{h^2 n^2}{4\pi^2 m_e e^2}, \quad n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}. \quad (2.51)$$

Setzt man $n = 1$, so erhält man beim Wasserstoffatom gerade den Bohrschen Radius $r_1 = 5,29 \cdot 10^{-11}$ m; geht n gegen Unendlich, divergieren die Radien.

Für den Bahndrehimpuls $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$ der umlaufenden Elektronen läßt sich eine Folgerung ableiten, die sich in der weiteren Entwicklung der Quantenmechanik als von großer Tragweite erweisen sollte. Berechnet man den Betrag des Bahn-Drehimpulses gemäß

$$|\vec{l}| = m_e v_n r_n = m_e r_n^2 \omega_n,$$

so findet man die Quantisierungsbedingung⁶¹

$$|\vec{l}| = \frac{hn}{2\pi}, \quad n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}. \quad (2.52)$$

Daraus erhält man für die Geschwindigkeiten des Elektrons auf den einzelnen Bahnen

$$v_n = \frac{2\pi e^2}{hn}.$$

Die Drehimpuls-Quantisierung läßt sich auch in der Form

$$S = \oint p dx = hn, \quad n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$$

schreiben und besagt damit, daß die Wirkung⁶² entlang eines geschlossenen Weges im Konfigurationsraum nur ganzzahlige Vielfache des Planckschen Wirkungsquantums annehmen kann – womit sich dessen Name erklärt. Im Übrigen läßt sich das Bohrsche Atommodell leicht auf

⁶¹Die Quantisierung des Bahndrehimpulses wird sehr häufig als eines der Bohrschen Postulate betrachtet, was jedoch nicht richtig ist. Sie ist lediglich eine Folgerung daraus. Im übrigen zeigt sich hier schon ein drastischer Mangel der Bohrschen Theorie, da mit $n \neq 0$ auch $l \neq 0$ folgt, sodaß es keine s -Zustände geben dürfte.

⁶²Vergleiche Abschnitt 1.5.3.

wasserstoffähnliche Atome übertragen, das heißt auf Atome, die bis auf ein Elektron ionisiert sind. Man hat dabei lediglich die Ladung e im Coulombschen Gesetz durch Ze zu ersetzen, wobei Z die Kernladungszahl der betrachteten Atome ist.

Bohrs Theorie schien leider nur für kurze Zeit der erhoffte Durchbruch in der Mikrophysik zu sein. Schon 1914 entdeckte W. E. Curtis zwar kleine, aber systematische Abweichungen zwischen den Voraussagen des Bohrschen Modells und den experimentell ermittelten Frequenzen des Wasserstoffspektrums. Bohr lieferte zwar 1915 eine durch Berücksichtigung der relativistischen Massenzunahme hergeleitete verbesserte Formel der Gestalt

$$\nu_{n_1, n_2} = \frac{2m_e M e^4}{h^3 (m_e + M)} \left(\frac{1}{n_1} - \frac{1}{n_2} \right) \left[1 + \frac{\pi^2 e^4}{c^2 h^2} \left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2} \right) \right] + \text{höhere Terme in } \frac{v}{c},$$

$$n_1, n_2 \in \mathbb{N} \setminus \{0\}, \quad (2.53)$$

mit der die Abweichungen qualitativ richtig beschrieben werden [87]; quantitativ ist dies jedoch nicht der Fall, denn die Differenz der gemessenen Werte von denjenigen der ursprünglichen Bohrschen Theorie ist dreimal so groß wie diejenige der Werte, die aus (2.50) beziehungsweise (2.53) folgen. Bevor wir weitere Schwachpunkte des ersten nichtklassischen Atommodells diskutieren, betrachten wir zunächst dessen weitere Entwicklung.

2.4.2 Das Sommerfeldsche Atommodell

Sommerfeld gelang 1916 eine Verbesserung des Bohrschen Atommodells, indem er Wirkungs- und Winkelvariable⁶³ verwendete und für diese spezielle zusätzliche Postulate formulierte [822] - [825]⁶⁴. Auslöser dafür waren Abweichungen von der Theorie, die nichts mit den von Curtis gefundenen zu tun hatten, dafür aber eigentlich schon seit Jahren bekannt und sogar Jahre älter als Bohrs Arbeiten sind. Präzise Messungen hatten schon Jahre zuvor gezeigt, daß die Linien der Spektren wasserstoffähnlicher Atome keine einfachen Linien sind, sondern jeweils sogenannte Multipletts aus mehreren Linien verschiedener Frequenzen⁶⁵, was mit dem Bohrschen Atommodell natürlich nicht erklärt werden konnte. Sommerfeld konnte diese Erklärung liefern, indem er ganz im Sinne des Kepler-Problems von *elliptischen Bahnen* ausging und außerdem die Quantisierung nur des Bahndrehimpulses auf die Quantisierung aller Freiheitsgrade ausdehnte. Darunter ist folgende Aussage zu verstehen: Ist ein System durch die Hamiltonfunktion $H(p_1, p_2, \dots, p_N, q_1, q_2, \dots, q_N)$ charakterisiert, dann erfüllen diejenigen kanonisch konjugierten Variablen⁶⁶, in denen die Bewegungsgleichungen des betrachteten Systems separierbar, das heißt als getrennte Differentialgleichungen für jeweils eine der Variablen q_j formulierbar sind, für die quantentheoretisch stabilen Bahnen des Systems die Bedingungen

⁶³Siehe Abschnitt 1.1.2.6.

⁶⁴Lehrbuchmäßige Darstellungen des Sommerfeldschen Atommodells sind in modernen Texten nicht mehr üblich; eine Ausnahme ist [257]. In den 20er Jahren war das natürlich anders. Die Standardreferenz ist [827] und [828], noch wesentlich ausführlicher ist [104]. Einen Überblick liefert [537].

⁶⁵Michelson war der erste, der solche Resultate erzielte [606], [607], die später mehrfach verbessert wurden und unter der Bezeichnung *Feinstruktur des Wasserstoffspektrums* bekannt geworden sind.

⁶⁶Siehe Abschnitt 1.1.2.2.

$$\oint p_j dq_j = n_j h, \quad n_j \in \mathbb{Z}, \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (2.54)$$

Die Relationen (2.54) heißen *Bohr-Sommerfeldsche Quantisierungsregeln*⁶⁷. Sie stellen eine allgemeine Quantisierungsmethode dar und sind immer dann anwendbar, wenn das betrachtete Problem tatsächlich separierbar ist.

Das Sommerfeldsche Atommodell setzt zunächst eine klassische Betrachtung des Kepler-Problems voraus, also im allgemeinsten Fall die Bewegung eines Teilchens in einem Zentralpotential $V(r)$. Die Hamiltonfunktion für ein solches System lautet

$$H = \frac{p^2}{2m_e} + V(r), \quad (2.55)$$

die daraus folgenden Bewegungsgleichungen sind, wie man aus der klassischen Mechanik weiß, in Kugelkoordinaten separierbar. In diesen nimmt die Hamiltonfunktion die Gestalt

$$H = \frac{1}{2m_e} \left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\phi^2}{r^2 \sin^2 \theta} \right) + V(r)$$

an, mit den verallgemeinerten Impulsen $p_r \equiv m_e \dot{r}$, $p_\theta \equiv m_e r^2 \dot{\theta}$ und $p_\phi \equiv r^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}$. Damit lautet die Hamilton-Jacobi-Gleichung für die Hamiltonsche charakteristische Funktion⁶⁸

$$\frac{1}{2m_e} \left[\left(\frac{\partial W}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial W}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial W}{\partial \phi} \right)^2 \right] + V(r) = E, \quad (2.56)$$

wobei mit E die Gesamtenergie bezeichnet wird. Die Separation der Variablen gelingt mit dem Ansatz

$$W(r, \theta, \phi) = W_r(r) + W_\theta(\theta) + W_\phi(\phi),$$

mit dem (2.56) in

$$\frac{1}{2m_e} \left[\left(\frac{dW_r}{dr} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{dW_\theta}{d\theta} \right)^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{dW_\phi}{d\phi} \right)^2 \right] + V(r) = E \quad (2.57)$$

umgeformt werden kann. Hieraus können sofort die bekannten Erhaltungssätze des klassischen Keplerproblems abgelesen werden. Erstens ist nur der dritte Summand in der eckigen Klammer

⁶⁷Unabhängig von Sommerfeld und voneinander wurden diese Quantisierungsregeln etwa zur gleichen Zeit auch von Epstein [265], Ishiwara [453], Schwarzschild [800] und Wilson [935] postuliert; diese Autoren wendeten sie jedoch nicht auf Probleme aus der Atomphysik an. Schwarzschild stellte als erster eine Verbindung zur Hamilton-Jacobischen Theorie her, womit sehr ausgefeilte Methoden der zur damaligen Zeit bereits hochentwickelten Himmelsmechanik auf die Atomphysik anwendbar wurden. Abgesehen davon konnten Epstein [266] und Kneser [506] wenige Jahre später zeigen, daß ein von Planck schon vor den Sommerfeldschen Arbeiten über wasserstoffähnliche Atome vorgeschlagener Ansatz zur quantentheoretischen Beschreibung von Systemen mit vielen Freiheitsgraden auf völlig anderem Wege zu Quantisierungsbedingungen führt, die zu denjenigen Sommerfelds äquivalent sind [704], [705], [706].

⁶⁸Siehe Abschnitt 1.1.2.5.

der Gleichung (2.57) von ϕ abhängig, die Gleichung kann somit nur dann für alle ϕ gelten, wenn

$$\frac{dW_\phi}{d\phi} \equiv \alpha_\phi \quad (2.58)$$

eine Konstante ist. Das ist der Erhaltungssatz für die polare Komponente $\alpha_\phi = p_\phi = L_\phi$ des Drehimpulses. (2.57) wird damit zu

$$\frac{1}{2m_e} \left\{ \left(\frac{dW_r}{dr} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left[\left(\frac{dW_\theta}{d\theta} \right)^2 + \frac{\alpha_\phi^2}{\sin^2 \theta} \right] \right\} + V(r) = E,$$

sodaß zweitens in dieser Gleichung der Term in eckigen Klammern nur von θ abhängt und

$$\left(\frac{dW_\theta}{d\theta} \right)^2 + \frac{\alpha_\phi^2}{\sin^2 \theta} = \alpha_\theta^2 \quad (2.59)$$

ebenfalls konstant sein muß. Das ist der Erhaltungssatz für den Gesamtdrehimpuls $\alpha_\theta = L$. (2.57) lautet nun drittens

$$\frac{1}{2m_e} \left[\left(\frac{dW_r}{dr} \right)^2 + \frac{\alpha_\theta^2}{r^2} \right] + V(r) = E \quad (2.60)$$

und hängt nur noch von r ab. Das ist gleichzeitig der Energieerhaltungssatz.

Die Gleichungen (2.58), (2.59) und (2.60) können nun im Prinzip direkt integriert werden⁶⁹. Sie liefern die Hamiltonsche charakteristische Funktion W und mit Hilfe dieser die Bahngleichungen des Teilchens. Im hier interessierenden Fall eines $1/r$ -Potentials sind das die wohlbekannten Keplerschen Bahnen in Form der Kegelschnitte

$$r = \frac{L^2}{mk(1 + \varepsilon \cos(\theta - \theta_0))};$$

dabei ist $\varepsilon = \sqrt{1 + \frac{2EL^2}{mk^2}}$ die *Exzentrizität* und θ_0 einer der Umkehrwinkel der Bahn. E und damit ε bestimmen deren genaue Gestalt, es gilt:

$$\begin{aligned} \varepsilon > 1, \quad E > 0 &: \quad \text{Hyperbel,} \\ \varepsilon = 1, \quad E = 0 &: \quad \text{Parabel,} \\ \varepsilon < 1, \quad E < 0 &: \quad \text{Ellipse,} \\ \varepsilon = 0, \quad E = -\frac{mk^2}{2L^2} &: \quad \text{Kreis.} \end{aligned}$$

Das ist natürlich nichts spektakuläres⁷⁰, und man ist im vorliegenden Kontext auch mehr noch als an den Bahnkurven an der Gestalt der Wirkungsvariablen interessiert, da es eben diese

⁶⁹Abgesehen davon, daß diese Integrationen für die meisten Zentralpotentiale nur näherungsweise durchführbar sind.

⁷⁰Zumal die hier beschrittene Methode nicht gerade das Standardverfahren zur Lösung des Kepler-Problems darstellt. Ausführliche Darstellungen der üblichen Vorgehensweisen inklusive Herleitung der Bahnkurven findet man in jedem Lehrbuch der klassischen Mechanik, beispielsweise [135] und [338].

sind, an welche die Quantisierungsbedingungen (2.54) zu stellen sind. Die Wirkungsvariablen lauten hier

$$J_\phi = \oint p_\phi d\phi = \oint \frac{dW_\phi}{d\phi} d\phi,$$

$$J_\theta = \oint p_\theta d\theta = \oint \frac{dW_\theta}{d\theta} d\theta,$$

$$J_r = \oint p_r dr = \oint \frac{dW_r}{dr} dr,$$

oder, mit Hilfe von (2.58), (2.59) und (2.60),

$$J_\phi = \oint L_\phi d\phi,$$

$$J_\theta = \oint \sqrt{L^2 - \frac{L_\phi^2}{\sin^2 \theta}} d\theta,$$

$$J_r = \oint \sqrt{2m[E - V(r)] - \frac{L^2}{r^2}} dr.$$

Die Lösung des Keplerproblems besteht damit in der Auswertung dieser drei Integrale.

Aufgrund der Konstanz des polaren Drehimpulses kann dieser vor das erste Umlaufintegral gezogen werden, und für dieses folgt sofort

$$J_\phi = L_\phi \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi L_\phi.$$

Die Berechnung des zweiten Umlaufintegrals ist elementar durchführbar, sie gelingt jedoch viel bequemer, wenn man die kinetische Energie T einmal in räumlichen Polarkoordinaten r, θ, ϕ und außerdem in ebenen Polarkoordinaten r, ψ in der Bahnebene ausdrückt⁷¹. Man findet

$$2T = m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}^2) = m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\psi}^2)$$

und damit

$$p_r \dot{r} + p_\theta \dot{\theta} + p_\phi \dot{\phi} = p_r \dot{r} + L\dot{\psi},$$

sodaß man unmittelbar

$$J_\theta = \oint p_\theta d\theta = \oint L d\psi - \oint p_\phi d\phi$$

⁷¹Dieses Verfahren stammt von J. H. van Fleck [895].

erhält. Wegen der Konstanz des Gesamtdrehimpulses L und dessen polarer Komponente $L_\phi = p_\phi$ kann man diese beiden vor die Integrale ziehen, und es ergibt sich

$$J_\theta = L \int_0^{2\pi} d\psi - L_\phi \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi (L - L_\phi). \quad (2.61)$$

Damit wird das dritte Umlaufintegral zu

$$J_r = \oint \sqrt{2m [E - V(r)] - \frac{(J_\theta + J_\phi)^2}{4\pi^2 r^2}} dr. \quad (2.62)$$

Um es zu berechnen muß man im Gegensatz zu den anderen beiden natürlich die Form des Potentials kennen. Da es hier um die Bewegung eines Teilchens der Masse $m_{e,0}$ und der Ladung e im Coulombfeld eines Teilchens der Masse M und der Ladung Ze geht, gilt $V(r) = -k/r$ mit $k = Ze^2$. Korrekterweise ist dabei anstelle der Masse des Elektrons dessen reduzierte Masse

$$m_e = \frac{M m_{e,0}}{M + m_{e,0}}$$

zu verwenden; das entspricht der Transformation des Problems von Labor- auf sogenannte Relativ- und Schwerpunktskoordinaten und berücksichtigt die Mitbewegung des Atomkerns. (2.62) wird damit zu

$$J_r = \oint \sqrt{2m \left(E + \frac{k}{r} \right) - \frac{(J_\theta + J_\phi)^2}{4\pi^2 r^2}} dr = \oint \sqrt{A + \frac{2B}{r} - \frac{C}{r^2}} dr, \quad (2.63)$$

mit den Abkürzungen

$$A = 2mE, \quad B = m_e k, \quad C = \frac{(J_\theta + J_\phi)^2}{4\pi^2}.$$

Auch dieses Integral ist elementar auswertbar; die etwas mühsame Rechnung läßt sich jedoch ebenfalls wesentlich vereinfachen, diesesmal mit Hilfe des Residuensatzes⁷². Hierzu betrachten wir anstelle von (1.17) das komplexe Kurvenintegral

$$J = \oint \sqrt{A + \frac{2B}{z} - \frac{C}{z^2}} dz \quad (2.64)$$

und dazu die stereographische Projektion der komplexen Ebene auf die Oberfläche einer Kugel, deren Südpol dem Ursprung und deren Nordpol dem Punkt ∞ entspricht und auf der die reelle Achse zu einem Meridian wird. Der Integrand von (2.63) hat zwei Singularitäten, den Ursprung und Unendlich. Sind r_1 und r_2 die Umkehrpunkte der Bahn, dann verläuft die Integration beispielsweise von r_1 nach r_2 und wieder zurück nach r_1 . Dabei muß man

⁷²Diese Methode wurde hier erstmals von Sommerfeld angewendet [828]; vergleiche auch [104] und [895].

berücksichtigen, daß gebundene Bewegungen $E < 0$ voraussetzen und außerdem der radiale Impuls

$$p_r = \pm \sqrt{2m_e E + \frac{2mk}{r} - \frac{(J_\theta + J_\phi)^2}{4\pi^2 r^2}}$$

dabei auf dem Hinweg ein anderes Vorzeichen hat als auf dem Rückweg. Die Umkehrpunkte sind gerade diejenigen Werte, für die p_r verschwindet. Ist $r_2 > r_1$, dann ist als Integrand auf dem Hinweg die positive und auf dem Rückweg die negative Wurzel zu wählen. Auf der komplexen Kugel erreichen wir das durch einen Integrationsweg, der zuerst auf der reellen Achse von r_1 nach r_2 und dann um die Kugel herum von r_2 nach r_1 zurück läuft und damit den Ursprung im Uhrzeigersinn und Unendlich im Gegenuhrzeigersinn umschließt. Der Residuensatz besagt, daß der Wert eines geschlossenen Kurvenintegrals, dessen Weg Pole des Integranden umschließt, gleich $-2\pi i$ multipliziert mit der Summe der Residuen der eingeschlossenen Pole ist, wobei im Uhrzeigersinn umlaufene Residuen negativ und im Gegenuhrzeigersinn umlaufene Residuen positiv zu rechnen sind. Ausklammern liefert zunächst

$$\sqrt{A + \frac{2B}{z} - \frac{C}{z^2}} = \frac{\sqrt{Az^2 + 2Bz - C}}{z};$$

0 ist folglich ein Pol erster Ordnung, und dessen Residuum ist

$$\text{Res}(0) = \lim_{z \rightarrow 0} \left(z \frac{\sqrt{Az^2 + 2Bz - C}}{z} \right) = \lim_{z \rightarrow 0} \sqrt{Az^2 + 2Bz - C} = \sqrt{-C}.$$

Die Substitution $u = 1/z$ liefert andererseits

$$\oint \sqrt{A + \frac{2B}{z} - \frac{C}{z^2}} dz = - \oint \frac{\sqrt{A + 2Bu - Cu^2}}{u^2} du.$$

Die Singularität der linken Seite bei Unendlich entspricht einer Singularität der rechten Seite am Ursprung, woran gleichzeitig erkennbar ist, daß es sich dabei um einen Pol zweiter Ordnung handelt. Dessen Residuum ist folglich

$$\begin{aligned} \text{Res}(\infty) &= - \lim_{u \rightarrow 0} \frac{d}{du} \left(u^2 \frac{\sqrt{A + 2Bu - Cu^2}}{u^2} \right) = - \lim_{u \rightarrow 0} \frac{d}{du} \sqrt{A + 2Bu - Cu^2} \\ &= - \lim_{u \rightarrow 0} \frac{B - Cu}{\sqrt{A + 2Bu - Cu^2}} = - \frac{B}{\sqrt{A}}. \end{aligned}$$

Für das Umlaufintegral erhält man damit

$$J_r = 2\pi i \left(\sqrt{-C} + \frac{B}{\sqrt{A}} \right)$$

oder nach Einsetzen der Ausdrücke für A , B und C

$$J_r = -(J_\theta + J_\phi) + \pi k \sqrt{\frac{2m_e}{-E}} = 2\pi \left(k \sqrt{\frac{m_e}{-2E}} - L \right).$$

Die drei Wirkungsvariablen erlauben eine vollständige Beschreibung der Bahnen im Coulomb-Potential. Zunächst findet man die Gesamtenergie

$$H = E = -\frac{2\pi^2 m_e k^2}{(J_r + J_\theta + J_\phi)^2}, \quad (2.65)$$

den gesamten Bahndrehimpuls

$$L = \frac{J_\theta + J_\phi}{2\pi}$$

sowie dessen äquatoriale Komponente

$$L_\phi = \frac{J_\phi}{2\pi}.$$

Wegen $E < 0$ bewegt sich das Teilchen auf Ellipsen; in deren einem Brennpunkt befindet sich der Atomkern. Die Umkehrpunkte der Bahnen, das heißt, die Aphel- und Periheldistanz ergeben sich wie erwähnt aus der Bedingung $p_r = 0$. Das führt auf eine quadratische Gleichung mit den Lösungen

$$r_{\max} = \frac{k}{-2E} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{2L^2 E}{m_e k^2}} \right), \quad r_{\min} = \frac{k}{-2E} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{2L^2 E}{m_e k^2}} \right).$$

Daraus folgt für die große Halbachse

$$a = \frac{r_{\max} + r_{\min}}{2} = \frac{k}{-2E} = \frac{(J_r + J_\theta + J_\phi)^2}{4\pi^2 m_e k^2},$$

für die numerische Exzentrizität

$$\varepsilon = \frac{r_{\max} - r_{\min}}{r_{\max} + r_{\min}} = \sqrt{1 + \frac{2L^2 E}{m_e k^2}} = \sqrt{1 - \frac{(J_\theta + J_\phi)^2}{(J_r + J_\theta + J_\phi)^2}},$$

und für die kleine Halbachse

$$b = a \sqrt{1 - \varepsilon^2} = \frac{(J_\theta + J_\phi)(J_r + J_\theta + J_\phi)}{4\pi^2 m_e k}.$$

Für den Neigungswinkel der Bahnen gegen die Äquatorebene gilt

$$\cos \alpha = \frac{L_\phi}{L} = \frac{J_\phi}{J_\theta + J_\phi}.$$

Die Umlauffrequenzen der verallgemeinerten Koordinaten können durch partielle Ableitung der Hamiltonfunktion nach den entsprechenden Wirkungsvariablen berechnet werden. Da ge-

geschlossene Bahnen vorliegen, müssen alle drei Frequenzen gleich sein. Man sagt, die Bewegung ist vollständig *entartet*⁷³. Entsprechend erhält man dabei

$$\nu = \frac{\partial H}{\partial J_r} = \frac{\partial H}{\partial J_\theta} = \frac{\partial H}{\partial J_\phi} = \frac{4\pi^2 m_e k^2}{(J_r + J_\theta + J_\phi)^3} \quad (2.66)$$

als einzige Frequenz⁷⁴. Als gemeinsame Winkelvariable schließlich ergibt sich

$$w_r = w_\theta = w_\phi = w = \nu t + \beta,$$

wobei die Konstante β durch die Anfangsbedingungen festzulegen ist.

Das Auftreten von Entartung legt die Vermutung nahe, daß J_r , J_θ , J_ϕ und w_r , w_θ , w_ϕ noch nicht die dem System am besten angepaßten Wirkungs- und Winkelvariablen sind. In der Tat erhält man mit den neuen Variablen

$$w_1 = w_\phi - w_\theta, \quad w_2 = w_\theta - w_r, \quad w_3 = w_r$$

und

$$J_1 = J_\phi, \quad J_2 = J_\phi + J_\theta, \quad J_3 = J_\theta + J_\phi + J_r$$

ein nicht entartetes System mit den Frequenzen $\nu_1 = \nu_2 = 0$ und $\nu_3 = \nu$. Der Übergang zu diesen neuen Variablen erfolgt über eine kanonische Transformation⁷⁵, beispielsweise mit der erzeugenden Funktion

$$F = (w_\phi - w_\theta) J_1 + (w_\theta - w_r) J_2 + w_r J_3.$$

Man nennt die Variablen J_1 , J_2 , J_3 und w_1 , w_2 , w_3 die *Delaunayschen Elemente* der Bahn⁷⁶. Sie lassen sich anschaulich als spezielle Drehimpulse und Winkel interpretieren. $J_1/2\pi$ ist die z -Komponente des Drehimpulses, $J_2/2\pi$ der Betrag des Drehimpulses und $J_3 = J_1 + J_2$ deren Summe; $2\pi w_1$ ist der Winkel zwischen der Schnittgerade der Bahnebene mit der xy -Ebene des verwendeten Koordinatensystems, der sogenannten Knotenlinie, und der x -Achse, $2\pi w_2$ der Winkelabstand des Perihels von der Knotenlinie, und $2\pi w_3$ derjenige eines gedachten, gleichförmig das Zentrum umlaufenden und gleichzeitig mit dem Teilchen das Perihel passierenden Punktes vom Perihel. Damit beschreiben J_1/J_2 und w_1 , w_2 die räumliche Lage der Bahnebene⁷⁷, und J_3 und w_3 sind die eigentlichen Wirkungs- und Winkelvariablen der Bewegung des Teilchens⁷⁸.

Der Übergang zur Quantentheorie erfolgt nun gemäß (2.54) durch Einführung der Quantisierungsbedingungen

$$\oint p_r dr = n_r h, \quad n_r \in \mathbb{N}$$

⁷³In einem beliebigen Zentralpotential ist die Bewegung eines Teilchens immer mindestens einfach entartet, da J_θ und J_ϕ unabhängig von dessen genauer Form in H stets in der Kombination $J_\theta + J_\phi$ auftauchen. Die dreifache Entartung beim $1/r^2$ -Potential wird dadurch verursacht, daß in diesem Fall alle drei Wirkungsvariablen in H nur in der Form $J_r + J_\theta + J_\phi$ vorkommen.

⁷⁴Einsetzen von (2.65) in (2.66) liefert für die Umlaufzeiten

$$\tau^2 = \frac{\pi^2 k^2 m_e}{-2E^3} = \frac{4\pi^2 a^3}{k}$$

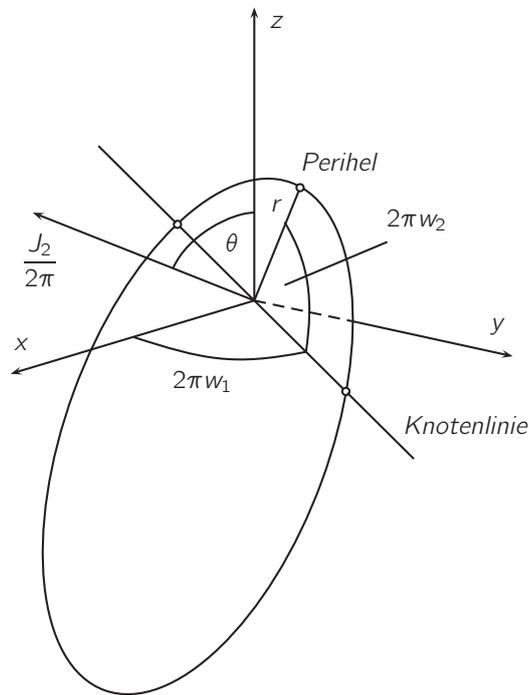


Abbildung 2.3: Zur räumlichen Interpretation der Delaunayschen Elemente

für den radialen Impuls,

$$\oint p_\theta d\theta = n_\theta h, \quad n_\theta \in \mathbb{N}$$

für den azimuthalen Impuls und

$$\oint p_\phi d\phi = m h, \quad m \in \mathbb{N}$$

für den polaren Impuls. Mit (2.61) folgt daraus für den Gesamtbahndrehimpuls ebenfalls eine Quantisierungsbedingung

$$\oint p_\alpha d\alpha = l h$$

und damit das dritte Keplersche Gesetz.

⁷⁵Siehe Abschnitt 1.1.2.4.

⁷⁶Siehe dazu beispielsweise [135] (andere Notation!) und [338].

⁷⁷Sie entsprechen den sogenannten *Eulerschen Winkeln*.

⁷⁸Die Delaunayschen Bahnelemente sind insbesondere in der Astronomie von großer Bedeutung, weil sich mit ihrer Hilfe im Rahmen der astronomischen Störungstheorie der Einfluß von anderen Objekten auf Bahnen von Himmelskörpern besonders geschickt berechnen läßt. Für exakte Kepler-Bewegungen sind alle Delaunayschen Elemente mit Ausnahme von w_3 konstant, liegt dagegen eine Störung und damit eine Abweichung von den Kepler-Bahnen vor, führt das oft zu langsamen zeitlichen Veränderungen dieser Variablen, die dann näherungsweise berechnet werden können.

mit $l \equiv n_\theta + m \in \mathbb{N}$.

Mit den Resultaten der ausgewerteten Umlaufintegrale erhält man einerseits

$$L_\phi = m \frac{h}{2\pi},$$

$$L_\theta = n_\theta \frac{h}{2\pi}$$

$$L = l \frac{h}{2\pi},$$

also die *Quantisierung des Drehimpulses*, und andererseits unter Verwendung von $k = Ze^2$

$$E = -\frac{2\pi^2 Z^2 m_e e^4}{h^2 (n_r + n_\theta + m)^2}$$

und damit die Quantisierung der Energie. Führt man mit $n = n_r + n_\theta + m = n_r + l \in \mathbb{N}^*$ die Hauptquantenzahl wieder ein, ergibt sich

$$E = -\frac{2\pi^2 Z^2 m_e e^4}{h^2 n^2}$$

und damit genau die Balmer-Formel (2.49). Da jedes n auf n unterschiedliche Weisen aus den anderen Quantenzahlen zusammgebaut werden kann, liegt jeweils eine n -fache Entartung des n -ten Niveaus vor.

Die üblichen Quantenzahlen n , l und m kann man auch direkt erhalten, indem man anstelle der oben verwendeten Wirkungs- und Winkelvariablen zur Quantisierung die Delaunayschen Elemente verwendet. Aus den Quantisierungsbedingungen

$$J_1 = mh, \quad J_2 = lh, \quad J_3 = nh$$

folgen dann direkt die Quantisierung der z -Komponente des Drehimpulses,

$$L_z = m \frac{h}{2\pi},$$

des Betrags des Drehimpulses,

$$L = l \frac{h}{2\pi},$$

sowie der Energie,

$$E = -\frac{2\pi^2 Z^2 m_e e^4}{2J_3^2},$$

also die Balmerformel

$$E = -\frac{2\pi^2 Z^2 m_e e^4}{h^2 n^2}.$$

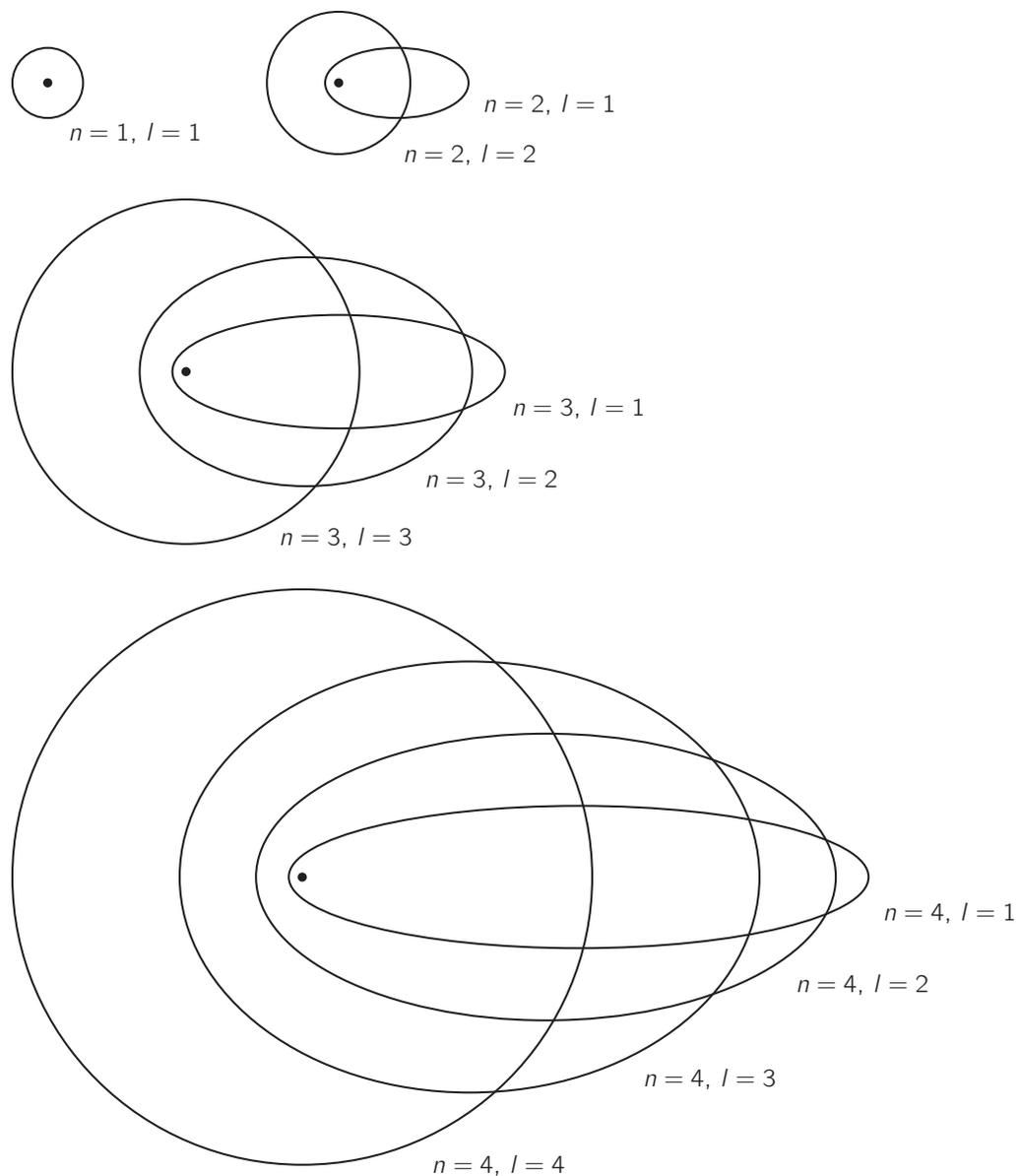


Abbildung 2.4: Elliptische Bahnen des Elektrons im Sommerfeldschen Atommodell für $n = 1, 2, 3, 4$ (Darstellung nicht maßstäblich)

Aus den Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsbedingungen für den radialen Impuls und den gesamten Bahndrehimpuls ergeben sich für die Bahn-Ellipsen des Elektrons in der Atomhülle folgende Bahneigenschaften:

$$\text{Große Halbachse: } a_n = \frac{\hbar^2 n^2}{Z m_e e^2}$$

$$\text{Kleine Halbachse: } b_{nl} = \frac{\hbar^2 nl}{Z m_e e^2}$$

$$\text{Exzentrizität: } \varepsilon_{nl} = \sqrt{1 - \frac{l^2}{n^2}}.$$

Die möglichen Werte der hierbei auftretenden Quantenzahlen sind damit $n = 1, 2, \dots$ beziehungsweise $l = 1, 2, \dots, n$. Den Fall $l = 0$ schloß Sommerfeld aus, weil das eine im Rahmen seines Modells unphysikalische Bewegung des Elektrons auf einer geraden Linie durch den Atomkern bedeuten würde⁷⁹. Dabei gehören zu jedem n elliptische Bahnen mit gleichen Hauptachsen, aber verschiedenen Nebenachsen; diese werden durch l festgelegt. Je größer n , desto größer ist die Ellipse, je größer l , desto weniger exzentrisch ist sie, bis schließlich für $n = l$ ein Kreis herauskommt. Die Quantisierungsbedingung für den polaren Impuls bewirkt, daß die Bahn-Ellipsen nicht beliebig räumlich geneigt sein können, sondern der Neigungswinkel α quantisiert ist, ein Sachverhalt, der als „Raumquantisierung“ bezeichnet wird. Genauer gesagt gilt gemessen zu einer in physikalischer Weise irgendwie ausgezeichneten Polachse, die beispielsweise durch ein äußeres Magnetfeld festgelegt werden kann,

$$\cos \alpha = \frac{m}{l}.$$

Die Projektionen der Bahnellipsen auf die äquatoriale Ebene sind ebenfalls Ellipsen mit den selben großen Halbachsen und kleinen Halbachsen vom Betrag

$$b_{nm} = \frac{\hbar^2 nm}{Z m_e e^2}.$$

Folglich kann die Quantenzahl m die Werte $m = -l, -l + 1, \dots, l$ annehmen, womit sich eine weitere $2l + 1$ -fache Entartung jedes Energieniveaus und insgesamt zu jedem n der Entartungsgrad

$$d_n = \sum_{l=1}^n \sum_{m=-l}^l 1 = \sum_{l=1}^n (2l + 1) = n^2$$

ergibt. l heißt aus naheliegenden Gründen *Drehimpulsquantenzahl* oder auch *Nebenquantenzahl*, m aus noch zu diskutierenden Gründen *magnetische Quantenzahl*.

Das entsprach bekanntlich noch nicht den experimentellen Resultaten, wie die schon zur damaligen Zeit bekannte Feinstruktur der Energieniveaus wasserstoffähnlicher Atome un-

⁷⁹Daß und warum dieser Fall quantenmechanisch dennoch erlaubt ist, werden wir weiter unten sehen.

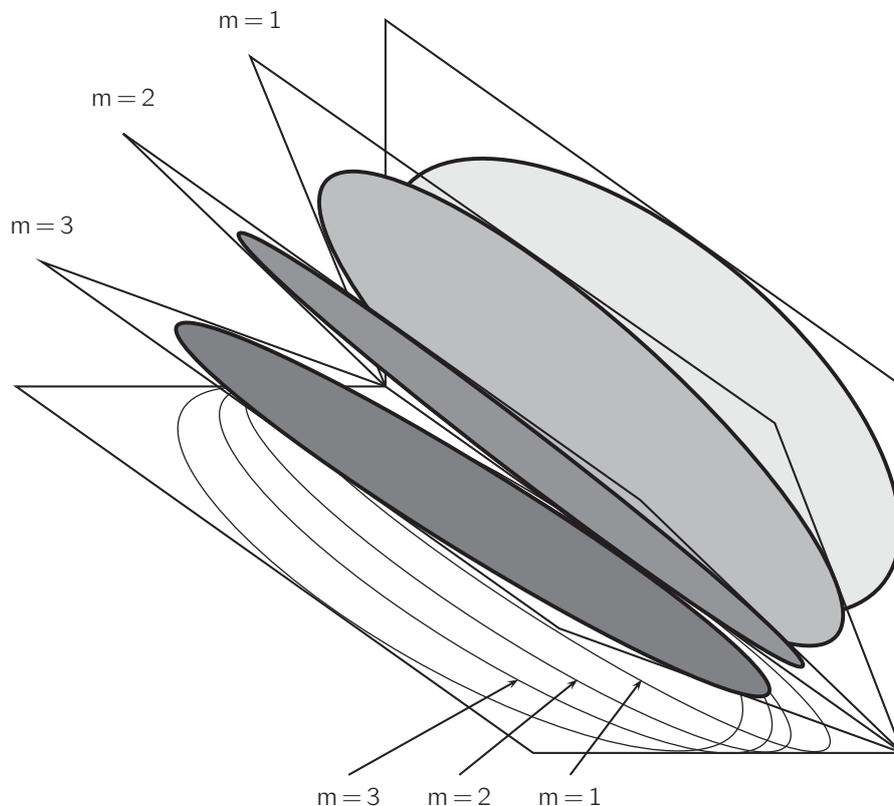


Abbildung 2.5: Unterschiedliche räumliche Orientierungen der Umlaufbahnen für $l = 3$ und zugehörige Projektionen in die Äquatorebene

zweifelhaft belegt. Die somit erforderliche Aufhebung der l - und m -Entartung erfolgt in Sommerfelds Atommodell durch Berücksichtigung der relativistischen Massenänderung

$$m_e(v) = \frac{m_e}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

des Elektrons bei verschiedenen Geschwindigkeiten, was sich dadurch rechtfertigt, daß die Geschwindigkeiten eines Elektrons auf den Bahnen dieses Modells keineswegs klein gegenüber der Lichtgeschwindigkeit sind. Entsprechend ist die nichtrelativistische Hamiltonfunktion (2.55) durch die relativistische Version

$$H = [m_e(v) - m_e] c^2 - \frac{k}{r}$$

zu ersetzen. Da die Erhaltung des Gesamtdrehimpulses, die auch relativistisch richtig bleibt, stets zu ebenen Bahnen führt, genügt es im folgenden, mit ebenen Polarkoordinaten r, ϕ zu rechnen, in denen

$$v^2 = \dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2,$$

gilt, oder bei Einführung der relativistischen Impulse $p_r = m_e(v)\dot{r}$ und $p_\phi = m_e(v)r\dot{\phi}$,

$$v^2 = \frac{1}{m_e^2(v)} \left(p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2} \right). \quad (2.67)$$

Man beachte dabei, daß p_ϕ in diesen Koordinaten der Gesamtimpuls ist. Die Hamiltonfunktion lautet nun

$$H = [m_e(v) - m_e] c^2 - \frac{k}{r} = \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} - 1 \right) m_e c^2 - \frac{k}{r}, \quad (2.68)$$

mit $\beta \equiv v/c$. Auch die hieraus folgenden Bewegungsgleichungen können direkt integriert werden⁸⁰ und liefern die Bahngleichung

$$r = \frac{1}{\frac{1}{r_0} \cos[\gamma(\phi - \phi_0)] + \Lambda}, \quad (2.69)$$

mit

$$\gamma = 1 - \frac{k^2}{p_\phi^2 c^2}$$

und

$$\Lambda = \frac{k m_e}{p_\phi^2 \gamma^2} \left(1 + \frac{E}{m_e c^2} \right).$$

Der Faktor γ im Nenner von (2.69) bewirkt eine Periheldrehung um

$$\Delta\phi = 2\pi \left(\frac{1 - \gamma}{\gamma} \right)$$

und damit eine Rosettenbewegung des Elektrons bei seiner Bewegung um den Atomkern⁸¹.

Um vernünftige Wirkungsvariablen zu erhalten, lassen wir nun das Koordinatensystem mit dem Perihel mitpräzedieren. Das erreichen wir durch Übergang von r, ϕ zu r, ψ mit dem neuen Winkel $\psi = \gamma\phi$. Außerdem brauchen wir dazu den radialen Impuls p_r , den wir aus der Hamiltonfunktion (2.68) erhalten. Eine einfache Umformung ergibt zunächst

$$\left[1 + \frac{1}{m_e c^2} \left(H + \frac{k}{r} \right) \right]^2 = \frac{1}{1 - \beta^2} = 1 + \frac{\beta^2}{1 - \beta^2}.$$

Mit der aus (2.67) folgenden Relation

$$\frac{\beta^2}{1 - \beta^2} = \frac{1}{m_e^2 c^2} \left(p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2} \right)$$

wird daraus

$$\left[1 + \frac{1}{m_e c^2} \left(H + \frac{k}{r} \right) \right]^2 = 1 + \frac{1}{m_e^2 c^2} \left(p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2} \right),$$

⁸⁰Siehe zum Beispiel [257].

⁸¹Für $c \rightarrow \infty$ geht das relativistische Problem in das nichtrelativistische über.

was sich leicht nach p_r auflösen läßt. Unter Berücksichtigung von $H = E$ sowie $p_\psi = m_e(v)r\dot{\psi}$ lautet das Resultat

$$p_r = \sqrt{2m_e E + \frac{1}{c^2} \left[E^2 + \frac{k(m_e c^2 + E)}{r} + \frac{k^2 - p_\psi^2 c^2}{r^2} \right]}.$$

Wir erhalten damit die Winkelvariablen

$$J_\psi = \oint p_\psi d\psi, \quad (2.70)$$

$$J_r = \oint p_r dr = \oint \sqrt{2m_e E + \frac{1}{c^2} \left[E^2 + \frac{k(m_e c^2 + E)}{r} + \frac{k^2 - p_\psi^2 c^2}{r^2} \right]} dr. \quad (2.71)$$

Die Berechnung der beiden Integrale macht keinerlei Schwierigkeiten. Einerseits ist p_ψ eine Konstante der Bewegung, und für (2.70) folgt

$$J_\psi = p_\psi \oint d\psi = 2\pi p_\psi,$$

andererseits ist (2.71) von der Form

$$J_r = \oint \sqrt{A + \frac{2B}{r} - \frac{C}{r^2}} dr$$

mit

$$A = 2m_e E + \frac{E^2}{c^2}, \quad B = km_e + \frac{kE}{c^2}, \quad C = p_\psi^2 - \frac{k^2}{c^2},$$

also völlig analog zu (2.63) aufgebaut⁸². Damit kann das obige Resultat direkt übernommen werden, und es ergibt sich

$$J_r = 2\pi i \left(\sqrt{\frac{k^2}{c^2} - p_\psi^2} + \frac{km_e + \frac{kE}{c^2}}{\sqrt{2m_e E + \frac{E^2}{c^2}}} \right).$$

Wiederum erfolgt der Übergang zur Quantenmechanik durch Einführung der Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsregeln

$$\oint p_r dr = n_r h, \quad n_r \in \mathbb{N},$$

$$\oint p_\psi d\psi = l h, \quad l \in \mathbb{N}.$$

⁸²Für $c \rightarrow \infty$ geht (2.71) in (2.63) über.

Daraus folgt wieder einerseits mit

$$p_\psi = l \frac{h}{2\pi}$$

die Quantisierung des Drehimpulses und andererseits für die Gesamtenergie des Elektrons

$$E = m_e c^2 \left\{ \left[1 + \frac{k^2}{\hbar^2 c^2 (n_r + \sqrt{l^2 - k^2/\hbar^2 c^2})^2} \right]^{-1/2} - 1 \right\}.$$

Mit der Hauptquantenzahl $n = n_r + l$ wird daraus

$$E_{nl} = m_e c^2 \left\{ \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{(n - l + \sqrt{l^2 - \alpha^2})^2} \right]^{-1/2} - 1 \right\}; \quad (2.72)$$

dabei ist α die sogenannte *Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante*,

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}, \quad \frac{1}{\alpha} \approx 137,03599976.$$

Gleichung (2.72) liefert numerische Ergebnisse, die äußerst genau mit den experimentellen Resultaten übereinstimmen⁸³. Insbesondere erklärt sie auch die Aufhebung der l -Entartung.

Besonders übersichtlich wird die Situation auch hier wieder bei Verwendung der Delaunayschen Elemente, bei welchen sich die l -Entartung wie gesehen in der zeitlichen Konstanz von zwei der drei Winkelvariablen bemerkbar macht; diese Entartung wird durch das Auftreten einer Störung wie beispielsweise der Bewegung des Elektrons in einem beliebigen anderen Zentralfeld oder von dessen oben betrachteten relativistischen Massenzunahme teilweise aufgehoben. Damit wird zusätzlich zu w_3 auch w_2 zeitlich veränderlich, und da diese Variable den Winkelabstand des Perihels zur Knotenlinie der Bahn beschreibt, bedeutet das eine Periheldrehung⁸⁴. Gleichzeitig wird neben J_3 auch J_2 zu einer eigentlichen Wirkungsvariablen, sodaß die Energie des Teilchens von diesen beiden Wirkungsvariablen abhängt. Das resultiert in der beschriebenen Feinstruktur der Energieniveaus des Wasserstoffatoms. Es verbleibt eine weitere Entartung, nämlich diejenige der Energieniveaus mit gleichen n und l , aber unterschiedlichem m . Diese Entartung tritt auch in der relativistischen Theorie auf; sie kann jedoch beispielsweise durch Anlegen eines äußeren Magnetfelds aufgehoben werden, wodurch nun auch w_1 zeitlich veränderlich wird. Folglich verändert sich auch der dadurch beschriebene Winkel zwischen Knotenlinie und x -Achse, was sich in einer Präzession der Bahnebene um die z -Achse äußert. Man spricht hier auch von *Larmor-Präzession*. Die Energie ist nun von J_1, J_2 und J_3 und damit auch von m abhängig. Die folglich zu beobachtende zusätzliche Aufspaltung der Energieniveaus wird als *Zeeman-Effekt* bezeichnet. Wir kommen darauf zurück.

⁸³Siehe zum Beispiel [664].

⁸⁴Berechnet man auf diese Weise die Periheldrehung des Planeten Merkur, so wird das Ergebnis durch die Realität um 43" pro Jahrhundert übertroffen. Die Erklärung dieser anormalen Periheldrehung durch die Allgemeine Relativitätstheorie stellte einen ihrer ersten großen Triumphe dar.

Entwickelt man E_{nl} nach Ordnungen von α , ergibt sich

$$E_{nl} = -\frac{Z^2 m_e e^4}{2\hbar^2 n^2} \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{l} - \frac{3}{4} \right) + \text{höhere Korrekturterme} \right].$$

Man sieht daran, daß die Bohrsche und die Sommerfeldsche Theorie in niedrigster Ordnung übereinstimmen und letztere zu ersterer Korrekturen hinzufügt, die aufgrund des Zahlenwertes von α mit zunehmender Ordnung schnell kleiner werden.

Schon beim einfachen Bohrschen Atommodell stellt man sich die Frage, wo die akkuraten Resultate herkommen; diese erfahren durch die 13 Jahre später veröffentlichte Schrödingergleichung und das durch sie beschriebene wellenmechanische Modell der neueren Quantenmechanik keinerlei Korrekturen. Das gilt sogar in verschärfter Form auch für das Sommerfeldsche Atommodell; die Formel (2.72) ist nicht nur aufgrund ihrer sehr genauen Übereinstimmung mit den experimentellen Resultaten bemerkenswert, sondern vor allen Dingen auch, weil sie mit dem entsprechenden, erst 1928 entdeckten aus der Dirac-Gleichung abzuleitenden relativistisch und quantenmechanisch korrekten Ergebnis formal nahezu und numerisch exakt übereinstimmt und dieses dadurch praktisch vorwegnimmt. Das ist auf den ersten Blick überaus erstaunlich, da bestimmte spezifisch quantenmechanische Eigenschaften des Drehimpulses vom Sommerfeldschen Atommodell nicht erfaßt werden. Erstens ist die Beschreibung des Bahndrehimpulses L nicht korrekt. Zweitens ist einer der entscheidenden durch die Dirac-Gleichung eingeführten Fortschritte die automatische Miteinbeziehung des Spins. Dieser ist im wesentlichen für die Abweichungen in den Spektren wasserstoffähnlicher Atome verantwortlich, die unter dem Begriff der Feinstruktur zusammengefaßt werden. Sommerfeld konnte jedoch von beidem noch nichts wissen, und es scheint ein unerklärlicher Zufall zu sein, daß er dennoch solch gute numerische Resultate erzielte. Wie man inzwischen weiß, ist das nicht nur Zufall; Bucher [132], [133], [134] und Keppeler [493], [494] konnten zeigen, daß jeweils physikalische Sachverhalte dahinterstecken.

Das Drehimpuls-Problem besteht darin, daß sich bei Sommerfeld $L^2 = l^2 \hbar^2$ und $l = 1, 2, \dots, n$ ergibt, während die quantenmechanisch korrekten und experimentell bestätigten Resultate $L^2 = l(l+1)\hbar^2$ und $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ lauten. Diese Diskrepanz entstand zum einen, weil Sommerfeld wie erwähnt den Fall $l = 0$ als unphysikalisch ausschloß. Gemäß einer Idee von Bucher kann man diesen Fall dennoch in das Sommerfeldsche Atommodell einbauen, wenn man annimmt, daß das Elektron eine Schwingungsbewegung ausüben kann, die durch den Kern führt („Coulomb-Oszillator“)⁸⁵. Zum anderen liefert die Addition der beiden räumlichen Drehimpulswirkungsvariablen nur in der klassischen Physik diejenige des Gesamtdrehimpulses, und auch dort nur aufgrund der Entartung der Bewegung. Ersetzt man die fehlerhafte Relation für das Quadrat des Gesamtdrehimpulses durch die richtige, dann verändern sich auch die kleinen Halbachsen der Bahnellipsen, genauer gesagt werden sie größer, wie die nunmehr gültige Formel

⁸⁵Zusätzlich liefert das so modifizierte Sommerfeldsche Atommodell sehr viel bessere Resultate beim Berechnen der Bindungsenergie des Wasserstoffmoleküls [132] und der Grundzustandsenergie von Helium [133].

$$b_{nl} = \frac{\hbar^2 n \sqrt{l(l+1)}}{Z m_e e^2}$$

zeigt. Das hat entscheidende Konsequenzen; insbesondere muß nun in Übereinstimmung mit der Erfahrung $l < n$ und damit $l = 0, 1, \dots, n-1$ gelten, außerdem sind keine Bahnen in der Äquatorebene mehr möglich. In die relativistische Beschreibung läßt sich das einbauen, indem man in (2.72) die beiden Quantenzahlen $n_r = n - l$ und l gegeneinander vertauscht [134]. Man erhält

$$E_{nl} = m_e c^2 \left\{ \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{(l + \sqrt{(n-l)^2 - \alpha^2})^2} \right]^{-1/2} - 1 \right\}$$

und damit eine Formel, die genau dieselben Energiewerte liefert wie (2.72), aber die erwähnten Probleme nicht aufweist. Die beiden Fehler im Zusammenhang mit dem Bahndrehimpuls heben sich also gerade gegenseitig auf.

Eine ähnliche Beobachtung läßt sich für den Elektronenspin machen. Grundlage hierfür ist die bereits 1917 von Einstein angegebene geometrische Deutung der Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsbedingungen [247]⁸⁶. Integrierte Systeme mit d Freiheitsgraden bewegen sich in ihren $2d$ -dimensionalen Phasenräumen auf d -dimensionalen Untermannigfaltigkeiten, welche die topologische Struktur eines Torus haben und durch die d Anfangsbedingungen des Systems festgelegt werden; ein integriertes System kann seinen Torus im Phasenraum nicht verlassen. Auf diesem Torus lassen sich die Quantisierungsbedingungen (2.54) gemeinsam in Form einer Summe schreiben und lauten dann

$$\sum_{j=1}^d \oint p_j dq_j \equiv \oint \vec{p} d\vec{q} = 2\pi \hbar n, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (2.73)$$

Das so formulierte geschlossene Kurvenintegral ist auf dem entsprechenden Torus wegunabhängig. (2.73) stellt die allgemeinste Formulierung der Bohr-Sommerfeld-Quantisierung dar. Eine Präzisierung läßt sich gewissermaßen nur von oben nach unten erreichen, indem man ausgehend von der Schrödingergleichung eine sogenannte *WKB-Näherung*⁸⁷ durchführt und dabei wieder bei den Bohr-Sommerfeld-Regeln landet, allerdings mit einer kleinen Änderung. Diese wird durch Phasensprünge verursacht, welche die betrachtete Wellenfunktion an jedem klassischen Umkehrpunkt des Systems macht; die Anzahl μ dieser Umkehrpunkte heißt

⁸⁶In diesem Zusammenhang konnte er auch deren Koordinatenunabhängigkeit beweisen.

⁸⁷Die Abkürzung steht für Wenzel, Kramers und Brillouin, die das Verfahren entwickelt haben [120], [513], [919]. Tatsächlich ist dieses sehr viel älter, wovon die drei Namensgeber keine Kenntnis hatten; Arbeiten, in welchen im wesentlichen dieselbe Technik verwendet wird, erschienen 1817 von Carlini [148], [149], 1837 von Green [353] und Liouville [551], 1912 von Rayleigh [728], 1915 von Gans [313] und 1924 besonders ausführlich und allgemein von Jeffreys [471].

Maslov-Index der entsprechenden Bahn im Phasenraum und taucht, wie Keller 1958 zeigen konnte [491], bei den Quantisierungsregeln gemäß

$$\oint \vec{p} d\vec{q} = 2\pi h \left(n + \frac{\mu}{4} \right), \quad n \in \mathbb{N}$$

auf, also in Form einer Verschiebung der Energieeigenwerte. Im Fall wasserstoffähnlicher Atome gibt es insgesamt vier klassische Umkehrpunkte, je zwei für die radiale Bewegung und den Drehimpuls. Der zugehörige Maslov-Index hat also den Wert 4, was die Eigenwerte zunächst um 1 verschiebt. Andererseits ist jetzt aufgrund der genau wie die radialen Eigenwerte für sich allein ebenfalls verschobenen Drehimpulseigenwerte der Fall $l = 0$ nicht mehr verboten. Die beiden Effekte heben sich gerade auf, und das Energiespektrum ist damit dasselbe, das sich auch beim Bohrschen Modell schon ergibt.

Für das Sommerfeldsche Modell ist die Sachlage etwas komplizierter, da hier der Spin in die halbklassische Beschreibung miteinbezogen werden muß. Die hierfür erforderliche Verallgemeinerung der WKB-Methode auf die Dirac-Gleichung wurde 1932 von Pauli entwickelt [678] und 1963 von Rubinov und Keller weiter ausgebaut [747]. Geometrisch gesehen wird dabei an jeden Punkt des Torus im Phasenraum, der die gewöhnliche Dynamik des Systems beherbergt, eine Sphäre geheftet, auf der sich die zusätzliche Spindynamik abspielt. Legt man eine bestimmte Vorzugsrichtung fest, beispielsweise durch Anlegen eines äußeren Magnetfelds, so zeigt sich, daß der Spinvektor zu dieser Richtung stets im selben Winkel orientiert ist, was man sich mit Hilfe eines festen Breitenkreises vorstellen kann, der auf allen angehefteten Kugeloberflächen derselbe ist und auf den der Spinvektor zeigt; nach Durchlaufen irgendeiner geschlossenen Kurve auf dem Torus zeigt der Spin jedoch auf eine andere Stelle des Breitenkreises als zuvor, das heißt, er hat sich auf diesem um einen bestimmten Winkel α gedreht. Man sagt, bei dem System ist eine *geometrische Phase* aufgetreten⁸⁸. Die Wirkung dieser geometrischen Phase bei einem System mit Spin $s\hbar/2$ ist unter anderem das Auftreten einer weiteren Änderung der Quantisierungsbedingung; diese lautet nun

$$\oint \vec{p} d\vec{q} = 2\pi h \left(n + \frac{\mu}{4} + m \frac{\alpha}{2\pi} \right), \quad m = -s, -s + 1, \dots, s, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Für wasserstoffähnliche Atome mit Elektronenspin $\hbar/2$ kann man zeigen, daß sich der Beitrag der Maslov-Indizes und derjenige der geometrischen Phase stets zu einer ganzen Zahl addieren [493], [494]. Damit ergeben sich die selben Energieeigenwerte wie beim Bohr-Sommerfeld-Modell einschließlich des Verbots von $l = 0$. Auch hier heben sich zwei Unvollständigkeiten also gegenseitig auf. Anders ausgedrückt: Die ältere Quantenmechanik konnte deshalb so nahezu perfekte Ergebnisse liefern, weil sich bei wasserstoffähnlichen Atomen in zweifacher Weise je zwei zur damaligen Zeit noch unbekannte Effekte gerade kompensieren.

⁸⁸Geometrische Phasen werden auch topologische Phasen oder Berry-Phasen genannt, letzteres nach ihrem Entdecker M. V. Berry [58]. Wie sich schnell zeigte und auch weiterhin zeigt, sind sie in sehr vielen Bereichen der Quantenmechanik von Bedeutung; erschöpfend Auskunft darüber erteilen beispielsweise [55], [157] und [812].

Auch wenn die Vorhersagen des Bohr-Sommerfeldschen Atommodells, was Frequenzen und Energien betrifft, für wasserstoffähnliche Atome hervorragend sind, kam es doch aufgrund seiner sehr eng gesteckten Grenzen über die Phase eines vorläufigen Ad-Hoc-Modells nicht hinaus. Schon für Atome und Ionen mit zwei oder mehr Elektronen liefert das Modell unrichtige Ergebnisse, die magnetischen Eigenschaften der Atome können nicht korrekt beschrieben werden, und es macht keine Aussagen über Intensitäten und zeitliche Abläufe der Emissionen und Absorptionen. Dazu kommt das Problem von beim Bohrschen Atommodell ausschließlich und beim Bohr-Sommerfeldschen Atommodell teilweise flacher scheibenförmiger Atome, was in klarem Gegensatz zur Beobachtung steht. Noch schwerwiegender sind die konzeptionellen Probleme. Die klassische Mechanik wird je nachdem, wie es gerade praktisch ist, außer Kraft gesetzt oder zu Berechnungen herangezogen. Außerdem ist die Vorstellung von Elektronen, die sich in der Atomhülle *auf Bahnen bewegen*, völlig unhaltbar, wie wir bereits gesehen haben und weiter unten noch deutlicher sehen werden. Mit der Entwicklung der neueren Quantentheorie in den späten 20er Jahren, wie sie in den folgenden Abschnitten vorgestellt wird, konnte die Beschreibung der Atome dann auf wesentlich stabilere Beine gestellt werden, wenn auch die wirklich vollständige Lösung dieses Problems noch eine Zeit lang auf sich warten ließ und erst im Rahmen der Quantenelektrodynamik gelang.

Läßt man es bei der soeben formulierten kritischen Beurteilung bewenden, wird man der Sache jedoch nicht wirklich gerecht. Das Bohr-Sommerfeldsche Atommodell bleibt ein Meilenstein auf dem Weg zur Entwicklung der Quantenmechanik, die ihm zugrundeliegende Bohr-Sommerfeld-Quantisierung ist jedoch mehr als das. Ihre Bedeutung liegt, wie sich erst später herausstellte, in ihrer Fähigkeit, jedes klassische integrable System formal zu quantisieren und in Verbindung damit insbesondere in der Ermöglichung, Systeme auf dem Grenzgebiet zwischen klassischer Physik und Quantenmechanik halbklassisch zu beschreiben. Das hat sich inzwischen zu einem eigenständigen Gebiet der theoretischen Physik entwickelt⁸⁹.

2.5 Die Anfänge der Quantenstatistik

Der letzte Abschnitt der älteren Quantentheorie spielt sich bereits zeitgleich mit den Anfängen der neueren ab. Entsprechend ist die Zuordnung hier nicht mehr ganz so eindeutig; während die Methoden ganz klar zur ersteren gehören, weisen die dabei erzielten Resultate weit über den Beginn der letzteren hinaus, erkennbar unter anderem daran, daß der experimentelle Nachweis eines der zentralen Ergebnisse erstmals 70 Jahre nach dessen theoretischer Voraussage gelang.

2.5.1 Die Bose-Einstein-Statistik

In Abschnitt 2.1.3 diskutierten wir mehrere Ableitungen der Planckschen Strahlungsformel, die aus der Kritik am Originalzugang ihres Entdeckers hervorgegangen sind. Auch wenn dabei wesentliche Schwachpunkte beseitigt werden konnten, blieb ein wesentlicher Mangel bestehen.

⁸⁹Siehe beispielsweise [364] und [494].

Fast alle frühen Ableitungen der Planckschen Formel einschließlich der drei oben beschriebenen verwenden zur Herleitung der Relation

$$dN(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} V d\nu \quad (2.74)$$

für die Anzahl der Zustände, Moden oder was auch immer, die sich im Frequenzintervall $[\nu, \nu + d\nu]$ befinden, die klassische Maxwell'sche Elektrodynamik, womit von einer rein quantenmechanischen Vorgehensweise nicht gesprochen werden kann. Ausnahmen davon findet man lediglich bei Władysław Natanson [641] sowie bei Paul und Tatjana Ehrenfest [231], deren Arbeiten jedoch nicht die ihnen gebührende Beachtung fanden. Sie stellten 1911 unabhängig voneinander fest, daß die von Planck ohne physikalische Begründung verwendete Zählweise der möglichen Verteilung von Energieelementen auf die den betrachteten schwarzen Körper modellierenden Oszillatoren sämtliche Energieelemente gleichbehandelt; daher interpretierten sie dieses Abzählverfahren als eines für *ununterscheidbare Teilchen* und gelangten so im Rahmen eines reinen Partikelbildes zum Planckschen Resultat, ohne Rückgriff auf irgendwelche, etwa Maxwell'sche klassische Wellen.

Diese Erkenntnis wurde, wiederum unabhängig von ihren Vorläufern, erst zwölf Jahre später durch den indischen Physiker Satyendra Nath Bose wiederentdeckt. 1923 reichte dieser eine Arbeit beim *Philosophical Magazine* ein, in der er eine in der eben angedeuteten Weise ohne jeden Bezug auf klassische Physik auskommende Ableitung der Planckschen Strahlungsformel präsentierte. Da die Arbeit nicht angenommen wurde, schrieb er einen Brief an Albert Einstein, wobei er eine Kopie des Aufsatzes hinzufügte. Einstein erkannte die Bedeutung dieser Arbeit sofort, übersetzte sie ins Deutsche und schickte sie zusammen mit einem entsprechenden Kommentar am 2. Juli 1924 an die *Zeitschrift für Physik*, wo sie kurz danach veröffentlicht wurde [115]. Wir betrachten im folgenden stellvertretend für alle drei Entdeckungen dieses Sachverhalts Boses Zugang im Detail.

Man startet dabei wie üblich mit in einem Hohlraum des Volumens V eingeschlossener Strahlung der Gesamtenergie E , faßt diese dabei jedoch von Anfang an als *quantisiertes Strahlungsfeld* auf, das heißt als aus Quanten mit definierten diskreten Energiewerten $E_j = h\nu_j$ bestehend, wobei es jeweils N_j Stück der Quanten der Sorte mit der Frequenz ν_j gebe. Für die Gesamtenergie gilt dann

$$E = \sum_{j=0}^{\infty} N_j h\nu_j;$$

schreibt man das in der Form

$$E = V \int u(\nu) d\nu,$$

so besteht die Aufgabe darin, die hierbei auftretende spektrale Energiedichte $u(\nu)$ zu bestimmen. Dies erfolgt ebenfalls auf dem üblichen Weg durch Berechnen der thermodynamischen Wahrscheinlichkeit eines beliebigen makroskopischen Zustands und Übergang zum thermischen Gleichgewicht durch Ermittlung des wahrscheinlichsten makroskopischen Zustands.

Die Interpretation der Energiequanten als ununterscheidbare Teilchen erlaubt es nun, diesen einen Impuls $p = h\nu_j/c$ in ihrer jeweiligen Bewegungsrichtung zuzuordnen. Die räumlichen Koordinaten x, y, z und die zugehörigen Impulskomponenten p_x, p_y, p_z bilden dann die Koordinaten des momentanen Zustands eines solchen Teilchens in dessen sechsdimensionalen Phasenraum. In diesem gilt die Zwangsbedingung

$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 = \frac{h^2\nu^2}{c^2};$$

folglich bewegt sich der Phasenraumpunkt des Teilchenzustands im Phasenraum auf einer Zylinderfläche. Zum Frequenzbereich $[\nu, \nu + d\nu]$ gehört im Phasenraum der Bereich

$$\Gamma = \iiint \iiint dx dy dz dp_x dp_y dp_z = V 4\pi \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 \frac{h d\nu}{c} = \frac{4\pi h^3 \nu^2 V d\nu}{c^3}.$$

Zerlegt man Γ in Zellen des Volumens h^3 , so findet man in diesem Bereich

$$A' = \frac{4\pi\nu^2 V d\nu}{c^3}$$

solche Zellen, und wenn man zusätzlich die beiden möglichen Polarisationsrichtungen berücksichtigt, erhält man

$$A = \frac{8\pi\nu^2 V d\nu}{c^3} \quad (2.75)$$

zum Frequenzbereich $[\nu, \nu + d\nu]$ gehörende Zellen im Phasenraum. Diese Zahl ist gleichzeitig die Anzahl der möglichen Zustände eines einzelnen Teilchens im Phasenraum, und damit erhält man die thermodynamische Wahrscheinlichkeit eines makroskopischen Zustands durch Berechnung der Anzahl der möglichen Anordnungen, in denen man sämtliche Teilchen des Systems auf die q Phasenraumzellen verteilen kann.

Dazu sei ν_j eine beliebige Frequenz, außerdem p_0^j die Anzahl der leeren Zellen, p_1^j diejenige der Zellen mit einem Teilchen, p_2^j diejenige der Zellen mit zwei Teilchen, und so weiter, sodaß die gesamte Anzahl der Teilchen im Frequenzbereich $[\nu_j, \nu_j + d\nu]$ durch

$$\mathcal{N}_j = \sum_{n=0}^{\infty} n p_n^j$$

gegeben ist. Daraus folgt für die Anzahl der Phasenraumzellen in diesem Frequenzbereich

$$A_j = \sum_{n=0}^{\infty} p_n^j,$$

und die Anzahl der möglichen Verteilungen der Quanten auf die Phasenraumzellen ist dort

$$w_j = \frac{A_j!}{\prod_{n=0}^{\infty} p_n^j!}.$$

Die gesamte Anzahl der möglichen Verteilungen und damit die thermodynamische Wahrscheinlichkeit eines beliebigen makroskopischen Zustands ist entsprechend

$$W = \prod_{j=0}^{\infty} \frac{A_j!}{\prod_{n=0}^{\infty} p_n^j!}. \quad (2.76)$$

Von dieser gilt es nun das Maximum zu finden unter Berücksichtigung der Nebenbedingungen

$$E = \sum_{j=0}^{\infty} \mathcal{N}_j h\nu_j \quad (2.77)$$

und

$$\mathcal{N}_j = \sum_{n=0}^{\infty} n p_n^j, \quad j \in \mathbb{N}. \quad (2.78)$$

Da die reelle Logarithmusfunktion monoton steigend ist, kann man diese Extremwertaufgabe statt für W auch für

$$\ln W = \sum_{j=0}^{\infty} \ln(A_j!) - \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \ln(p_n^j!) \quad (2.79)$$

lösen, was die Rechnung deutlich vereinfacht. Nun verwendet man wieder die Stirlingsche Formel; diese lautet bis zur zweiten Ordnung

$$\ln(x!) \approx x \ln x - x,$$

und weil die p_n^j sehr große Zahlen sind, genügt das für die hier verfolgten Zwecke voll und ganz. Man erhält den Näherungsausdruck

$$\ln W \approx \sum_{j=0}^{\infty} (A_j \ln A_j - A_j) - \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} (p_n^j \ln p_n^j - p_n^j)$$

und nach Einführung von Lagrange-Multiplikatoren die Zielfunktion

$$\begin{aligned} f(p_n^j) &= \sum_{j=0}^{\infty} (A_j \ln A_j - A_j) - \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} (p_n^j \ln p_n^j - p_n^j) \\ &\quad + \beta \left(E - \sum_{j=0}^{\infty} \mathcal{N}_j h\nu_j \right) + \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_j \left(\mathcal{N}_j - \sum_{n=0}^{\infty} n p_n^j \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{j=0}^{\infty} A_j \ln A_j - \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} p_n^j \ln p_n^j \\
&\quad + \beta \left(E - \sum_{j=0}^{\infty} \mathcal{N}_j h\nu_j \right) + \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_j \left(\mathcal{N}_j - \sum_{n=0}^{\infty} n p_n^j \right).
\end{aligned}$$

Diese soll stationär sein; das liefert

$$\frac{\partial f}{\partial p_n^j} = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} (1 + \ln p_n^j + n\beta h\nu_j + \lambda_j) = 0$$

oder

$$\ln p_n^j = -(1 + n\beta h\nu_j + \lambda_j),$$

also

$$p_n^j = B_j e^{-n\beta h\nu_j} \quad (2.80)$$

mit $B_j = e^{-(1+\lambda_j)}$. Daraus folgt mit Hilfe der Summenformel für geometrische Reihen,

$$\sum_{n=0}^{\infty} q^n = \frac{1}{1-q}, \quad q < 1,$$

für die A_j

$$A_j = \sum_{n=0}^{\infty} B_j e^{-n\beta h\nu_j} = \frac{B_j}{1 - e^{-\beta h\nu_j}}$$

und somit

$$B_j = A_j (1 - e^{-\beta h\nu_j}),$$

womit die Lagrange-Multiplikatoren λ_j bestimmt sind. Durch Einsetzen in die Nebenbedingungen (2.78) findet man

$$\begin{aligned}
\mathcal{N}_j &= \sum_{n=0}^{\infty} n A_j (1 - e^{-\beta h\nu_j}) e^{-n\beta h\nu_j} = A_j (e^{-\beta h\nu_j} - 1) \frac{d}{d(\beta h\nu_j)} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta h\nu_j} \\
&= A_j (e^{-\beta h\nu_j} - 1) \frac{d}{d(\beta h\nu_j)} \frac{1}{1 - e^{-\beta h\nu_j}} = A_j (1 - e^{-\beta h\nu_j}) \frac{e^{-\beta h\nu_j}}{(1 - e^{-\beta h\nu_j})^2} \\
&= \frac{A_j}{e^{\beta h\nu_j} - 1}. \quad (2.81)
\end{aligned}$$

Das wiederum führt, eingesetzt in die Nebenbedingung (2.77) zusammen mit (2.75) auf

$$E = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{8\pi h V \nu_j^3 d\nu_j}{c^3 (e^{\beta h\nu_j} - 1)}.$$

Für die thermodynamische Wahrscheinlichkeit eines Makrozustands findet man mit (2.78) und (2.80)

$$W = \prod_{j=0}^{\infty} \mathcal{N}_j = \prod_{j=0}^{\infty} \frac{A_j}{e^{\beta h \nu_j} - 1},$$

und mit dem Boltzmannschen Prinzip folgt daraus für die Entropie des Systems

$$S = k_B \left[\beta E - \sum_{j=0}^{\infty} A_j \ln(1 - e^{-\beta h \nu_j}) \right].$$

Die thermodynamische Relation

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T}$$

liefert damit für den noch fehlenden Lagrange-Multiplikator

$$\beta = \frac{1}{k_B T},$$

und man erhält für die Energie

$$E = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{8\pi h V \nu_j^3 d\nu_j}{c^3 (e^{h\nu_j/k_B T} - 1)} \equiv \sum_{j=0}^{\infty} V u(\nu_j) d\nu_j.$$

$u(\nu)$ ist dabei die spektrale Energiedichte; für diese ergibt sich genau die Plancksche Strahlungsformel

$$u(\nu) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}.$$

Diese rein quantenmechanische Herleitung verdiente für sich allein genommen bereits bei weitem eine Erwähnung im vorliegenden Buch. Weitaus folgenreicher ist jedoch ein scheinbares Nebenprodukt, das man erhält, wenn man die Besetzungszahlen (2.81) durch die Anzahl A_j der Phasenraumzellen dividiert; das liefert die *mittlere Besetzungszahl*

$$\langle n_j \rangle = \frac{1}{e^{h\nu_j/k_B T} - 1}$$

des j -ten Energieniveaus des betrachteten Systems. Man nennt diese Verteilungsfunktion *Bose-Einstein-Verteilung*. Gemessen an der Bedeutung für die Physik ist sie das zentrale Resultat von Boses Arbeit. Es läßt sich verallgemeinern auf beliebige Teilchen in einem System mit diskreten Energieniveaus ε_j , sofern jedes dieser Niveaus von beliebig vielen Teilchen besetzt werden kann – eine Einschränkung, auf die noch gesondert zurückzukommen sein wird. Man kann zeigen, daß die mittleren Besetzungszahlen durch

$$\langle n_j \rangle = \frac{1}{\exp[(\varepsilon_j - \mu)/k_B T] - 1}$$

gegeben sind, wobei μ das chemische Potential der Teilchen ist⁹⁰. Handelt es sich speziell um Photonen, so gilt stets $\mu = 0$, da diese von den Behälterwänden des Systems absorbiert und emittiert werden können und die Gesamtteilchenzahl damit keine definierte Größe ist. Damit landet man in diesem Fall wieder bei Boses Originalresultat.

2.5.2 Einsteins Theorie der idealen Gase

Einstein beschränkte sich nicht darauf, Boses Arbeit zu übersetzen, sehr positiv zu kommentieren und ihr zur Veröffentlichung zu verhelfen; stattdessen präsentierte er bereits einen Monat später deren Anwendung auf die Beschreibung idealer Gase [248], was er einige Monate später noch weiter ausbaute [249], [250]⁹¹.

Dabei betrachtete er die Moleküle eines idealen, einatomigen Gases⁹² [248] in völliger Analogie zu Boses Behandlung der Photonen. Für ein Molekül der Masse m mit den Koordinaten x, y, z und den Impulsen p_x, p_y, p_z ist das zu einem bestimmten Bereich der Koordinaten gehörende Phasenraumvolumen durch

$$\Gamma = \iiint \iiint dx dy dz dp_x dp_y dp_z$$

gegeben; für alle Zustände mit

$$\frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) < E$$

für einen bestimmten Wert der Energie E findet man für dieses Volumen

$$\Gamma = \frac{4}{3} \pi V (2mE)^{3/2}.$$

Einstein zerlegt nun den Phasenraum ebenfalls in Zellen der Größe h^3 . Für das Energieintervall $[E, E + \Delta E]$ ergibt sich die Anzahl Δs dieser Zellen durch

$$\Delta s = \frac{1}{h^3} \frac{\partial \Gamma}{\partial E} \Delta E.$$

Das liefert

$$\Delta s = 2\pi \frac{V}{h^3} (2m)^{3/2} E^{1/2} \Delta E \quad (2.82)$$

als Analogon der Gleichung (2.74).

Die einzige Abweichung von der Analogie zur Vorgehensweise Boses ist die zusätzliche Forderung der Teilchenzahlerhaltung für die Gasmoleküle, welche für Photonen nicht gegeben ist. Daher gibt es im Volumen V eine feste Anzahl n von Gasmolekülen. Δn davon

⁹⁰Siehe zum Beispiel [359].

⁹¹Zur physikalischen und historischen Einordnung der dritten Arbeit vergleiche [689].

⁹²Diese Beschränkung ist erforderlich, da andernfalls Rotations- und Schwingungsfreiheitsgrade mitberücksichtigt werden müssen.

sollen Energiewerte aus dem Intervall $[E, E + \Delta E]$ besitzen und sich folglich auf die Δs Phasenraumzellen verteilen, außerdem seien p_r^s für $s = 1, 2, \dots, \Delta s$ und $r = 0, 1, \dots, n$ die Wahrscheinlichkeiten für r Moleküle in der s -ten Zelle; dabei gilt natürlich

$$\sum_{r=1}^{\infty} p_r^s = 1 \quad \text{für alle } s. \quad (2.83)$$

Zur Berechnung der Entropie des idealen Gases benötigt man nun wieder die Anzahl der möglichen Verteilungen der Δn Moleküle auf die Δs Phasenraumzellen. Diese beträgt⁹³

$$W = \frac{\Delta s!}{\prod_{r=0}^{\infty} (p_r^s \Delta s)!} \quad (2.84)$$

und liefert nach dem Boltzmannschen Prinzip die Entropie

$$S = k_B \ln W = k_B \left\{ \ln (\Delta s!) - \sum_{r=0}^{\infty} \ln [(p_r^s \Delta s)!] \right\}.$$

Das kann mit Hilfe der Stirlingschen Formel sowie (2.83) durch den Näherungsausdruck

$$S = -k_B \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{r=0}^{\infty} (p_r^s \ln p_r^s) \quad (2.85)$$

ersetzt werden.

Wie Bose betrachtet Einstein nun das thermodynamische Gleichgewicht, welches einerseits dadurch ausgezeichnet ist, daß nicht nur die mittlere Teilchenzahl

$$n = \sum_s \sum_r r p_r^s \quad (2.86)$$

des idealen Gases, sondern auch dessen mittlere Gesamtenergie

$$\bar{E} = \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{r=0}^{\infty} E r p_r^s \quad (2.87)$$

einen festen Wert annimmt. E ist dabei die Energie eines Moleküls in der s -ten Phasenraumzelle; dafür gilt

$$E = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3s}{4\pi V} \right)^{2/3}.$$

Andererseits und insbesondere ist das Gleichgewicht gerade jener Zustand, in welchem die Entropie S ein Minimum annimmt, sodaß sie, aufgefaßt als Funktion der p_r^s , die Bedingungen

$$\frac{\partial S}{\partial p_r^s} = 0 \quad \text{für alle } r, s$$

⁹³Vergleiche (2.79); das dort erforderliche äußere Produktzeichen entfällt hier aufgrund der Teilchenzahlerhaltung.

erfüllt. Das liefert zusammen mit den Nebenbedingungen (2.86) und (2.87), wiederum analog zur Vorgehensweise von Bose,

$$p_r^s = \beta_s \exp [-(A + B s^{2/3}) r],$$

mit noch zu bestimmenden Konstanten β_s , A und B . Die erste davon findet man sogleich mit Hilfe von (2.83), denn daraus folgt

$$\sum_{r=0}^{\infty} p_r^s = \beta_s \sum_{r=0}^{\infty} \exp [-(A + B s^{2/3}) r] = \frac{\beta_s}{1 - \exp [-(A + B s^{2/3})]} = 1$$

und somit

$$\beta_s = 1 - \exp [-(A + B s^{2/3})].$$

Hieraus erhält man weiter

$$\begin{aligned} \bar{n} &= \sum_s \sum_r r p_r^s = \{1 - \exp [-(A + B s^{2/3})]\} \sum_{r=0}^{\infty} r \exp [-(A + B s^{2/3}) r] \\ &= \{\exp [-(A + B s^{2/3})] - 1\} \frac{d}{dA} \sum_{r=0}^{\infty} \exp [-(A + B s^{2/3}) r] \\ &= \{\exp [-(A + B s^{2/3})] - 1\} \frac{d}{dA} \left(\frac{1}{1 - \exp [-(A + B s^{2/3})]} \right) \\ &= \exp [-(A + B s^{2/3})] \frac{1 - \exp [-(A + B s^{2/3})]}{\{1 - \exp [-(A + B s^{2/3})]\}^2} \\ &= \frac{1}{\exp (A + B s^{2/3}) - 1} \end{aligned} \quad (2.88)$$

für die mittlere Zahl der Moleküle pro Phasenraumzelle, was die Bose-Einstein-Verteilung für ideale Gase darstellt. Entsprechend gilt

$$\bar{E} = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3}{4\pi V} \right)^{2/3} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{s^{2/3}}{\exp (A + B s^{2/3}) - 1}$$

als Analogon der Planckschen Strahlungsformel.

Als nächstes setzt Einstein obige Resultate in (2.85) ein, um die Entropie im Gleichgewicht zu berechnen. Mit der Abkürzung

$$\bar{\epsilon} = \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{r=0}^{\infty} r p_r^s s^{2/3}$$

liefert das den Ausdruck

$$S = -k_B \left\{ \sum_{s=0}^{\infty} [\ln (1 - \exp (-(A + B s^{2/3})))] - An - B\bar{\epsilon} \right\}.$$

Aus diesem läßt sich durch Vergleich mit der thermodynamischen Definition der Entropie die Konstante B ablesen; es ergibt sich

$$\begin{aligned} d\bar{E} &= T dS = -k_B T \left\{ \sum_{s=0}^{\infty} \frac{d(A + B s^{2/3})}{1 - \exp(A + B s^{2/3})} - n dA - \bar{\varepsilon} dB - B d\bar{\varepsilon} \right\} \\ &= k_B T B d\bar{\varepsilon} = k_B T \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3}{4\pi V} \right)^{2/3} B d\bar{E} \end{aligned}$$

und damit

$$B = \frac{1}{k_B T} \frac{2m}{h^2} \left(\frac{4}{3} \pi V \right)^{2/3}.$$

Für die freie Energie des idealen Gases folgt

$$F = \bar{E} - TS = k_B T \left\{ \sum_{s=0}^{\infty} [\ln(1 - \exp(-(A + B s^{2/3})))]) - An \right\},$$

und man erhält für dessen Druck das Resultat

$$p = -\frac{\partial F}{\partial V} = -k_B T \bar{\varepsilon} \frac{\partial B}{\partial V} = -\bar{E} \frac{\partial}{\partial V} \left[\frac{h^2}{2m} \left(\frac{3}{4\pi V} \right)^{2/3} \right] = \frac{2}{3} \frac{\bar{E}}{V},$$

also dasselbe wie im klassischen Fall. Alle anderen Resultate unterscheiden sich von jenen der klassischen Physik durch die 1 in den Termen mit $1 - \exp(\dots)$.

Es fehlt noch der Parameter A ; hierfür definiert Einstein eine neue Größe $\lambda = e^{-A}$ und schreibt die Teilchenzahl und die Gesamtenergie als geometrische Reihen in der Form

$$n = \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{\tau=1}^{\infty} \lambda^{\tau} \exp \left[-\frac{2m}{h^2} \left(\frac{4}{3} \pi V \right)^{2/3} \frac{s^{2/3} \tau}{k_B T} \right], \quad (2.89)$$

$$\bar{E} = \frac{2m}{h^2} \left(\frac{4}{3} \pi V \right)^{2/3} \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{\tau=1}^{\infty} s^{2/3} \lambda^{\tau} \exp \left[-\frac{2m}{h^2} \left(\frac{4}{3} \pi V \right)^{2/3} \frac{s^{2/3} \tau}{k_B T} \right], \quad (2.90)$$

um diese sodann durch die Integrale

$$n = \int_0^{\infty} \sum_{\tau=1}^{\infty} \lambda^{\tau} \exp \left[-\frac{2m}{h^2} \left(\frac{4}{3} \pi V \right)^{2/3} \frac{s^{2/3} \tau}{k_B T} \right] ds$$

und

$$\bar{E} = \frac{2m}{h^2} \left(\frac{4}{3} \pi V \right)^{2/3} \int_0^{\infty} \sum_{\tau=1}^{\infty} s^{2/3} \lambda^{\tau} \exp \left[-\frac{2m}{h^2} \left(\frac{4}{3} \pi V \right)^{2/3} \frac{s^{2/3} \tau}{k_B T} \right] ds$$

zu approximieren. Das führt auf die Berechnung von

$$I_1 = \int_0^{\infty} e^{-\alpha^2 s^{2/3}} ds \quad \text{beziehungsweise} \quad I_2 = \int_0^{\infty} s^{2/3} e^{-\alpha^2 s^{2/3}} ds,$$

mit der Abkürzung $\alpha^2 = B\tau$. Unter Verwendung der Substitution $\tau = s^{1/3}$, ein- beziehungsweise dreifacher partieller Integration sowie der Formel

$$\int_0^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha} \quad (2.91)$$

liefert das⁹⁴ einerseits

$$I_1 = 3 \int_0^{\infty} \sigma^2 e^{-\alpha^2 \sigma^2} d\sigma = \frac{3\sqrt{\pi}}{4\alpha^3}$$

und andererseits

$$I_2 = 3 \int_0^{\infty} \sigma^4 e^{-\alpha^2 \sigma^2} d\sigma = \frac{9\sqrt{\pi}}{8\alpha^7},$$

und nach Einsetzen in (2.89) und (2.90) erhält man

$$n = \frac{(2\pi m k_B T)^{3/2} V}{h^3} \sum_{\tau=1}^{\infty} \tau^{-3/2} \lambda^{\tau}, \quad (2.92)$$

⁹⁴Zur Herleitung von (2.91) betrachten wir das Doppelintegral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2(x^2+y^2)} dx dy = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 y^2} dy,$$

das wir durch Transformation auf Polarkoordinaten ausrechnen können:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2(x^2+y^2)} dx dy = \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} e^{-\alpha^2 r^2} r dr d\phi = 2\pi \left[-\frac{1}{2\alpha^2} e^{-\alpha^2 r^2} \right]_0^{\infty} = \frac{\pi}{\alpha^2}.$$

Es ergibt sich also

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 y^2} dy = \frac{\pi}{\alpha^2}$$

und damit weiter

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}.$$

Daraus folgt unmittelbar (2.91).

$$\bar{E} = \frac{3}{2} \frac{(2\pi m)^{3/2} (k_B T)^{5/2} V}{h^3} \sum_{\tau=1}^{\infty} \tau^{-5/2} \lambda^{\tau}. \quad (2.93)$$

Nun folgt aus (2.88) für alle s die Ungleichung $A + B s^{2/3} \geq 0$ und damit auch $A \geq 0$ sowie $0 \leq \lambda \leq 1$ [249]. Zusammen mit (2.92) hat das die Konsequenz, daß die Anzahl der Gasmoleküle bei gegebenem Volumen V den Wert

$$n_{\max} = \frac{(2\pi m k_B T)^{3/2} V}{h^3} \sum_{\tau=1}^{\infty} \tau^{-3/2} \quad (2.94)$$

nicht überschreiten kann, ohne daß ein Phasenübergang eintritt. Überschreitet die Teilchendichte die Größe n_{\max}/V , geht eine mit zunehmender Dichte wachsende Anzahl von Molekülen in den Grundzustand über; die restlichen Moleküle verbleiben gemäß (2.94) im Zustand eines idealen Gases. Einstein zeigt auch gleich, daß diese beiden unterschiedlichen Phasen im thermodynamischen Gleichgewicht stehen. Dazu betrachtet er die, wie er sie nennt, *Plancksche Funktion*

$$\Phi = S - \frac{\bar{E} + pV}{T}$$

der beiden Phasen. Diese Funktion wurde von Planck zur Kennzeichnung von im Gleichgewicht zueinander befindlichen Systemen eingeführt; im Gleichgewichtsfall ist Φ für beide Teilsysteme gleich [708]. Für die im Grundzustand versammelten Gasmoleküle findet man unmittelbar $\Phi = 0$, denn im Grundzustand verschwinden für ideale Gase S , E und V jeweils schon einzeln. Für das gesättigte ideale Gas erhält man für die Entropie wegen $A = 0$

$$S = -k_B \sum_{s=0}^{\infty} \ln(1 - e^{-B s^{2/3}}) + \frac{\bar{E}}{T}.$$

Wieder kann die Summe durch ein Integral approximiert werden; das liefert mit partieller Integration

$$\begin{aligned} \sum_{s=0}^{\infty} \ln(1 - e^{-B s^{2/3}}) &= \int_0^{\infty} \ln(1 - e^{-B s^{2/3}}) ds = -\frac{2}{3} \int_0^{\infty} \frac{s e^{-B s^{2/3}}}{1 - e^{-B s^{2/3}}} B s^{-1/3} ds \\ &= -\frac{2}{3} \int_0^{\infty} n E ds = -\frac{2}{3} \frac{\bar{E}}{k_B T} = -\frac{pV}{k_B T}. \end{aligned}$$

Daraus folgt für das gesättigte ideale Gas

$$S = \frac{\bar{E} + pV}{T}$$

und damit ebenfalls

$$\Phi = 0,$$

wodurch das behauptete Gleichgewicht der beiden Phasen bewiesen ist.

Es gibt somit nach diesem Modell für ideale Gase eine von der Temperatur abhängige maximale Dichte (2.94) der Moleküle; wird diese überschritten, *kondensiert* der überzählige Teil der Moleküle im Grundzustand, während die anderen weiterhin statistisch die höheren Zustände bevölkern. Einstein hatte das entdeckt, was später die Bezeichnung *Bose-Einstein-Kondensation* erhielt. Er war damit auf theoretischem Weg dem experimentellen Nachweis siebenzig Jahre voraus⁹⁵.

Interessanterweise verwendet Einstein zur Berechnung der thermodynamischen Wahrscheinlichkeiten der betrachteten Zustände in seiner ersten Arbeit [248] zum Thema mit (2.84) das gleiche Abzählverfahren wie Bose⁹⁶, in der zweiten dagegen dasjenige, mit dem Planck fünfundzwanzig Jahre früher erstmals seine Strahlungsformel abgeleitet hatte. Man braucht dazu die Anzahl Δs_ν , beziehungsweise z_ν in der zweiten Arbeit, der zum Frequenzintervall $[\nu, \nu + d\nu]$ gehörenden Phasenraumzellen, Gleichung (2.82), sowie die Anzahl n_ν der Moleküle, deren Frequenzen jeweils in diesen Frequenzintervallen liegen. Wie wir in Abschnitt 2.1.1 gesehen haben, gibt es dann in diesem Intervall

$$W_\nu = \frac{(n_\nu + z_\nu - 1)!}{n_\nu! (z_\nu - 1)!}$$

und für das gesamte System, das heißt für alle Frequenzen entsprechend

$$W = \prod_{\nu=0}^{\infty} \frac{(n_\nu + z_\nu - 1)!}{n_\nu! (z_\nu - 1)!} \quad (2.95)$$

Möglichkeiten, die Moleküle über die Phasenraumzellen zu verteilen.

Die weitere Berechnung erfolgt nun genau wie bei Bose. Die mit dem Ausdruck (2.95) für die thermodynamische Wahrscheinlichkeit eines beliebigen Makrozustands des Systems gebildete Entropie

$$S = k_B \ln W$$

soll unter den die gesamte Teilchenzahl n sowie die Gesamtenergie E festlegenden Nebenbedingungen

$$n = \sum_{\nu=0}^{\infty} n_\nu$$

und

$$E = \sum_{\nu=0}^{\infty} n_\nu E_\nu$$

⁹⁵Die ersten experimentellen Nachweise realer Bose-Einstein-Kondensationen gelangen 1995 den Arbeitsgruppen von E. A. Cornell und C. E. Wiemann [7] sowie von W. Ketterle [174].

⁹⁶Siehe (2.76) im vorigen Abschnitt.

maximal sein⁹⁷. Mit Hilfe der Stirlingschen Formel erhält man zunächst den Näherungsausdruck

$$\begin{aligned} \ln W &\approx \sum_{\nu=0}^{\infty} [(n_{\nu} + z_{\nu} - 1) \ln(n_{\nu} + z_{\nu} - 1) - n_{\nu} \ln n_{\nu} - z_{\nu} \ln z_{\nu}] \\ &\approx \sum_{\nu=0}^{\infty} [(n_{\nu} + z_{\nu}) \ln(n_{\nu} + z_{\nu}) - n_{\nu} \ln n_{\nu} - z_{\nu} \ln z_{\nu}] \end{aligned}$$

und nach Einführung von Lagrange-Multiplikatoren die Zielfunktion

$$\begin{aligned} f(n_{\nu}) &= \sum_{\nu=0}^{\infty} [(n_{\nu} + z_{\nu}) \ln(n_{\nu} + z_{\nu}) - n_{\nu} \ln n_{\nu} - z_{\nu} \ln z_{\nu}] \\ &\quad + \lambda_1 \left(n - \sum_{\nu=0}^{\infty} n_{\nu} \right) + \lambda_2 \left(E - \sum_{\nu=0}^{\infty} n_{\nu} E_{\nu} \right). \end{aligned}$$

Diese soll stationär sein; das liefert

$$\frac{\partial f}{\partial n_{\nu}} = \ln(n_{\nu} + z_{\nu}) - \ln n_{\nu} + \lambda_1 + \lambda_2 E_{\nu} = 0$$

oder

$$\ln \left(\frac{n_{\nu} + z_{\nu}}{n_{\nu}} \right) = -(\lambda_1 + \lambda_2 E_{\nu}),$$

also

$$\frac{n_{\nu} + z_{\nu}}{n_{\nu}} = \exp [-(\lambda_1 + \lambda_2 E_{\nu})],$$

und man erhält für die Besetzungszahlen im thermodynamischen Gleichgewicht das Resultat

$$n_{\nu} = \frac{z_{\nu}}{\exp [-(\lambda_1 + \lambda_2 E_{\nu})] - 1}.$$

Die Bestimmung der Lagrange-Multiplikatoren verläuft wie oben und liefert das Resultat

$$n_{\nu} = \frac{z_{\nu}}{\exp (A + E_{\nu}/k_{\text{B}}T) - 1},$$

und nach Division durch z_{ν} erhält man mit

$$\bar{n}_{\nu} = \frac{1}{\exp (A + E_{\nu}/k_{\text{B}}T) - 1}$$

wieder das Resultat (2.88).

⁹⁷Es sei daran erinnert, daß Planck die Strahlungsformel nicht über ein Extremalprinzip, sondern direkt über die Entropie und deren statistischer und thermodynamischer Definition herleitete.

Mit der theoretischen Vorhersage des nach Bose und ihm selbst benannten Effekts war Einstein seiner Zeit zwar weit voraus, einen wichtigen Aspekt dieser Thematik, von dem bisher hier noch überhaupt keine Rede war, konnte er jedoch 1925 noch nicht wissen. Es geht um die heute wohlbekanntere Tatsache, daß es zwei grundsätzlich unterschiedliche Teilchensorten gibt, die in Vielteilchensystemen zwei ebenso unterschiedlichen Statistiken folgen. Zur Entdeckung dieses Sachverhalts mußte zuvor erst einmal das wesentliche unterscheidende Merkmal gefunden werden.

2.5.3 Elektronenspin und Pauli-Prinzip

Natürlich handelt es sich bei diesem Merkmal um den Spin und damit um die als erste entdeckte rein quantenmechanische Eigenschaft physikalischer Systeme ganz ohne klassisches Analogon. Die makroskopischen Auswirkungen dagegen, mit welchen der Spin seine Existenz zu Beginn seiner Erforschung oder genauer gesagt schon zuvor verriet, machen auf den ersten Blick einen durchaus klassisch vertrauten Eindruck, sind aber ebenfalls rein quantenmechanischer Natur, denn es waren magnetische Eigenschaften von Teilchen, die zu seiner Entdeckung führten.

Frühe experimentelle Hinweise auf magnetische Momente bei Mikroobjekten tauchten bereits 1915 auf. Einstein und de Haas beschrieben als erste einen Versuch, dessen Ergebnis konsequenterweise heute als *Einstein-de Haas-Effekt* bezeichnet wird und der einen direkten Nachweis des magnetischen Moments von Elektronen darstellt [251]. Dabei wird ein Eisenstab, der drehbar in einer Spule hängt, plötzlich ummagnetisiert. Es entsteht eine Drehschwingung, die durch eine vom Umklappen der magnetischen Momente der Elektronen verursachte Drehimpulsänderung erklärt werden kann, wenn man dem Elektron einen Eigendrehimpuls zuschreibt⁹⁸. Damit ist man gleichzeitig in der Lage, den Drehimpuls der Elektronen direkt experimentell nachzuweisen und insbesondere auch zu messen. Man bestimmt zu diesem Zweck einerseits die Änderung $\Delta\mu_{\text{Stab}}$ der Magnetisierung des Eisenstabs und andererseits die Änderung ΔL_{Stab} von dessen makroskopischem Drehimpuls. Da sich beide Größen additiv aus den entsprechenden Einzelbeiträgen der betreffenden Elektronen zusammensetzen, kann man sie in der Form

$$\Delta\mu_{\text{Stab}} = \sum_{j=1}^n \Delta\mu_j = 2n\mu_z$$

beziehungsweise

$$\Delta L_{\text{Stab}} = \sum_{j=1}^n \Delta l_j = 2nl_z,$$

schreiben, wenn n die Anzahl der Elektronen, z die Raumrichtung des Stabes, μ_z die Komponente des magnetischen Moments und l_z die Drehimpulskomponente eines Einzelelektrons in z -Richtung ist. Man findet das experimentelle Resultat

⁹⁸Es gibt auch eine Umkehrung des Einstein-de Haas-Effektes, die nach ihrem Entdecker als Barnett-Effekt bezeichnet wird [39]. Hierbei handelt es sich um die Beobachtung, daß ein rotierender Stab aus ferromagnetischem Material sich so verhält, als befände er sich in einem Magnetfeld und dabei magnetisiert wird.

$$\frac{\Delta\mu_{\text{Stab}}}{\Delta L_{\text{Stab}}} = \frac{\mu_z}{l_z} = \frac{e}{m_e}$$

und damit für das magnetische Moment des Elektrons den Wert

$$\mu_z \equiv \mu_B = \frac{el_z}{m_e} = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{Am}^{-1}.$$

Das ist der Zahlenwert des *Bohrschen Magnetons*, das auf diesem Weg seinen Einzug in die Physik hielt.

Ebenfalls nachgewiesen wird das magnetische Moment und damit der Eigendrehimpuls der Elektronen durch ein Experiment, das von Stern und Gerlach 1922 entwickelt wurde [323], [324], [325]; hierbei kommt jedoch eine zusätzliche Merkwürdigkeit zur Geltung, die zunächst nicht erklärbar war. Der Aufbau des Stern-Gerlach-Experiments ist wie folgt: Ein fokussierter Strahl aus neutralen Silberatomen läuft durch ein stark inhomogenes Magnetfeld, dessen Feldgradient senkrecht zur Flugbahn der Silberatome ausgerichtet ist; üblicherweise wird diese Richtung als z -Richtung gewählt. Anschließend wird er von einer Photoplatte aufgefangen. Auf der Platte erscheinen genau zwei Flecke, die symmetrisch zur Flugbahn der Atome in Richtung des Feldgradienten getrennt sind. Das bedeutet, daß die Silberatome eine Kraft senkrecht zu ihrer Flugbahn erfahren, und zwar einen Teil davon in Richtung des Feldgradienten und den anderen Teil entgegengesetzt dazu. Klar ist auf jeden Fall, daß die Ursache dafür eine Wechselwirkung zwischen dem magnetischen Moment $\vec{\mu}$ der Silberatome und dem inhomogenen Magnetfeld \vec{B} ist. Aus der klassischen Elektrodynamik weiß man, daß das Potential für diese Wechselwirkung

$$V = -\vec{\mu} \vec{B}$$

ist, und damit übt das inhomogene Magnetfeld auf die Silberatome eine Kraft in z -Richtung aus, die gegeben ist durch

$$F_z = -\frac{\partial V}{\partial z} = \mu_B \frac{\partial B}{\partial z}.$$

Also folgt aus dem Stern-Gerlach-Experiment unmittelbar, daß das magnetische Moment μ der Silberatome und damit deren Drehimpulse genau zwei diskrete Werte annehmen kann⁹⁹. Kein klassisches System mit Drehimpuls weist ein solches Verhalten auf.

Um so besser paßte diese Beobachtung dafür zu einer Hypothese, mit der Alfred Landé kurz zuvor eine Erklärung für den *anormalen Zeeman-Effekt* gefunden hatte¹⁰⁰. Versuche in diese Richtung von Sommerfeld [826] und Debye [184] lagen bereits vor, allerdings mit mäßigem

⁹⁹Noch deutlicher wird das bei einem Experiment, das Phipps und Taylor 1927 durchgeführt haben [694]. Sie führten genau denselben Versuch mit neutralen Wasserstoffatomen durch, die im Grundzustand von vorneherein überhaupt keinen Bahndrehimpuls besitzen. Auch hier findet man zwei z -Komponenten.

¹⁰⁰Benannt nach dem niederländischen Physiker Pieter Zeeman, der die Aufspaltung atomarer Spektrallinien in äußeren Magnetfeldern 1896 entdeckte [941], [942], [943]. Weitere und präzisere experimentelle Nachweise erfolgten insbesondere 1898 durch Thomas Preston [719] sowie 1902 durch Carl Runge und Friedrich Paschen [757], [758], [759]. Details hierzu findet man bei [413].

Erfolg. Nichtklassische Eigenschaften quantenmechanischer Drehimpulse waren von Bohr und Sommerfeld bereits eingeführt worden; das beinhaltete einerseits die Drehimpulsquantisierung als solche, wonach quantenmechanische Drehimpulse stets die Relation $l = nh/2\pi$, $n \in \mathbb{Z}$, erfüllen, und andererseits eine zusätzliche Richtungsquantisierung, das heißt, jeder quantenmechanische Drehimpuls l hat bezüglich einer beliebig vorgegebenen räumlichen Richtung genau $2l + 1$ mögliche Komponenten¹⁰¹. Landé erweiterte das, indem er ad hoc *halbzahlige* Drehimpulse, also solche mit Beträgen der Form $l = (2n + 1)h/4\pi$, $n \in \mathbb{Z}$, einführte, womit ihm eine präzise quantitative Beschreibung des Zeeman-Effekts für schwache äußere Felder gelang [532] - [536]¹⁰². Hierfür ersann er zahlreiche empirische Regeln, mit welchen die Energieniveaus der Zeeman-Spektren berechnet werden können. Landé zerlegte zu diesem Zweck die Zeeman-Terme in zwei Teilterme, einen mit ganzzahligen Drehimpulsen \vec{l}_i und einen zusätzlichen mit halbzahligen Drehimpulsen \vec{s}_i . Dabei betrachtet man die jeweiligen Gesamtdrehimpulse als Vektorsummen

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i; \quad \vec{S} = \sum_i \vec{s}_i; \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad (2.96)$$

Eines von Landés Postulaten besagt nun, daß \vec{L} und \vec{S} beim magnetischen Moment der betrachteten Atome *anders koppeln* als beim Gesamtdrehimpuls \vec{J} . Das wird durch zwei Kopplungskonstanten g_S und g_L berücksichtigt, indem man

$$\vec{\mu} = -\frac{\mu_B}{\hbar} (g_S \vec{S} + g_L \vec{L})$$

setzt; ein weiteres Postulat legt die Kopplungskonstanten auf $g_S \approx 2$ und $g_L = 1$ fest, das heißt, halbzahlige Drehimpulse sollen doppelt so stark zum magnetischen Moment beitragen wie ganzzahlige. Zusätzlich postulierte Landé für den Betrag $|\vec{J}| \equiv J$ eines quantenmechanischen Drehimpulses die Relation

$$J^2 = \hbar^2 j(j + 1), \quad (2.97)$$

wobei $j \in \mathbb{N}$ gelten muß. Befinden sich Atome, deren Gesamtdrehimpuls (2.97) gehorcht, in einem äußeren Magnetfeld, so tritt eine Aufspaltung der Spektrallinien auf, wobei benachbarte Energieniveaus um den Betrag

$$\Delta E_B = \vec{\mu} \vec{B}$$

gegeneinander verschoben sind. Landés Regeln lassen sich nun in der Gestalt

$$\Delta E_B = g \mu_B m_j B, \quad m_j = -j, -j + 1, \dots, j$$

zusammenfassen¹⁰³, wobei der Proportionalitätsfaktor g von den Drehimpulsen \vec{L} , \vec{S} und \vec{J} abhängt. g nennt man nach seinem Entdecker *Landé-Faktor* oder *g-Faktor*. Es ergeben sich

¹⁰¹Siehe Abschnitte 2.4.1 und 2.4.2.

¹⁰²Eine sehr ausführliche wissenschaftshistorische Darstellung von Landés Arbeit zum anomalen Zeeman-Effekt ist [302].

¹⁰³Das ist die heute übliche Bezeichnung. Die Verwendung zweier getrennter Quantenzahlen j und m_j geht auf Pauli zurück, der die Notation $k_1 = l + 1$, $k_2 = j + \frac{1}{2}$, $m_1 = m_j$ verwendete [668]. Landé hatte zuvor die Summe $j + m_j$ als eine Quantenzahl geführt.

somit jeweils $2j + 1$ äquidistante Zeeman-Linien, was nicht nur qualitativ, sondern insbesondere auch quantitativ gut mit den Beobachtungen übereinstimmt.

Dennoch war die Situation natürlich nicht zufriedenstellend, da Landés Beschreibung rein empirischer Art war und keinerlei Begründung für das verwendete Vorgehen lieferte. Die Folgezeit war daher unter anderem von einer mühsamen und teilweise ziemlich frustrierenden Suche nach einer besseren Erklärung geprägt, bei der sich insbesondere Wolfgang Pauli hervortat¹⁰⁴. Als eine erste Etappe konnte dieser zunächst die von Landé für schwache äußere Magnetfelder gefundene Ad-hoc-Erklärung auf starke Felder und damit auf den normalen Zeeman-Effekt und den Paschen-Back-Effekt¹⁰⁵ ausdehnen [666]¹⁰⁶. Im entscheidenden zweiten Schritt stellte Pauli einerseits fest, daß für die Struktur der Zeeman-Spektren jeweils ausschließlich das Leuchtelektron, also das energetisch äußerste Elektron des betrachteten Atoms verantwortlich ist, nicht aber die inneren, abgeschlossenen Schalen desselben; andererseits folgte er aus der Dublettstruktur der Spektren eine, wie er sich ausdrückte, „eigentümliche, klassisch nicht beschreibbare Art von Zweideutigkeit der quantentheoretischen Eigenschaften des Leuchtelektrons“ [670]¹⁰⁷. Auf dieser Basis erklärt Pauli anschließend den bis dahin rein empirisch vorliegenden Sachverhalt, daß jede Untergruppe der Bahndrehimpulsquantenzahl $l \in \{0, 1, \dots, n - 1\}$ einer abgeschlossenen Schale mit Hauptquantenzahl n genau $2(2l + 1)$ Elektronen enthält, durch Postulieren seines berühmten Ausschließungsprinzips [671], [672]:

Jeder durch die fest gewählten Quantenzahlen n, l, j, m_j charakterisierte Zustand kann stets höchstens durch ein Elektron besetzt sein.

Damit gelingt sofort eine systematische Deutung der Zeeman-Spektren auch für komplexere Atome und gleichzeitig und insbesondere der Durchbruch zur schon länger gesuchten Erklärung der Elektronenkonfigurationen der Atome und damit zum Aufbau des Periodensystems der Elemente. Die Bedeutung des Pauli-Prinzips geht jedoch weit darüber hinaus. Es ist die Ursache der Stabilität makroskopischer Objekte, der Festigkeit der Festkörper, ihrer thermischen und elektrischen Eigenschaften, der Inkompressibilität der Flüssigkeiten und dergleichen mehr. Selbst in der Astronomie ist es äußerst wichtig; in der Tat war eine seiner ersten Anwendungen die Aufstellung einer Theorie der weißen Zwerge und der Neutronensterne¹⁰⁸.

¹⁰⁴Eine ausführliche Darstellung der historischen Abläufe findet man bei [838].

¹⁰⁵Siehe weiter unten.

¹⁰⁶Paulis entscheidende Idee hierzu war das Postulat seines sogenannten Summensatzes, wonach die Summe der Energiewerte eines beliebigen Multipletts während des Übergangs von schwachen zu starken Feldern stets proportional zur Feldstärke B bleibt.

¹⁰⁷In diese Zeit fällt auch Paulis Einführung der Idee eines Drehimpulses der Atomkerne zur Erklärung weiterer bis dahin noch unverstandener Spektralliniaufspaltungen [669]. Das ist natürlich nichts anderes als die Entdeckung der Hyperfein-Wechselwirkung.

¹⁰⁸Ralph Fowler veröffentlichte 1926 eine nichtrelativistische Theorie, in der allerdings weiße Zwerge beliebiger, auch unendlicher Masse möglich sind [303]. Die relativistische Variante wurde von Subrahmanyan Chandrasekhar im Rahmen seiner Theorie der weißen Zwerge, Neutronensterne und schwarzen Löchern nachgeliefert [155], [156]. In diesem Zusammenhang berechnete er auch erstmals die als Chandrasekhar-Limits bekannten Grenzen, bis zu denen weiße Zwerge und Neutronensterne stabil sind und ab wo schwarze Löcher entstehen.

Pauli hatte damit einen neuen, inneren Freiheitsgrad des Elektrons eingeführt, zeigte jedoch zunächst keine Neigung, diesen durch eine Modellvorstellung zu veranschaulichen¹⁰⁹. Eine solche wurde im Januar 1925 von Ralph Kronig vorgeschlagen; da sich jedoch Heisenberg, Kramers und Pauli ablehnend dazu äußerten, verzichtete er auf eine Veröffentlichung. Nahezu gleichzeitig hatten George Uhlenbeck und Samuel Goudsmit weniger Hemmungen und veröffentlichten genau dieselbe Idee. Zunächst führte Goudsmit eine neue Quantenzahl für Elektronen ein [340], die im wesentlichen die Spinquantenzahl der modernen Sprechweise ist, und wenig später gelang ihm zusammen mit Uhlenbeck auf dieser Grundlage die Ableitung der korrekten Formel für die Energieniveaus der Feinstruktur der Wasserstoff-Spektrallinien [342]¹¹⁰. Die entscheidende, wenn auch zunächst noch in der klassischen Physik verhaftete Idee war dann, daß Uhlenbeck und Goudsmit diese neue Quantenzahl auf eine Rotation des Elektrons um seine Achse zurückführten, womit auf einen Schlag der Zusammenhang mit dem magnetischen Moment und einem Eigendrehimpuls hergestellt war [890], [891]¹¹¹. Konsequenterweise erhielt der neue Freiheitsgrad den Namen *Spin*. Die Vorstellung eines quantenmechanischen Eigendrehimpulses \vec{s} von Elementarteilchen führte gemäß (2.97) unmittelbar auf die Relation

$$|\vec{s}^2| = \hbar^2 s(s+1) \quad (2.98)$$

für dessen Betrag. Im Fall des Elektrons liefert das Stern-Gerlach-Experiment zusammen mit Landés Richtungsquantelung wegen $2s+1=2$ unmittelbar den Wert $s=1/2$.

Im Rahmen dieses Bildes ließ sich nun eine Deutung des Zeeman-Effekts konstruieren, die insbesondere auch eine Berechnung des Landéschen g -Faktors erlaubte und den naheliegenden Namen *Vektormodell* erhielt. Man startet dabei mit der Kopplung der Bahn- und Spindrehimpulse des betrachteten Atoms zu einem Gesamtdrehimpuls gemäß (2.96)¹¹², die stets dann vorliegt, wenn einerseits die betrachteten Atome nicht zu schwer sind¹¹³, und andererseits das für die Feinstruktur verantwortliche Potential V_{FS} der Wechselwirkung der magnetischen

¹⁰⁹Das entsprach der sich gerade abzeichnenden Tendenz, in der Quantenmechanik ganz auf anschauliche Größen zu verzichten. Siehe dazu Abschnitt 3.3.

¹¹⁰Einen Überblick über Uhlenbecks und Goudsmits Arbeiten zur Entdeckung des Spins liefert [662]. Zur Feinstruktur des Wasserstoffspektrums siehe beispielsweise [431].

¹¹¹In einem Vortrag von 1971 schilderte Goudsmit die Geschichte der Entdeckung des Elektronenspins auf unterhaltsame Weise [341]; dabei erzählte er auch, wie Uhlenbeck zunächst Zweifel hatte und Ehrenfest, seinen damaligen Chef, bat, die Arbeit wieder zurückzuziehen, da er der Meinung war, eine derart schnelle Eigenrotation der Elektronen sei unmöglich. Er kam jedoch zu spät, Ehrenfest hatte das Manuskript bereits abgeschickt, und so wurde es veröffentlicht.

¹¹²Man nennt das *LS-Kopplung* oder auch *Russell-Saunders-Kopplung*, nach Henry N. Russell und Frederick A. Saunders, die diese Art der Kopplung 1925 auf die Beschreibung von Spektren der Erdalkalielemente anwendeten [760].

¹¹³Bei schweren Atomen überwiegt die Spin-Bahn-Kopplung jedes einzelnen Elektrons. Deren Spin- und Bahndrehimpulse koppeln jeweils einzeln zu Einelektron-Drehimpulsen, und erst diese koppeln zum Gesamtdrehimpuls des Atoms; es gilt also

$$\vec{s}_i + \vec{l}_i = \vec{j}_i; \quad \vec{J} = \sum_i \vec{j}_i.$$

In diesem Fall spricht man von *jj-Kopplung*.

Spin- und Bahnmomente viel größer ist als das Potential V_B der Wechselwirkung des gesamten magnetischen Moments mit dem externen Magnetfeld¹¹⁴. Üblicherweise wählt man die Richtung des externen Magnetfelds als z -Achse des Koordinatensystems und stellt sich vor, daß der Gesamtdrehimpuls-Vektor \vec{J} als Folge der Wechselwirkung mit dem Magnetfeld um diese Achse präzediert, wobei er die ihrerseits um seine Richtung rotierenden Vektoren \vec{S} und \vec{L} mitnimmt. Ähnliches gilt für die magnetischen Momente $\vec{\mu}_J, \vec{\mu}_L$ und $\vec{\mu}_S$; wegen $g_S \approx 2$ und $g_L = 1$ weicht jedoch $\vec{\mu}_J$ von der Richtung von \vec{J} ab und präzediert folglich um diese, unter Mitführung von $\vec{\mu}_S$ und $\vec{\mu}_L$, die wiederum um $\vec{\mu}_J$ rotieren. Erst der Vektor $(\vec{\mu}_J)_J$, den man durch Projektion von $\vec{\mu}_J$ auf die Richtung von \vec{J} erhält, präzediert um die Richtung des externen Feldes (siehe Abb. 2.6). Für die Präzessionsfrequenzen $\omega_{FS} = V_{FS}/\hbar$ (von $\vec{\mu}_J$) und $\omega_B = V_B/\hbar$ (von $(\vec{\mu}_J)_J$) gilt ersichtlicherweise $\omega_{FS} \gg \omega_B$, sodaß der zeitliche Mittelwert von $\vec{\mu}_J$, mit dem das externe Magnetfeld wechselwirkt, genau mit $(\vec{\mu}_J)_J$ zusammenfällt. Für den Betrag dieses Vektors ergibt sich

$$|(\vec{\mu}_J)_J| = |\vec{\mu}_J| \cos \angle(\vec{\mu}_J, \vec{J}) = \mu_J \frac{J}{|\vec{J}|},$$

und für das Potential der Wechselwirkung mit dem Magnetfeld daher und wegen der Antiparallelität von $(\vec{\mu}_J)_J$ und \vec{J}

$$V_B = -(\vec{\mu}_J)_J \vec{B} = -|(\vec{\mu}_J)_J| B \cos \angle((\vec{\mu}_J)_J, \vec{B}) = -\left(\mu_J \frac{J}{|\vec{J}|}\right) \left(\frac{J}{|\vec{J}|} \vec{B}\right).$$

Verwendet man nun

$$\vec{\mu}_J = -\frac{\mu_B}{\hbar} (2\vec{S} + \vec{L}) = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\vec{S} + \vec{J}),$$

so findet man zunächst

$$V_B = -\frac{\mu_B}{\hbar} \frac{(\vec{S} + \vec{J}) \vec{J} (\vec{J} \vec{B})}{J^2} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \frac{(\vec{S} \vec{J} + \vec{J}^2) (\vec{J} \vec{B})}{J^2} = -\frac{\mu_B}{\hbar} B J_z \frac{\vec{S} \vec{J} + \vec{J}^2}{J^2}.$$

Weiterhin gilt

$$\vec{L}^2 = (\vec{J} - \vec{S})^2 = \vec{J}^2 + \vec{S}^2 - 2\vec{J}\vec{S},$$

also auch

$$2\vec{J}\vec{S} = (\vec{J} - \vec{S})^2 = \vec{J}^2 + \vec{S}^2 - \vec{L}^2,$$

und damit

$$V_B = -\frac{\mu_B}{\hbar} B J_z \frac{J^2 + \frac{1}{2}(\vec{J}^2 + \vec{S}^2 - \vec{L}^2)}{J^2}.$$

¹¹⁴Im umgekehrten Fall bei sehr starken externen Magnetfeldern, wo V_B viel größer als V_{FS} ist, verhalten sich die Drehimpulse anders; hier entkoppeln die Spin- und die Bahndrehimpulse, da die Wechselwirkung der Einzeldrehimpulse mit dem externen Magnetfeld die Spin-Bahn-Wechselwirkung überwiegt. Dadurch geht die Aufspaltung der Spektrallinien des anomalen Zeeman-Effekts auch für Atome mit Gesamtspin $S > 0$ in den normalen Zeeman-Effekt über, wie er von Atomen mit Gesamtspin $S = 0$ bekannt ist. Man nennt dieses Phänomen *Paschen-Back-Effekt*, nach Friedrich Paschen und Ernst Back, die es 1921 entdeckten [665].

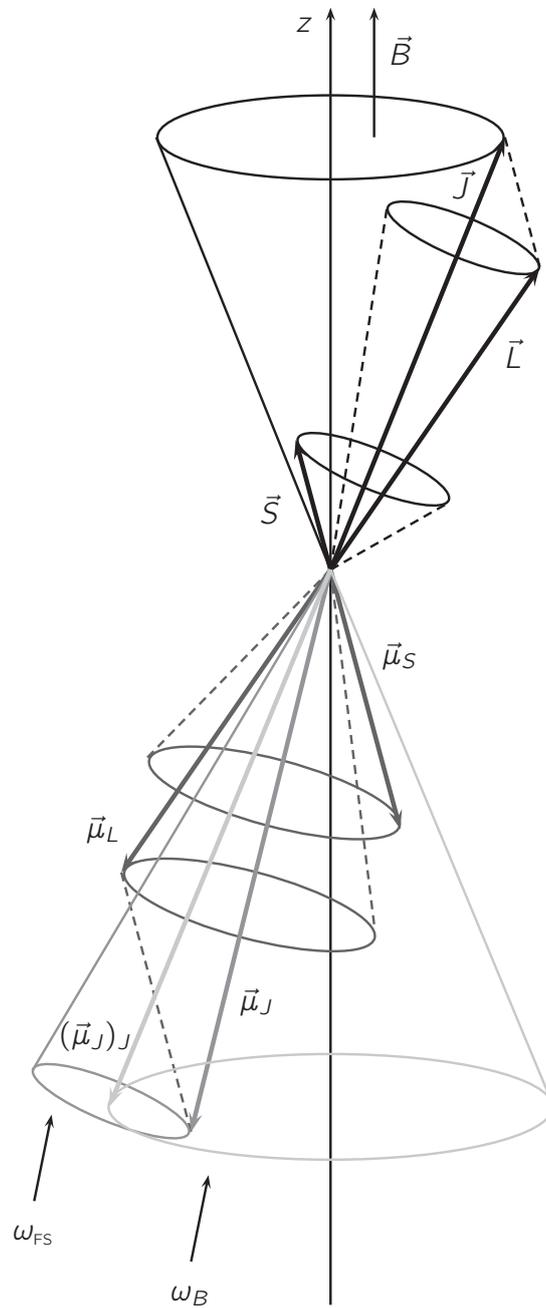


Abbildung 2.6: Zum Vektormodell des Zeeman-Effekts

Zusammen mit den Relationen

$$\begin{aligned}\vec{L}^2 &= \hbar^2 L(L+1), \\ \vec{S}^2 &= \hbar^2 S(S+1), \\ \vec{J}^2 &= \hbar^2 J(J+1), \\ J_z &= m_J \hbar\end{aligned}$$

erhält man für das Wechselwirkungspotential

$$V_B = -\mu_B B m_J \frac{J(J+1) + \frac{1}{2}[J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)]}{J(J+1)}.$$

Ein Vergleich mit dem Spektrallinienabstand

$$\Delta E_B = g \mu_B m_j B$$

beim anomalen Zeeman-Effekt liefert für den Landé- g -Faktor die Relation

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (2.99)$$

Darin sind auch die Grenzfälle $S = 0$ mit $g = g_L = 1$ und $L = 0$ mit $g = g_S = 2$ enthalten. Die Formel (2.99) für den g -Faktor wurde später mit quantenmechanisch strengeren Mitteln bestätigt¹¹⁵.

Daß die Vorstellung einer Eigenrotation als Ursache des Elektronenspins nur ein höchst behelfsmäßiges, genaugenommen nicht korrektes Modell sein konnte, war natürlich von Beginn an klar. Man sieht das sofort, wenn man das magnetische Moment einer klassischen mit dem Drehimpuls \vec{L} rotierenden geladenen Kugel berechnet. Für dieses gilt

$$\vec{\mu} = -\frac{q}{2m} \vec{L}.$$

Betrachtet man nun den Spin als quantenmechanischen Drehimpuls \vec{s} , von dem man empirisch weiß, daß dessen z -Komponente nur zwei mögliche Werte annehmen kann, so gerät man in Schwierigkeiten. Denn aufgrund der Richtungsquantelung sowie der Relation (2.98) ergibt sich für die z -Komponente des Spins wie gesehen

$$s_z = \pm \frac{1}{2} \hbar.$$

Klassisch führt das für das Elektron zu einem magnetischen Moment vom Betrag

$$\mu = \frac{e}{2m} s_z = \frac{e\hbar}{4m}.$$

¹¹⁵Das bewerkstelligten erstmals Heisenberg und Jordan [409] sowie C. G. Darwin [173], die mit Hilfe von quantenmechanischer Störungsrechnung die Resultate des Vektormodells für den Zeeman-Effekt einschließlich (2.99) reproduzierten. Genauereres hierzu findet man beispielsweise in [431].

Experimentell wie auch mit Hilfe von (2.99) ergibt sich jedoch

$$\mu = \mu_B = \frac{e\hbar}{2m},$$

also das doppelte. Der Spin erzeugt offensichtlich wie von Landé postuliert ein doppelt so großes magnetisches Moment wie ein gleichgroßer klassisch gedeuteter Drehimpuls, womit klar ist, daß er eine rein quantenmechanische Größe ohne klassisches Analogon ist. Das läßt sich verallgemeinern: Es gibt quantenmechanische Drehimpulse mit und solche ohne klassisches Gegenstück, wobei erstere stets ganzzahlige Vielfache, letztere dagegen sowohl ganz- als auch halbzahlige Vielfache von \hbar als Beträge aufweisen; abgesehen von diesem Unterschied verhalten sich beide aus quantenmechanisch-formaler Sicht gleich.

So gut die Idee des Spins zur Erklärung von Phänomenen wie dem Zeeman-Effekt auch geeignet war, sie war zunächst immer noch eine reine Ad-Hoc-Angelegenheit¹¹⁶. Die Entwicklung der relativistischen Quantenmechanik im wesentlichen durch Dirac ab 1928 änderte das jedoch drastisch¹¹⁷, denn hier taucht der Spin ganz automatisch als besondere Eigenschaft der beschriebenen Systeme auf. Insbesondere liefert sie für das Elektron unmittelbar das Resultat $g = 2$. Eine weitere Verbesserung erbrachte die *Quantenelektrodynamik*, mit deren Hilfe J. Schwinger 1948 erstmals eine systematische theoretische Abweichung von $g = 2$ nachweisen konnte [801]. Hierzu wurden später immer wieder verbesserte Berechnungen mit nach und nach immer aufwendigeren Verfahren vorgelegt; die derzeit jüngste Arbeit dieser Art ist [154]. Die schon von Anfang an vorliegende sehr gute Übereinstimmung von Theorie und Experiment für den g -Faktor des Elektrons konnte dadurch laufend gesteigert werden¹¹⁸. Der aktuelle theoretische Wert nach NIST¹¹⁹ ist $g = 2,002\,319\,304\,362\,2(15)$, der derzeit genaueste experimentelle Wert $g = 2,002\,319\,304\,361\,46(54)$ [389].

2.5.4 Die Fermi-Dirac-Statistik

In Abschnitt 2.5.1 wurden bei der Berechnung von Zustandsverteilungsfunktionen Systeme betrachtet, bei denen sich viele ununterscheidbare Teilchen im gleichen Zustand aufhalten.

¹¹⁶Auch wenn schon 1927 eine saubere quantenmechanische Beschreibung für Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen vorlag. Sie stammt – wie könnte es anders sein – von Pauli, der bei dieser Gelegenheit die später nach ihm benannten Spin-Matrizen einführte [676].

¹¹⁷Das wesentliche Werkzeug der relativistischen Quantenmechanik ist die *Dirac-Gleichung*, die ihr Namensgeber als relativistische Verallgemeinerung der Schrödingergleichung herleitete [201], [202], [203]. Da sich das vorliegende Buch auf die nichtrelativistische Quantenmechanik beschränkt, liegt die Dirac-Gleichung außerhalb des hier gesteckten Rahmens; näheres dazu findet man traditionell in [71] und [72] sowie generell natürlich in jedem Lehrbuch über relativistische Quantenfeldtheorie. Die Schrödingergleichung ist dann weiter unten Gegenstand des Abschnitts 3.4.

¹¹⁸Die ersten Messungen an gebundenen Elektronen wurden von P. Kusch und unterschiedlichen Mitarbeitern [520], [521], [581], [720], [860] sowie von J. E. Nafe, E. B. Nelson und I. I. Rabi [637] durchgeführt, Messungen an freien Elektronen erfolgten durch L. W. Pidd et al. [560], [796], später und genauer beispielsweise durch R. S. Van Dyck, P. B. Schwinberg und H. G. Dehmelt [224]. Die Entwicklung ist hier nach wie vor im Gange.

¹¹⁹National Institute of Standards and Technology in Gaithersburg im US-Bundesstaat Maryland

Die Annahme, eine solche Verteilungsfunktion müsse für Teilchen, für die das Pauli-Prinzip gilt, anders aussehen, ist natürlich naheliegend. Fermi und Dirac waren die ersten, die diesen Sachverhalt unabhängig voneinander genauer untersuchten, beide im Zusammenhang mit dem Versuch, ideale einatomige Gase quantenmechanisch zu beschreiben – die Geschichte wiederholt sich hier, wie man sieht [196]¹²⁰, [280]¹²¹, [281].

Die Herleitung der erwähnten Verteilungsfunktion erfolgt in völliger Analogie zum Bose-Einstein-Fall, mit der einen Ausnahme, daß nun jede einzelne Mode nur gar nicht oder höchstens einfach besetzt sein kann, anstelle von beliebig oft. Ein System bestehe aus N Teilchen mit Energieniveaus $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$, wobei jeweils A_j die Anzahl der Zustände und N_j die Anzahl der Teilchen mit Energie ε_j sei. Der Einfachheit halber sei von Entartungen abgesehen. Für die Teilchenzahl gilt damit

$$N = \sum_j N_j$$

und für die Gesamtenergie

$$E = \sum_j N_j \varepsilon_j.$$

Außerdem seien alle Teilchen ununterscheidbar und alle Teilchenzustände gleich wahrscheinlich. Die Anzahl der Möglichkeiten, N_j identische Teilchen auf A_j Zustände zu verteilen, wobei jeder Zustand maximal einfach besetzt sein darf, ist bekanntlich

$$w_j = \binom{A_j}{N_j} = \frac{A_j!}{N_j! (A_j - N_j)!},$$

¹²⁰Dirac führt dabei gleich noch einen weiteren Aspekt ein, nämlich den der Vielteilchensysteme. Dazu betrachtet er ein Atom mit r nicht wechselwirkenden, durch die Quantenzahlen n_1, n_2, \dots, n_r charakterisierten Elektronen und stellt fest, daß deren Wellenfunktionen – ein Begriff, auf den wir in Abschnitt 3.4 ausführlich zurückkommen werden – sowohl in *symmetrischer* als auch in *antisymmetrischer* Weise zu einer Gesamtwellenfunktion zusammgebaut werden können, indem man entweder

$$\Psi_s = \sum_{\sigma} \psi_{n_1}(\sigma(1)) \psi_{n_2}(\sigma(2)) \cdots \psi_{n_r}(\sigma(r))$$

schreibt und über alle Permutationen σ der Zahlen $1, 2, \dots, r$ summiert, oder Determinanten der Gestalt

$$\Psi_a = \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(1) & \psi_{n_1}(2) & \cdots & \psi_{n_1}(r) \\ \psi_{n_2}(1) & \psi_{n_2}(2) & \cdots & \psi_{n_2}(r) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{n_r}(1) & \psi_{n_r}(2) & \cdots & \psi_{n_r}(r) \end{vmatrix}$$

verwendet. Da eine Determinante verschwindet, wenn zwei Spalten (oder zwei Zeilen) identisch sind, ist das Pauli-Prinzip automatisch erfüllt, wenn man für Elektronen die antisymmetrische Variante wählt. Man nennt solche Determinanten *Slater-Determinanten*, nach John C. Slater, der sie 1929 zur Beschreibung von Molekülen verwendete [816].

¹²¹Englische Übersetzung in [940]

sodaß man für die thermodynamische Wahrscheinlichkeit eines durch E und N charakterisierten Zustands¹²²

$$W = \prod_j \binom{A_j}{N_j} = \prod_j \frac{A_j!}{N_j! (A_j - N_j)!}$$

erhält. Für die Entropie des Systems ergibt sich folglich

$$S = k_B \ln W = k_B \sum_j \{ \ln(A_j!) - \ln(N_j!) - \ln[(A_j - N_j)!] \}$$

oder nach Anwendung der Stirlingschen Formel bis zur zweiten Ordnung

$$\begin{aligned} S &= k_B \sum_j [A_j \ln A_j - A_j - N_j \ln N_j + N_j - (A_j - N_j) \ln(A_j - N_j) + (A_j - N_j)] \\ &= k_B \sum_j [A_j \ln A_j - N_j \ln N_j - (A_j - N_j) \ln(A_j - N_j)]. \end{aligned}$$

Die Entropie soll maximal werden unter den Nebenbedingungen

$$N - \sum_j N_j = 0, \quad E - \sum_j N_j \varepsilon_j = 0,$$

was nach Einführung von Lagrange-Multiplikatoren auf die Zielfunktion

$$\begin{aligned} f(N_j) &= \sum_j [A_j \ln A_j - N_j \ln N_j - (A_j - N_j) \ln(A_j - N_j)] \\ &\quad + \alpha \left(N - \sum_j N_j \right) + \beta \left(E - \sum_j N_j \varepsilon_j \right). \end{aligned}$$

führt. Die notwendigen Bedingungen für deren Stationarität lauten

$$\frac{\partial f}{\partial N_j} = -\ln N_j + \ln(A_j - N_j) - \alpha - \beta \varepsilon_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots$$

oder

$$\ln \left(\frac{A_j}{N_j} - 1 \right) = \alpha + \beta \varepsilon_j,$$

und daraus folgt für die Besetzungszahlen¹²³

$$N_j = \frac{A_j}{\exp(\alpha + \beta \varepsilon_j) + 1}.$$

¹²²Wir erinnern daran, was bereits in Abschnitt 2.1.1 über thermodynamische Wahrscheinlichkeiten gesagt wurde: Es handelt sich dabei nicht um Wahrscheinlichkeiten im mathematischen Sinn, sondern um die Anzahl der den vorliegenden Makrozustand repräsentierenden Mikrozustände des Systems.

¹²³Fermi schreibt in [280]

$$N_j = \frac{\alpha A_j}{e^{\beta \varepsilon_j} + \alpha}$$

und in [281]

$$N_j = A_j \frac{\alpha e^{-\beta \varepsilon_j}}{\alpha e^{-\beta \varepsilon_j} + 1},$$

da er α jeweils anders definiert.

Die mittleren Besetzungszahlen ergeben sich daraus zu

$$\langle n_j \rangle = \frac{N_j}{A_j} = \frac{1}{\exp(\alpha + \beta \varepsilon_j) + 1}.$$

Aus der thermodynamischen Relation $\partial E / \partial S = T$ erhält man zusätzlich für den zweiten Lagrange-Parameter $\beta = 1/k_B T$ und somit

$$\langle n_j \rangle = \frac{1}{\exp(\alpha + \varepsilon_j/k_B T) + 1}. \quad (2.100)$$

Den ersten lassen Fermi und Dirac offen und deuten nur an, wie er zu berechnen ist. Man kann zeigen, daß α für feste Teilchenzahl verschwindet und ansonsten $\alpha = -\mu/k_B T$ gilt, wobei μ das chemische Potential ist. Folglich wird (2.100) zu

$$\langle n_j \rangle = \frac{1}{\exp(\varepsilon_j/k_B T) + 1}$$

beziehungsweise

$$\langle n_j \rangle = \frac{1}{\exp[(\varepsilon_j - \mu)/k_B T] + 1}.$$

Man nennt diese Verteilungsfunktionen *Fermi-Dirac-Verteilung*; sie ersetzt die Bose-Einstein-Verteilung bei Teilchen, für die das Pauli-Prinzip gilt.

2.5.5 Bosonen und Fermionen

Vergleicht man die Bose-Einstein-Statistik und die Fermi-Dirac-Statistik, scheint der Unterschied auf den ersten Blick minimal zu sein. Genauere Betrachtung zeigt jedoch sofort, daß die beiden unscheinbaren Rechenzeichen zu stark voneinander abweichendem Verhalten der jeweils zugehörigen Teilchen führen. Oder um es noch drastischer zu formulieren: Es existieren zwei grundsätzlich unterschiedliche Teilchensorten in der Natur, die nicht nur durch das beschriebene statistische Verhalten in der Besetzung von Energieniveaus und der Beachtung beziehungsweise Nichtbeachtung des Pauli-Prinzips gekennzeichnet sind. Es zeigte sich nämlich alsbald, daß hierbei eine strikte Unterteilung in Teilchen mit halbzahligem und ganzzahligem Spin auftritt. Genauer gesagt gilt folgendes:

- Teilchen, deren Spin ein ganzzahliges Vielfaches von \hbar und damit ein Element aus der Menge $\{0, \hbar, 2\hbar, \dots\}$ ist, nennt man *Bosonen*. Für sie gilt kein Pauli-Prinzip, das heißt, sie können Zustände in beliebiger Zahl besetzen. Dabei folgen sie der Bose-Einstein-Statistik

$$f_{BE}(E) = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/k_B T] - 1}.$$

- Teilchen, deren Spin ein ungerades ganzzahliges Vielfaches von $\hbar/2$ und damit ein Element aus der Menge $\{\hbar/2, 3\hbar/2, \dots\}$ ist, nennt man *Fermionen*. Sie gehorchen

dem Pauli-Prinzip, das heißt jeder Zustand kann stets nur von höchstens einem Teilchen besetzt sein. Dabei gilt die Fermi-Dirac-Statistik

$$f_{\text{FD}}(E) = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/k_{\text{B}}T] + 1}.$$

Wie weit das erwähnte unterschiedliche Verhalten der beiden Teilchenfamilien geht, sieht man schon am graphischen Verlauf der beiden Verteilungsfunktionen (siehe Abb. 2.7). Hieran ist insbesondere erkennbar, daß die Abweichungen umso stärker sind, je geringer die Energie ist, und das bedeutet für reale Systeme, je tiefer deren Temperaturen sind. Umgekehrt werden sich die beiden Verteilungen für große Energien immer ähnlicher; beide gehen im Grenzfall $E \rightarrow \infty$ in die klassische Boltzmann-Statistik

$$f_{\text{B}}(E) = e^{-E/k_{\text{B}}T}$$

über. Als Konsequenz der Unterschiede findet man die bekannten typischen Phänomene, die im Zusammenhang von Bosonen und Fermionen auftreten, wie zum Beispiel Bose-Einstein-Kondensation, Supraleitung, Suprafluidität, Laser und dergleichen bei ersteren, Wärmekapazitäten und Energiebänder bei Metallen und Halbleitern, weiße Zwerge, Neutronensterne und anderes mehr bei letzteren. Die Trennung der beiden Teilchensorten ist nach allem, was man bis heute weiß, komplett. Insbesondere wurden bisher keine Prozesse beobachtet, bei denen sich Bosonen in Fermionen verwandeln oder umgekehrt¹²⁴.

Das Pauli-Prinzip und dessen Zusammenhang mit dem Spin der Elementarteilchen hatte zunächst reinen Ad-Hoc-Charakter. Erst die Konsequenzen daraus, wie sie oben exemplarisch beschrieben wurden, sind analytisch abgeleitete Resultate. Dies änderte sich Ende der 30er Jahre; da das sowohl aus historischer als auch insbesondere inhaltlicher Sicht den gesteckten Rahmen des vorliegenden Buches überschreitet, werfen wir hier nur einen kurzen Blick darauf. Im Mittelpunkt steht hier das *Spin-Statistik-Theorem*, das genau die zwei Seiten zuvor zitierten Eigenschaften von Bosonen und Fermionen und deren Statistik zum Inhalt hat¹²⁵, diese aber in den Rang eines Theorems der mathematischen Physik erhebt. Entscheidend ist dabei, daß dieses Theorem in Strenge *beweisbar* ist. Das gelang zuerst 1939 Markus Fierz [294]; eine erneute, systematischere und allgemeinere Herleitung wurde 1940 von Pauli veröffentlicht [681]. Dabei wird bereits wesentlich von Methoden der relativistischen Quantenfeldtheorie

¹²⁴Im Rahmen der sogenannten *Supersymmetrie* (oft als SUSY abgekürzt) gibt es Modelle, die solche Umwandlungen zulassen. Eine Theorie wird als supersymmetrisch bezeichnet, wenn sie invariant unter Transformationen ist, bei denen Bosonen zu Fermionen werden und umgekehrt. Teilchen, die sich unter solchen SUSY-Transformationen ineinander umwandeln, nennt man Superpartner. Sollte die Natur tatsächlich supersymmetrisch sein, so müßte es zu jedem Boson einen fermionischen und zu jedem Fermion einen bosonischen Superpartner geben. Solche SUSY-Teilchen heißen dann etwa Squarks, Selektrenen, Sneutronen, Sneutrinos oder auch Photinos, Winos, Zinos, Gluinos und so weiter. Bisher konnten keine SUSY-Teilchen nachgewiesen werden.

¹²⁵Genaugenommen noch etwas mehr, nämlich die Aussage, daß Bosonenzustände stets durch symmetrische, Fermionenzustände dagegen stets durch antisymmetrische Wellenfunktionen dargestellt werden. Vergleiche dazu Anmerkung 120 in Abschnitt 2.5.4.

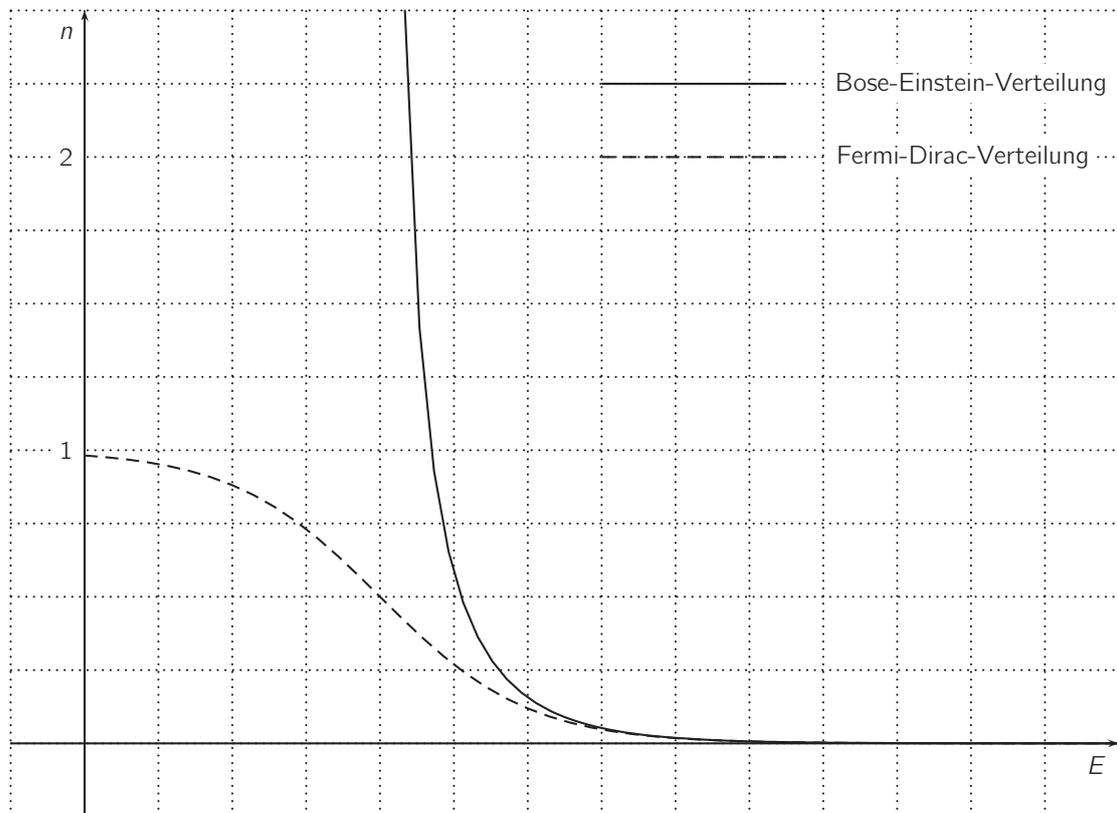


Abbildung 2.7: Verteilungsfunktionen für Bosonen und Fermionen

Gebrauch gemacht; insbesondere taucht neben der Forderung einer positiven Energiedichte auch das Postulat der *Mikrokausalität* auf, wonach Observablen auf raumartig getrennten Raum-Zeit-Punkten stets kommutieren müssen. Weitere, zu Beginn der 50er Jahre von Pauli beziehungsweise Julian Schwinger gefundene Beweise des Spin-Statistik-Theorems machen beispielsweise Gebrauch von der Unitarität der Streumatrix [682] oder von der Forderung nach Zeitumkehrinvarianz der Feldgleichungen, [803]¹²⁶. Erwähnung verdient auch der Maßstäbe in mathematischer Rigorosität setzende Beweis von Gerhart Lüders und Bruno Zumino aus dem Jahr 1958 [563]¹²⁷. Ein bedeutender konzeptioneller Sprung war dann ab 1964 der Beweis des Spin-Statistik-Theorems durch Rudolf Haag und Daniel Kastler im Rahmen der gerade am Anfang ihrer Entwicklung stehenden algebraischen Quantenfeldtheorie [368], mit der inzwischen zumindest ansatzweise eine mathematisch strenge Formulierung der relativistischen Quantenfeldtheorie auf der Grundlage weniger elementarer Axiome¹²⁸ vorliegt. Das

¹²⁶Hierzu findet sich bereits 1939 ein Vorläufer bei F. J. Belinfante [47]. Vergleiche auch [686].

¹²⁷Vergleiche auch [142].

¹²⁸Wie neben anderen die oben bereits erwähnten Postulate der Positivität der Energiedichte und der Mikrokausalität

Maß an Fundamentalität, welches der Theorie dadurch zugesprochen werden darf, überträgt sich auf die hieraus ableitbaren Resultate¹²⁹.

Mit der erstmaligen Formulierung der grundlegenden Gesetze der Quantenstatistik haben wir den Bereich der älteren Quantenmechanik eigentlich bereits verlassen. Die ursprünglich zu ihrem Auffinden verwendeten Methoden stammen jedoch zumindest formal und teilweise auch noch begrifflich noch immer aus der klassischen Physik oder ähneln dieser doch zumindest noch sehr. Das wird sich im nächsten Kapitel dramatisch ändern.

¹²⁹Von Bedeutung ist dieser Zugang besonders auch, weil dabei der Zusammenhang mit dem *CPT-Theorem* deutlich wird, das heißt mit der Aussage, daß die Naturgesetze unter gleichzeitiger Ladungs-, Paritäts- und Zeitumkehr invariant sind. Siehe dazu auch [515]. Das CPT-Theorem tauchte erstmals bei Schwingers oben zitiertes Arbeit [802] auf, wurde von Pauli explizit formuliert [683] und von Lüders erstmals bewiesen [561], [562]. Die wichtigsten Monographien zur algebraischen Quantenfeldtheorie sind [14], [256], [367] und [842].

Kapitel 3

Die neuere Quantenmechanik

Abgesehen von der Planckschen Strahlungsformel, der Bohr-Sommerfeldschen Quantisierung für sehr spezielle Systeme sowie insbesondere der Bose-Einstein- und Fermi-Dirac-Verteilung inklusive ihrer Unterteilung der materiellen Welt in Bosonen und Fermionen sind sämtliche bis hierhin beschriebenen Resultate aus heutiger Perspektive von rein historischem Interesse. Das Jahr 1923 steht in dieser Hinsicht für eine entscheidende Wende, da von nun an Entwicklungen stattfanden, die auch für die aktuelle Physik von Bedeutung sind. Damit erst gelang der Durchbruch der Bemühungen, eine Beschreibung mikrophysikalischer Prozesse jenseits der klassischen Mechanik zu finden. Dabei fand dieser Durchbruch sehr viel wirksamer statt, als man es sich zuvor je hätte träumen lassen können, denn was dabei entdeckt wurde, unterscheidet so deutlich von der zuvor als grundlegend erachteten Physik, daß man ohne weiteres von einem komplett neuen Weltbild sprechen kann. Dieser Sachverhalt soll zum Ausdruck gebracht werden, wenn dabei von der *neueren Quantenmechanik* die Rede ist. Letztere bildet nach wie vor die Grundlagen der modernen Quantenmechanik, wenn sie auch inzwischen in überwiegend erheblich anderer, sehr viel fortschrittlicherer mathematischer Form anzutreffen ist.

In den frühen zwanziger Jahren des vorigen Jahrhunderts befand sich die damals moderne Physik in einem eigentümlich hybriden Zustand, wie das vorige Kapitel gezeigt haben dürfte. Einerseits war man neuerdings in der Lage, bedeutende, kurz zuvor noch unüberwindlich scheinende Probleme der Mikrophysik zu lösen, noch dazu teilweise mit spektakulärer Genauigkeit, andererseits waren die hierfür verwendeten Methoden aus konzeptioneller Sicht höchst unbefriedigend. Das lag unter anderem an dem seltsamen Gemisch aus althergebrachten, klassischen und neuen, nicht wirklich verständlichen Konzepten, aus denen sich die Quantentheorie in dieser Phase zusammensetzte. Das Bohr-Sommerfeldsche Atommodell illustriert das in exemplarischer Weise; obwohl es revolutionäre Neuerungen zu bieten hat, ist es aus begrifflicher Sicht noch gänzlich in der klassischen Physik verhaftet, was schon an der dabei fundamentalen, anschaulichen Vorstellung von Umlaufbahnen der Elektronen zu erkennen ist. Sämtliche Abweichungen von der klassischen Mechanik sind dabei Ad-Hoc-Annahmen, die nicht weiter physikalisch begründet werden können. Dabei war die Idee einer entschiedenen Abkehr von der klassischen Physik bereits einige Jahre zuvor in Gestalt der Lichtquantenhy-

pothese in Erscheinung getreten, allerdings zunächst, anders als im Fall der Theorie von Bohr und Sommerfeld, ohne sich in der wissenschaftlichen Welt bemerkbar durchzusetzen. Die Erkenntnis, daß elektromagnetische Wellen in gewissem Sinn teilchenähnliches Verhalten zeigen können, brauchte zu ihrer Verbreitung und Akzeptanz rund zwei Jahrzehnte. Hinzu kamen die Schwierigkeiten, welche die Interpretationsversuche der Lichtquantenhypothese und der Frühformen des Welle-Teilchen-Dualismus vorerst noch bereiteten¹. Das ganze machte nicht im geringsten den Eindruck einer homogenen einheitlichen Beschreibung der Natur. Nach und nach setzte sich eine drastische Überzeugung durch: Zur Beseitigung der Schwierigkeiten mußte für den Zuständigkeitsbereich der Mikrophysik wohl eine *völlig neuartige Theorie* her.

3.1 Materiewellen

Die früheste, nur auf Lichtquanten angewandte Version des Welle-Teilchen-Dualismus hatte es unter anderem so schwer, weil mit Wellen und Teilchen zwei strikt getrennte Bereiche der Realität vorzuliegen schienen. Wellen waren aus der Optik längst vertraut, und auch Teilchenvorstellungen hatten sich inzwischen deutlich über ihre vormalige Existenz als Bestandteil der antiken griechischen Philosophie hinausentwickelt. Obwohl die „Atomhypothese“, wie man sich verbreitet auszudrücken pflegte, selbst bei einigen physikalischen Schwergewichten teilweise bis ins zwanzigste Jahrhundert hinein noch umstritten war, konnte man sich jedenfalls spätestens seit der Entdeckung des Elektrons durch J. J. Thomson 1897 zumindest in Experimentalphysikerkreisen darüber einig werden, es in der Mikrophysik mit real existierenden Teilchen zu tun zu haben. Die Unterschiede der beiden Konzepte sind bekanntlich sehr weitgehend, sodaß es rückblickend nicht sonderlich erstaunen dürfte, mit welchen Widerständen Versuche zu kämpfen hatten, vermeintlich reine Wellenphänomene mit Teilchenvorstellungen in Verbindung zu bringen. Wenn man jedoch schon einmal diesen ersten Schritt vollzogen hat, liegt es andererseits natürlich nahe, sich zu fragen, warum der Untergang der klassischen Physik nur von der Wellenseite aus erfolgen soll. Mit anderen Worten scheint sich eine Erweiterung des Welle-Teilchen-Dualismus auf Wellen *und* Teilchen aufzudrängen, die nicht nur teilchenartiges Verhalten von Wellen, sondern auch wellenartiges Verhalten von Teilchen postulieren sollte – eine Idee, die unter der Bezeichnung *Materiewellen* berühmt geworden ist.

Natürlich ist es aus heutiger Sicht sehr einfach, diese noch viel weitergehende Abkehr von klassischen Vorstellungen zu fordern. Im Jahr 1923 dagegen kam es einer weiteren Revolution gleich, insbesondere auch, weil zu dieser Zeit die Lichtquantenhypothese nach wie vor alles andere als akzeptiert war. Folglich fand Louis De Broglie, der die Materiewellen in die Physik eingeführt hat [121] - [124], damit zunächst ebenfalls kaum Akzeptanz. Daß man ihn zu dieser Zeit im Gegensatz zu seinem großen Bruder Maurice De Broglie, einem bedeutenden Experimentalphysiker, noch kaum kannte, war noch das kleinste Problem. Seine Doktorarbeit, deren wesentliche These die Einführung der Materiewellen darstellte, fand zunächst wenig Anklang bei den Gutachtern; erst als mit Paul Langevin einer von ihnen ein zweites Exemplar

¹Zur Entstehung, Verbreitung und Interpretation der Lichtquantenhypothese siehe Abschnitt 2.3.

der Arbeit Einstein zukommen ließ und dieser sich nach Rücksprache mit Born überaus positiv dazu äußerte, wurde sie als Dissertation angenommen.

De Broglie untermauerte seine folgenreiche Verallgemeinerung des Welle-Teilchen-Dualismus sehr passend mit einer dualistischen Argumentation. Einerseits folgert er aus dem Auftreten der Frequenz in der Planckschen Relation $E = h\nu$, daß neben einer korpuskularen Interpretation des Lichts auch der Aspekt der Periodizität Bedeutung behalten müsse, andererseits schloß er aus dem Auftreten ganzer Zahlen bei der Charakterisierung der Energieniveaus von Atomelektronen auf eine Analogie zu Interferenz, Eigenschwingungen und stehenden Wellen und damit gleichfalls auf etwas, das mit Periodizität zu tun haben sollte. Konsequenterweise gelangte er so zur ersten allgemeinen Formulierung des Welle-Teilchen-Dualismus: Zur Beschreibung *sowohl von Materie als auch von Strahlung* sind stets sowohl das Teilchenkonzept als auch das Wellenkonzept erforderlich.

Um diesen Dualismus manifest zu machen, war es notwendig, einen, wie sich De Broglie ausdrückte, Parallelismus zwischen der Bewegung von Teilchen und der Ausbreitung der damit verbundenen Wellen zu etablieren². In diesem Zusammenhang leitete er eine berühmte, später nach ihm benannte Formel her, mit der man materiellen Teilchen eine Wellenlänge zuordnen kann, die ebenfalls seinen Namen trägt. Um diese Herleitung nachzuvollziehen, betrachten wir zunächst die für Photonen geltende Beziehung $E = h\nu = \hbar\omega$ und nehmen nun an, daß diese auch für Materieteilchen gilt. Daraus folgt

$$E = \hbar\omega = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

und weiter

$$\omega = \frac{mc^2}{\hbar \sqrt{1 - v^2/c^2}}. \quad (3.1)$$

Für die Gruppengeschwindigkeit eines Wellenpakets gilt (Kettenregel!)

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\omega}{dv_g} \frac{dv_g}{dk},$$

und dies wiederum liefert für die Wellenzahl k die Beziehung

$$\frac{dk}{dv} = \frac{1}{v} \frac{d\omega}{dv} = \frac{m}{\hbar} (1 - v^2/c^2)^{-3/2},$$

was wir nun integrieren können, wobei wir annehmen, daß $k = 0$ gilt, wenn $v = 0$ vorliegt. Damit haben wir

$$k = \frac{m}{\hbar} \int_0^v (1 - v'^2/c^2)^{-3/2} dv' = \frac{mv}{\hbar \sqrt{1 - v^2/c^2}}.$$

²Die sehr konkrete Vorstellung, die De Broglie vom Teilchen- wie auch vom Wellencharakter des dadurch zu beschreibenden Vorgangs hatte, zeigt deutlich, in welcher unausgereifter Frühphase der Welle-Teilchen-Dualismus zur damaligen Zeit noch war.



Dies können wir umformen zu

$$\hbar k = \frac{mv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = p$$

oder, in vektorieller Schreibweise

$$\hbar \vec{k} = \vec{p}. \quad (3.2)$$

Das ist die de Broglie-Beziehung. Sie besagt, daß man materiellen Teilchen mit Impuls p die de Broglie-Wellenlänge

$$\lambda_{\text{dB}} = \frac{h}{p}$$

zuordnen kann.³

Zunächst handelte es sich hierbei um eine sehr gewagte Hypothese, die wie gesagt durch experimentelle Befunde nicht weiter gestützt wurde. Die Vorstellung von wellenähnlichem Verhalten materieller Teilchen schien, was ihre Durchsetzbarkeit in der Wissenschaft betraf, mit ähnlichen Startschwierigkeiten konfrontiert zu sein wie das Teilchenmodell des Lichts. Das änderte sich jedoch 1927, als Davisson und Germer [176] und unabhängig von ihnen auch G. P. Thomson [872], [873] als erste in der Lage waren, Beugungsversuche mit materiellen Teilchen, in ihrem Fall mit Elektronen, zu machen. In der Folgezeit gelang es zunächst langsam nach und nach, in neuerer Zeit jedoch in geradezu rasanter Weise bei immer mehr und vor allen Dingen auch immer schwereren Teilchen, Interferenzerscheinungen und damit wellenähnliches Verhalten nachzuweisen. Aktuelle Beugungsexperimente bestätigen den Welle-Teilchen-Dualismus bei Fullerenen (C_{60} [15], [16], C_{70} [640]) und noch komplexeren Molekülen wie Tetraphenylporphyrin ($m = 614$ u) und $C_{60}F_{48}$ ($m = 1632$ u) [366]. In all diesen Fällen bewährt sich die de Broglie-Beziehung (3.2) hervorragend. Wenn wir die geschichtliche Entwicklung kurz außer acht lassen (die Quantenmechanik gab es in ihrer neueren, im vorliegenden Kapitel beschriebenen Form teilweise schon vor den ersten Versuchen zur Beugung von Materieteilchen), so ist hier die Unzulänglichkeit der klassischen Physik und die Notwendigkeit eines diese ersetzenden Theoriengebäudes erneut besonders klar ersichtlich. 1924 gab es jedoch noch keine Beugungsversuche mit materiellen Teilchen, und so wurden auch die Materiewellen von der physikalischen Gemeinschaft zunächst eher skeptisch aufgenommen. Sie konnten sich jedoch sehr viel schneller etablieren als die Lichtquantenhypothese, und der nächste, noch viel weitergehende Schritt stand schon unmittelbar bevor.

Wir begeben uns nun wieder ins Jahr 1925. Hier finden wir trotz De Broglies eigentlich bahnbrechenden Spekulationen eine sehr unbefriedigende Situation vor, da das Bohr-Sommerfeldsche Modell trotz seiner partiellen Erfolge einerseits aufgrund seiner Ad-Hoc-Herkunft entscheidende Fragen offen lies und andererseits bei komplexeren Systemen als

³Im nichtrelativistischen Grenzfall läßt sich das auch als

$$\lambda_{\text{dB}} \approx \frac{h}{mv}$$

schreiben.

den wasserstoffähnlichen Atomen bereits nicht mehr anwendbar war und außerdem die Materiewellen sich irgendwie einem unmittelbar anschaulichen Verständnis ziemlich hartnäckig widersetzen. Die Physik schien in einer Sackgasse gelandet zu sein, was jedoch eine voreilige Schlußfolgerung war, wie wir heute wissen. Denn gerade diese vermeintlich verfahrenere Lage war Ausgangspunkt für den eigentlichen Beginn der Quantenmechanik, zumindest wenn man darunter das versteht, was üblicherweise als die neuere Quantenmechanik bezeichnet wird und abgesehen von veränderten Darstellungsmethoden die Grundlage der modernen Theorie bildet. Dieser Neuanfang spielte sich in mehreren Abschnitten ab, wobei die ersten Etappen unabhängig von einander auf getrennten Wegen beschriftet wurden, nämlich in Form der *Matrizenmechanik* einerseits und der *Wellenmechanik* andererseits.

Genaugenommen muß man hier eigentlich von den *drei* ersten unabhängigen Abschnitten reden und sich für den Anfang das Jahr 1924 aussuchen. Denn noch vor den ersten beiden Zugängen zur neueren Quantenmechanik veröffentlichte Gregor Wentzel in zwei Arbeiten wiederum völlig unabhängig einen eigenen Weg zur Beschreibung quantenmechanischer Vorgänge [916], [917], der erst zwanzig Jahre später wiederentdeckt wurde und nichts weniger als die vorweggenommene Feynmansche Pfadintegral-Quantisierung darstellt. Wentzels Verfahren war es zunächst nicht vergönnt, die Physik ähnlich stark wie ihre beiden Verwandten zu beeinflussen; sie wurde im Gegenteil vorübergehend wieder vergessen und erst 1996 von Antoci und Liebscher wiederentdeckt [12], [13]⁴. Die weitere Entwicklung der neueren Quantenmechanik sah sich erst einmal eine Zeit lang ausschließlich durch Matrizenmechanik und Wellenmechanik bestimmt⁵. In den folgenden Abschnitten schauen wir uns die drei historischen ersten Zugänge etwas genauer an.

3.2 Die ersten Pfadintegrale

Auch wenn zu Beginn der zwanziger Jahre eine wirklich funktionierende Theorie mikrophysikalischer Vorgänge noch nicht vorlag, war bereits seit Jahren klar, daß der einzuschlagende Weg prinzipiell weg von der klassischen Physik führen würde. Der erste, der beim Versuch einer Beschreibung mikrophysikalischer Prozesse diesen nichtklassischen Aspekt explizit und insbesondere physikalisch anstatt nur in Form von ad-hoc-Annahmen berücksichtigte, war wie gesagt Gregor Wentzel. Klassische Physik bedeutete im wesentlichen Hamiltonsche Mechanik, und so nahm sich Wentzel bei der ersten seiner beiden oben erwähnten Arbeiten vor, ein invariantes Maß der Abweichung subatomarer Prozesse von dieser zu entwickeln, wobei er exemplarisch an Übergänge atomarer Systeme im Zusammenhang mit der Ausbreitung von Licht dachte – ein damals ausgiebig bepflügtes Feld. Solche Übergänge wie auch ganz allge-

⁴Das einzige mir bekannte Lehrbuch, in dem Wentzels Arbeit erwähnt wird, wenn auch nur in einer Fußnote, ist [952].

⁵Die klassische Darstellung schlechthin des Stands im Jahre 1933 ist Band XXVI.1 des Handbuchs der Physik [316], in dem Bethe, Hund, Mott, Pauli, Rubinowicz und Wentzel auf 853 Seiten den Werdegang der Quantenmechanik von den Anfängen bis zum damals aktuellen Stand im Detail beschreiben, unter besonderer Berücksichtigung konkreter Anwendungen. Einen kürzeren Überblick aus neuerer Sicht findet man in [780].

mein alle durch Licht bei seiner Ausbreitung in einem Medium an dessen Atomen ausgelöste Prozesse sind in Wentzels Worten stets „unmechanische Störungen“. Er bezeichnet diesen Sachverhalt der allgemeinen zeitgenössischen Haltung entsprechend als wichtigste Grundlage der Quantentheorie.

Wentzel führt zur Beschreibung von durch die Lichtfortpflanzung „in Mitleidenschaft gezogenen“ Bewegungen der Atomsysteme des betrachteten Mediums kanonische Koordinaten β_j und deren konjugierte Impulse α_j ein, die so zu wählen sind, daß letztere Konstanten der Bewegung sind, was durch geeignete kanonische Transformationen stets möglich ist⁶. Als Maß für die Abweichung von der Mechanik definiert er das über alle Änderungen von α_j zu erstreckende Integral $\int \sum_{j=1}^n \alpha_j d\beta_j$ und damit weiter die Phase

$$\phi = \frac{1}{h} \int \sum_{j=1}^n \alpha_j d\beta_j;$$

n ist dabei die Zahl der Freiheitsgrade des gesamten Systems. Wentzel betrachtet nun die negative Gesamtenergie $-W$ als zusätzliche Koordinate α_{n+1} und die Zeit t als dazu konjugierte Koordinate β_{n+1} , etwas ebenfalls stets möglich ist⁷. Den durch diese verallgemeinerten Koordinaten und Impulse aufgespannten Raum nennt man gelegentlich den *erweiterten Phasenraum*. Obige Phase wird damit zu

$$\phi = \frac{1}{h} \left(\int \sum_{j=1}^n \alpha_j d\beta_j - \int t dW \right). \quad (3.3)$$

Solche Quantenphasen sollen die klassischen Wellenphasen ersetzen, was Wentzel zu seiner zentralen Idee, der von ihm *Interferenzformel* genannten Relation führt. Er betrachtet zwei Systeme A und B , wobei das erste eine elektromagnetische Welle emittieren und das zweite diese wieder absorbieren soll. $\{s\}$ sei die Menge der unterschiedlichen Wege von A nach B , die einem Lichtquant hierbei zur Verfügung stehen, f_s die vektorielle Amplitude der zugehörigen klassischen Welle, die den Weg s verfolgt, und ϕ_s die zu s gehörende Quantenphase. Damit läßt sich die komplexe Amplitude

$$\mathfrak{F} = \sum_s f_s e^{2\pi i \phi_s} \quad (3.4)$$

definieren. Gesucht ist nun die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Lichtquant auf einem beliebigen der Wege s von A nach B gelangt. Aus klassischer Sicht wäre das

$$|\mathfrak{F}_0|^2 = \left| \sum_s f_s \right|^2;$$

⁶Siehe Abschnitt 1.1.2.4.

⁷Siehe auch hierzu Abschnitt 1.1.2.4.

Wentzel nennt diese Größen die Summe der *A priori-Wahrscheinlichkeiten* der einzelnen Lichtwege s . Aus quantenmechanischer Sicht ergibt sich jedoch (in Wentzels Schreibweise)

$$\mathfrak{P}(A, B) = J |\mathfrak{F}_0|^2$$

mit

$$J = \frac{(\mathfrak{F} \mathfrak{F}^*)}{|\mathfrak{F}_0|^2},$$

also (ohne Wentzels Umweg über die Größe J geschrieben)

$$\mathfrak{P}(A, B) = \mathfrak{F} \mathfrak{F}^*. \quad (3.5)$$

Gleichung (3.5) ist Wentzels *Interferenzformel*.

Sie enthält die wesentliche Idee des Pfadintegral-Zugangs zur Berechnung quantenmechanischer Übergangsamplituden. Das sieht man, wenn man die Amplitude (3.4) betrachtet, die ausführlicher geschrieben die Gestalt

$$\mathfrak{F} = \sum_s \mathfrak{f}_s \exp\left(\frac{2\pi i}{h} \int \sum_{j=0}^n \alpha_j d\beta_j\right) = \sum_s \mathfrak{f}_s \exp\left[\frac{2\pi i}{h} \left(\int \sum_{j=1}^n \alpha_j d\beta_j - \int t dW\right)\right]$$

hat. Da im erweiterten Phasenraum die erweiterte Hamilton-Funktion $H(\alpha_i, \beta_i) + \alpha_{n+1}$ verschwindet, gilt dort

$$L dt = \sum_{j=0}^n \alpha_j d\beta_j$$

und folglich auch

$$S = \int L dt = \int \sum_{j=0}^n \alpha_j d\beta_j,$$

wobei L die Lagrangefunktion und S das Wirkungsintegral des betrachteten Systems sind. Damit nimmt (3.4) die Form

$$\mathfrak{F} = \sum_s \mathfrak{f}_s e^{2\pi i S/h}$$

an; hierbei handelt es sich um eine gewichtete Summe über alle möglichen Pfade von einem festen Punkt A zu einem zweiten festen Punkt E im Konfigurationsraum, womit zusätzlich zu den klassischen Pfaden insbesondere auch alle solchen gemeint sind, die keine Lösungen der klassischen Bewegungsgleichungen sind. Die Gewichtung erfolgt dabei im wesentlichen über Phasenfaktoren, welche das klassische Wirkungsintegral des betrachteten Systems beinhalten. Die klassischen vektoriellen Amplituden \mathfrak{f}_s wurden von Wentzel eingefügt, da er speziell die Ausbreitung von Licht betrachtete. Die Grundidee seiner Interferenzformel ist jedoch von sehr viel allgemeinerer Natur, sodaß man leicht von den \mathfrak{f}_s abstrahieren kann. Es liegt damit exakt dasselbe Prinzip vor wie bei den Feynmanschen Pfadintegralen. Dort wird die Übergangsamplitude vom Punkt q_A zum Punkt q_B im Konfigurationsraum gemäß

$$\langle q_A | q_B \rangle = \int \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int L(q_i, \dot{q}_i, t) dt\right] \mathcal{D}q(t) = \int e^{iS/\hbar} \mathcal{D}q(t)$$

berechnet. Das Auftreten von Summen anstelle von Integralen in Wentzels Formel dürfte weitgehend der Tatsache geschuldet sein, daß die Funktionalintegration zur damaligen Zeit eine noch sehr neue Entdeckung und keineswegs Allgemeingut war. Was bei Wentzels Theorie noch völlig fehlte, waren daher auch Techniken zur expliziten Berechnung von Pfadintegralen und Übergangsamplituden. Die grundlegende Idee war jedoch bereits uneingeschränkt vorhanden.

Dennoch rief Wentzels Theorie in der Fachwelt kaum Resonanz hervor. Bis auf wenige Ausnahmen wurde sie als Beitrag zur Debatte über die Teilchen- oder Wellennatur des Lichts aufgefaßt und geriet alsbald genau wie die meisten anderen Arbeiten zu diesem Thema in Vergessenheit⁸. Ähnliche, aber längst nicht so weit gediehene Ansätze tauchten eher beiläufig etwas später auch bei Dirac auf [204], [205], [206], ohne daß er dabei Wentzel zitierte. Dirac dachte dabei über die Bedeutung der klassischen Wirkungsfunktion in der neuen Quantenmechanik nach. Feynman war, darauf aufbauend, wie er selbst betonte, dann der erste, der die Pfadintegral-Formulierung der Quantenmechanik zur Praxisreife und damit auch in das Bewußtsein der physikalischen Welt brachte [291], [292], [293]. Allerdings führte auch er seinen Zugang in heuristischer, mathematisch in keiner Weise sauber definierter Form ein, und wie sich später zeigte, sind Feynmansche Pfadintegrale in ihrer ursprünglichen, von ihrem Namensgeber eingeführten Form mathematisch gar nicht definierbar. Mathematisch strenge Formulierungen des Pfadintegral-Begriffs sind zwar in vielfältiger Weise möglich, diese sind aber entweder nicht allgemeingültig, oder sie machen, wenn sie auf physikalische Systeme angewandt werden sollen, eine begriffliche Uminterpretation derselben erforderlich⁹. Damit soll die immense praktische Bedeutung der Pfadintegrale jedoch keineswegs in Abrede gestellt werden; für die nichtrelativistische Standard-Quantenmechanik sind sie zwar ziemlich unbrauchbar, in der Hochenergiephysik sind sie jedoch bei Verzicht auf letzte mathematische Rigorosität häufig in der Lage, ansonsten seitenlange Rechnungen auf das Format einer kleineren Wandtafel zu reduzieren. In der mathematischen Quantenfeldtheorie sieht die Situation etwas anders aus. Im Rahmen der *euklidischen Feldtheorie* lassen sich quantenfeldtheoretische Pfadintegrale durch Übergang von minkowskischen zu euklidischen Feldtheorien auch formal streng definieren. Die Pfadintegral-Quantisierung stellt damit genaugenommen nur für die Quantenfeldtheorie einen auch aus philosophischer Sicht fundamentalen Zugang dar. Eine Einführung in die mathematischen Grundlagen der Pfadintegrale findet man in [897].

3.3 Matrizenmechanik

Trotz der Pionierarbeit von Wentzel sah sich die physikalische Fachwelt 1925 nach wie vor in der Situation, bisher vergeblich nach einer konsistenten Theorie mikrophysikalischer Vorgänge gesucht zu haben. Die anschaulichen Versuche von Bohr und Sommerfeld waren wie beschrieben nur auf den ersten Blick erfolgreich und erwiesen sich auf den zweiten sowohl

⁸Einen ausführlichen Überblick zur zeitgenössischen Rezeption von Wentzels Interferenzformel liefert [12]; vergleiche auch [13].

⁹Beispielsweise durch Einführung einer imaginären Zeitkoordinaten

konzeptionell als auch im Hinblick auf ihre Verallgemeinerungsfähigkeit als unbefriedigend. Der wesentliche Impuls zur Entwicklung einer neuen Theorie bestand nun darin, *eben nicht* zu versuchen, irgendeine womöglich künstlich erscheinende anschauliche Erklärung für die vertrackte Situation zu finden, sondern im Gegenteil von anschaulichen Vorstellungen *gänzlich abzusehen*. Das sollte nach dem Willen der Protagonisten den zusätzlichen Effekt haben, sämtliche unbeobachtbaren Begriffe aus der Theorie zu eliminieren¹⁰, wobei die Eigenschaft, beobachtbar zu sein, nur den Frequenzen und Intensitäten der Spektren atomarer Systeme zugebilligt wurde und insbesondere die aus klassischer Sicht und auch aus derjenigen der älteren Quantenmechanik fundamentalen Größen Ort und Impuls hiervon ausgeschlossen wurden. Heisenberg, Born und Jordan rangen sich im erwähnten Jahr 1925 zu diesem Schritt durch und konnten so eine Theorie entwickeln [112], [113], [399], [401], die als *Matrizenmechanik* berühmt geworden ist und den Anfangspunkt der Quantenmechanik in ihrer neueren Form bildet¹¹.

3.3.1 Die Matrizenformulierung der Quantenmechanik

Die Aufgabenstellung, die sich die Matrizenmechanik vornimmt, ist die folgende: Man möchte für das zu beschreibende System die Energieniveaus, in welchen dasselbe auftreten kann, und die möglichen Übergänge zwischen diesen Energieniveaus berechnen, also natürlich wieder gerade das, was mit dem Bohr-Sommerfeldschen Atommodell für Wasserstoff und wasserstoffähnliche Systeme bereits gelungen war. Dies soll aber ohne die dort erforderlichen Tricks geschehen und stattdessen auf der Grundlage eines allgemeinen, von der klassischen Mechanik völlig unabhängigen und nur formal an diese angelehnten Prinzips aufgebaut sein; außerdem soll die Theorie nicht nur für spezielle, sondern für alle Systeme funktionieren. In der Matrizenmechanik erreicht man dies wie gesagt durch eine völlige Abkehr von jeglichen anschaulichen Vorstellungen¹². Wie der Name schon sagt, läuft die Sache auf eine Verwendung von Matrizen hinaus, sodaß es sich um eine algebraische Theorie handelt. Natürlich sind es nicht die Matrizen der elementaren linearen Algebra, sondern unendliche Matrizen, die einen entspre-

¹⁰Diese strikt positivistische oder eigentlich sogar instrumentalistische Haltung rief insbesondere Einsteins Kritik hervor, der stets betonte, daß die strenge Beschränkung einer physikalischen Theorie auf beobachtbare Größen gar nicht funktionieren kann, da erst die Theorie selbst festlegt, was überhaupt beobachtbar ist. Heisenberg selbst schwenkte wenig später ebenfalls zu dieser Auffassung um, wie wir in Abschnitt 3.9.3.2 sehen werden.

¹¹Der Ruhm, diesen Schritt als erster begangen zu haben, gebührt dabei Heisenberg; dieser hatte außerdem zuvor bereits zusammen mit Kramers einen Aufsatz veröffentlicht, der wegbereitend dafür war [514]. Ähnliches gilt auch für eine Arbeit von van Vleck [894]. Eine ausführliche Untersuchung der Vorgeschichte der Matrizenmechanik und der damit zusammenhängenden Bedeutung dieser beiden Arbeiten wurde von Duncan und Janssen veröffentlicht [220], [221].

¹²Die meisten Standard-Lehrbücher der Quantenmechanik gehen, teilweise abgesehen von einigen historischen Bemerkungen, nicht weiter auf die Matrizenmechanik ein; in der Spezialliteratur dagegen gibt es reichhaltige Ausführungen darüber. Eine kurze Einführung findet sich in Heisenbergs Vorträgen an der University of Chicago von 1929, die in Buchform vorliegen [406], eine ausführliche Darstellung mit Anwendungsbeispielen in [354] und [483], mathematisch präzise entwickelt wird die Thematik in [257]. Einige grundlegende Details werden ausführlich in [6] betrachtet.

chend aufwendigeren mathematischen Apparat erfordern¹³. Genaugenommen müssen hier bei vermeintlich grundlegenden Begriffen wie Spurbildungen, Determinanten oder Entwicklungen stets auch Konvergenzfragen betrachtet werden. Die Gründungsväter der Quantenmechanik hatten jedoch verständlicherweise andere Ziele im Sinn und kümmerten sich daher zunächst nicht um solche Details.

3.3.1.1 Orts-, Impuls- und Hamiltonmatrizen

Wir nehmen an, das betrachtete System habe N Freiheitsgrade. Ausgangspunkt ist die klassische Mechanik in ihrer Hamiltonschen Form¹⁴ und speziell die Hamiltonfunktion

$$H = H(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$$

des Systems. Im Fall konservativer Systeme ist das gerade die Gesamtenergie. Die q_i sind die N Koordinaten und die p_j deren N kanonisch konjugierte Impulse¹⁵. Die zentrale Idee der Matrizenmechanik ist es, diese kanonischen Variablen durch ein System von $2N$ zeitabhängigen unendlichen komplexen Matrizen $\mathbf{q}_1(t), \dots, \mathbf{q}_N(t), \mathbf{p}_1(t), \dots, \mathbf{p}_N(t)$ zu ersetzen. Alle physikalischen Größen sind als Funktionen dieser kanonischen Matrizen darzustellen und werden damit selbst zu unendlichen Matrizen. Das gilt insbesondere auch für die Hamiltonfunktion; aus ihr entsteht die unendliche Matrix

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N).$$

Sämtliche hier auftretenden Matrizen $\mathbf{A} = \{a_{ij}\}$ dürfen komplex sein, es müssen allerdings ausschließlich hermitesche Matrizen sein, das heißt für alle $i, j = 1, \dots, N$ gilt $a_{ij} = a_{ji}^*$.

Auch wenn die dynamischen Größen in der Matrizenmechanik von ganz anderer Struktur sind als in der klassischen Mechanik, so bleibt doch deren *Hamiltonsche Struktur* erhalten, denn die Matrizen $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N$ erfüllen Gleichungen, die von genau derselben Form sind wie die klassischen Hamiltonschen Gleichungen, nämlich

$$\dot{\mathbf{q}}_j = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}_j}, \quad \dot{\mathbf{p}}_j = -\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}_j}, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (3.6)$$

Die Zeitabhängigkeit ist im speziellen Fall stationärer Systeme gegeben durch

$$\mathbf{q}_j(t) = \mathbf{q}_j(0) e^{2\pi i \nu_{mn} t}, \quad \mathbf{p}_j(t) = \mathbf{p}_j(0) e^{2\pi i \nu_{mn} t} \quad (3.7)$$

für $j = 1, 2, \dots, N$ und $m, n \in \mathbb{N}^*$. Dabei sind die $\mathbf{q}_1(0), \dots, \mathbf{q}_N(0), \mathbf{p}_1(0), \dots, \mathbf{p}_N(0)$ konstante komplexe unendliche Matrizen und die ν_{mn} die Frequenzen der elektromagnetischen

¹³Die erste systematische Darstellung einer Theorie unendlicher Matrizen erschien in Form einer Monografie von A. Wintner [936] etwa vier Jahre später.

¹⁴Siehe die Abschnitte 1.1.2.3 und 1.1.2.4.

¹⁵Wenn keine Mißverständnisse zu befürchten sind, werden wir die Indizes $i = 1, 2, \dots, N$ weglassen.

Wellen, die das System absorbieren oder emittieren kann; sie sollen die zusätzlichen Bedingungen

$$\begin{aligned} \nu_{mn} + \nu_{nl} + \nu_{lm} &= 0 & \text{für alle } m, n, l \in \mathbb{N}^*, \\ \nu_{mn} &\neq 0 & \text{für } m \neq n \end{aligned}$$

erfüllen, womit gleichzeitig die Erklärung der atomaren Spektrallinien mit angelegt ist¹⁶. Aus der Forderung nach Hermitizität folgen nun die Relationen

$$\begin{aligned} \{q_{j,nm}\}(0) \{q_{j,mn}\}(0) &= |\{q_{j,nm}\}(0)|^2, \\ \nu_{nm} &= -\nu_{mn}. \end{aligned}$$

Wählt man kartesische Koordinaten \mathbf{q}_j , so ist die Größe $\sum_{j=1}^N |\{q_{j,nm}\}(0)|^2$ ein Maß für die Wahrscheinlichkeit der Übergänge vom Niveau n zum Niveau m und umgekehrt.

Für matrixwertige Funktionen $\mathbf{F}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ der kanonischen Matrizen gilt im stationären Fall stets

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}(0) e^{2\pi i \nu_{mn} t}$$

mit $\mathbf{F}(0) = \mathbf{F}(\mathbf{p}(0), \mathbf{q}(0))$. Für die zeitlichen Ableitungen $\dot{\mathbf{F}}$ solcher Funktionen gilt daher

$$\{\dot{f}_{nm}\} = 2\pi i \nu_{nm} \{f_{nm}\}(0). \quad (3.8)$$

¹⁶Heisenberg, Born und Jordan betrachten ausschließlich diesen stationären Fall, in dem sich übrigens die Bewegungsgleichungen (3.6) über ein „quantenmechanisches Hamiltonsches Prinzip“ herleiten lassen. Während die klassischen Hamiltonschen Gleichungen aus der Bedingung

$$\int_{t_1}^{t_2} L dt = \int_{t_1}^{t_2} [p\dot{q} - H(p, q)] dt \stackrel{!}{=} \text{Extremum}$$

folgen (siehe Abschnitte 1.1.2.1 und 1.1.2.3), fordern Born und Jordan stattdessen

$$\sum_{n=0}^{\infty} \{L_{nn}\} \stackrel{!}{=} \text{Extremum.}$$

mit $\mathbf{L} = \mathbf{p}\dot{\mathbf{q}} - \mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$. Aus

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \sum_{n=0}^{\infty} \{L_{nn}\} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \sum_{n=0}^{\infty} \{L_{nn}\} = 0$$

folgt dann zunächst

$$\begin{aligned} 2\pi i \nu_{nm} \{q_{nm}\} &= \frac{\partial}{\partial \{p_{nm}\}} \sum_{n=0}^{\infty} \{L_{nn}\}, \\ 2\pi i \nu_{nm} \{p_{nm}\} &= \frac{\partial}{\partial \{q_{nm}\}} \sum_{n=0}^{\infty} \{L_{nn}\} \end{aligned}$$

und damit unter Verwendung der Hermitizität der Matrizen \mathbf{p} und \mathbf{q} die Gleichungen (3.6).

Da die Frequenzen ν_{nm} nur für $n = m$ verschwinden, folgt aus $\mathbf{F} = 0$ sofort $F_{nm} = \delta_{nm} F_{nn}$ für alle $n, m \in \mathbb{N}$, das heißt, in diesem Fall ist \mathbf{F} eine *Diagonalmatrix*. Davon wird gleich Gebrauch gemacht.

Bis hierher handelt es sich erst einmal nur um eine Wiederholung der Hamiltonschen Mechanik mit komplizierteren Zahlen. Der Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik sollte nun mit einer Quantisierungsbedingung manifest gemacht werden. Ausgangspunkt ist dabei für Heisenberg die Sommerfeldsche Quantisierungsregel¹⁷

$$\oint p dq = nh, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (3.9)$$

beziehungsweise eine von Thomas und Kuhn daraus abgeleitete Beziehung [399]. Für eine fest gewählte Frequenz ν kann man die linke Seite von (3.9) auch als

$$J = \oint p dq = \int_0^{1/\nu} p \dot{q} dt$$

schreiben¹⁸ und unter Verwendung der Fourierentwicklungen

$$p = \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} p_{\tau} e^{2\pi i \nu \tau t}, \quad q = \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} q_{\tau} e^{2\pi i \nu \tau t}, \quad (3.10)$$

in die Form

$$\sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \tau \frac{\partial (q_{\tau} p_{-\tau})}{\partial J} = -\frac{i}{2\pi} \quad (3.11)$$

bringen. Ist speziell $p = m\dot{q}$, so folgt aus (3.10)

$$p = 2\pi i \nu m \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \tau q_{\tau} e^{2\pi i \nu \tau t},$$

also

$$p_{\tau} = 2\pi i \nu m \tau q_{\tau}$$

und damit

$$\sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \nu \tau^2 \frac{\partial (q_{\tau} q_{-\tau})}{\partial J} = -\frac{1}{4\pi^2 m}.$$

Die Relation von Thomas und Kuhn [517], [871] ist das aus dieser Differentialgleichung für Matrizen \mathbf{p} und \mathbf{q} mit $\mathbf{p} = m \dot{\mathbf{q}}$ korrespondenzmäßig folgende algebraische Gleichungssystem. Man erhält zunächst

$$\sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \nu_{n+\tau n} (\{q_{n+\tau n}\} \{q_{n n+\tau}\} - \{q_{n n-\tau}\} \{q_{n-\tau n}\}) = \frac{h}{2\pi i}$$

¹⁷Siehe Abschnitt 2.4.2.

¹⁸Siehe Abschnitt 1.1.2.6.

und wegen $p_{nm} = q_{nm} = 0$, falls einer der Indices negativ ist, weiter

$$\sum_k \nu_{kn} |\{q_{nk}\}|^2 = \frac{h}{8\pi^2 m}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Born und Jordan verallgemeinern dies wenig später auf generalisierte Koordinaten, für welche die Relation $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{q}}$ nicht gelten muß [112]. Dazu starten sie direkt bei der Differentialgleichung (3.11) und übertragen diese in die Differenzgleichungen

$$\sum_{\tau=-\infty}^{\infty} (\{q_{n+\tau n}\} \{p_{n+\tau n}\} - \{q_{n-\tau n}\} \{p_{n-\tau n}\}) = \frac{h}{2\pi i}$$

beziehungsweise analog wie oben

$$\sum_k (\{p_{nk}\} \{q_{kn}\} - \{q_{nk}\} \{p_{kn}\}) = \frac{h}{2\pi i}, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (3.12)$$

Das führt nun unmittelbar zu einer der bis heute prominentesten quantenmechanischen Relationen überhaupt [112], was sich im unendlichen Gleichungssystem (3.12) schon unübersehbar andeutet. Betrachtet man nämlich die Größe $\mathbf{d} = \mathbf{p}\mathbf{q} - \mathbf{q}\mathbf{p}$ beziehungsweise deren zeitliche Ableitung¹⁹, so findet man

$$\dot{\mathbf{d}} = \dot{\mathbf{p}}\mathbf{q} + \mathbf{p}\dot{\mathbf{q}} - \dot{\mathbf{q}}\mathbf{p} - \mathbf{q}\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{q} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}} \mathbf{q} + \mathbf{p} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}} \mathbf{p} = 0,$$

das heißt, \mathbf{d} ist eine Diagonalmatrix. Mit (3.12) folgt daraus

$$\mathbf{p}\mathbf{q} - \mathbf{q}\mathbf{p} = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{1}, \quad (3.13)$$

oder ausführlicher geschrieben

$$\mathbf{p}_i \mathbf{q}_j - \mathbf{q}_i \mathbf{p}_j = \frac{h}{2\pi i} \delta_{ij} \mathbf{1}.$$

für $i, j = 1, 2, \dots, N$. Das sind die *kanonischen Vertauschungsrelationen*, die bei Born und Jordan noch „verschärfte Quantenbedingung“ heißen²⁰. Diese Vertauschungsrelationen treten

¹⁹Hier taucht erstmals der *Kommutator* zweier nichtkommutierender Größen auf. Born und Jordan verwenden dafür an einer Stelle die Notation

$$\mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A} = \left| \begin{array}{c} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \end{array} \right|$$

und verzichten ansonsten auf eine Abkürzung. Die heute übliche Schreibweise

$$\mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A} = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]$$

wurde sechs Wochen später von Dirac eingeführt [193].

²⁰Dabei ist es natürlich wesentlich, daß die Matrizenmultiplikation nichtkommutativ ist.

an die Stelle der Poisson-Klammern der klassischen Mechanik, was im nächsten Abschnitt noch sehr viel deutlicher erkennbar sein wird²¹. Mit vollständiger Induktion beweist man sofort die Verallgemeinerungen

$$\begin{aligned}\mathbf{p}^n \mathbf{q} - \mathbf{q} \mathbf{p}^n &= \frac{nh}{2\pi i} \mathbf{p}^{n-1}, \\ \mathbf{q}^n \mathbf{p} - \mathbf{p} \mathbf{q}^n &= -\frac{nh}{2\pi i} \mathbf{q}^{n-1}\end{aligned}$$

für alle $n \in \mathbb{N}$.

3.3.1.2 Energieniveaus und Übergangsfrequenzen

Die wesentliche Aufgabenstellung bei der Beschreibung stationärer Zustände ist natürlich die Berechnung der Energieniveaus des betrachteten Systems. Auf dem Weg dorthin betrachten Born und Jordan zunächst den Spezialfall Hamiltonscher Matrizen, die in den verallgemeinerten Koordinaten und Impulsen jeweils für sich polynomial sind, als solche der Form

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_1(\mathbf{p}) + \mathbf{H}_2(\mathbf{q}) \quad (3.14)$$

mit

$$\mathbf{H}_1(\mathbf{p}) = \sum_n a_n \mathbf{p}^n, \quad \mathbf{H}_2(\mathbf{q}) = \sum_n b_n \mathbf{q}^n.$$

Damit findet man zunächst

$$\begin{aligned}\mathbf{H} \mathbf{q} - \mathbf{q} \mathbf{H} &= \sum_n (a_n \mathbf{p}^n \mathbf{q} + b_n \mathbf{q}^{n+1} - a_n \mathbf{q} \mathbf{p}^n - b_n \mathbf{q}^{n+1}) \\ &= \sum_n [a_n (\mathbf{p}^n \mathbf{q} - \mathbf{q} \mathbf{p}^n)] = \frac{h}{2\pi i} \sum_n a_n n \mathbf{p}^{n-1}\end{aligned}$$

sowie analog

$$\mathbf{H} \mathbf{p} - \mathbf{p} \mathbf{H} = \frac{h}{2\pi i} \sum_n a_n n \mathbf{q}^{n-1},$$

unter Verwendung von

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial \mathbf{H}_1}{\partial \mathbf{p}} = \sum_n a_n n \mathbf{p}^{n-1}, \quad \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}} = \frac{\partial \mathbf{H}_2}{\partial \mathbf{q}} = \sum_n b_n n \mathbf{q}^{n-1}$$

²¹Das wurde erstmals von Dirac festgestellt [193]. H. J. Groenwald zeigte allerdings 1946, daß diese Korrespondenz nicht in völliger Allgemeinheit gilt [360]; eine solche läßt sich nur etablieren, wenn man die Definition der Poisson-Klammern abändert. Dabei wurde ein geeigneter nichtkommutativer Produktbegriff für Funktionen auf dem Phasenraum von Groenwald gleich mitgeliefert [360]. J. E. Moyal präziserte den Begriff 1949 [622]. Die nach ihm benannten Moyal-Klammern bilden die Grundlage der sogenannten Deformations-Quantisierung [43], [44]. Einen Überblick hierzu liefert [902].

damit weiter

$$\mathbf{H}\mathbf{q} - \mathbf{q}\mathbf{H} = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}}$$

$$\mathbf{H}\mathbf{p} - \mathbf{p}\mathbf{H} = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}},$$

und mit Hilfe der kanonischen Gleichungen schließlich

$$\dot{\mathbf{q}} = \frac{2\pi i}{h} (\mathbf{H}\mathbf{q} - \mathbf{q}\mathbf{H}),$$

$$\dot{\mathbf{p}} = \frac{2\pi i}{h} (\mathbf{H}\mathbf{p} - \mathbf{p}\mathbf{H}).$$

Diese Resultate lassen sich auf beliebige Funktionen $\mathbf{F}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ verallgemeinern, die sich als Potenzreihen der kanonischen Matrizen schreiben lassen, denn es gilt

$$\mathbf{H}\mathbf{X}\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{Y}\mathbf{H} = (\mathbf{H}\mathbf{X} + \mathbf{X}\mathbf{H})\mathbf{Y} - \mathbf{X}(\mathbf{Y}\mathbf{H} - \mathbf{H}\mathbf{Y}),$$

und man erhält analog zu oben

$$\dot{\mathbf{F}} = \frac{2\pi i}{h} (\mathbf{H}\mathbf{F} - \mathbf{F}\mathbf{H}), \quad (3.15)$$

was wiederum formal einem bekannten Resultat der klassischen Mechanik entspricht²².

Für den Sonderfall $\mathbf{F} = \mathbf{H}$ folgt unmittelbar

$$\dot{\mathbf{H}} = 0,$$

womit man einerseits den Energiesatz wiedergefunden und andererseits festgestellt hat, daß \mathbf{H} eine Diagonalmatrix ist. Mit (3.8) folgt daraus außerdem

$$h\nu_{nm} \{q_{nm}\} = (\{H_{nn}\} - \{H_{mm}\}) \{q_{nm}\},$$

$$h\nu_{nm} \{p_{nm}\} = (\{H_{nn}\} - \{H_{mm}\}) \{p_{nm}\}.$$

Für die Energieniveaus E_n und Übergangsfrequenzen $\nu_{nm} = \Delta E_{nm}/h = (E_m - E_n)/h$ gilt somit

$$\nu_{nm} = (\{H_{nn}\} - \{H_{mm}\})/h \quad (3.16)$$

sowie insbesondere

$$\{H_{nn}\} = E_n,$$

das heißt, *die Diagonalelemente der Hamiltonschen Matrix sind die Energieniveaus des Systems.*

²²Diese Gleichungen wurden von Born und Jordan gefunden [112], die verbreitet übliche Bezeichnung „Heisenbergsche Bewegungsgleichungen“ ist folglich historisch nicht korrekt.

Für Hamiltonmatrizen, die von allgemeinerer Form als (3.14) sind, gilt im allgemeinen nicht $\mathbf{H} = 0$, das heißt, sie sind normalerweise nicht diagonal. Das Verfahren der Matrizenmechanik zur Berechnung der Energieniveaus des betrachteten Systems besteht folglich darin, durch geeignete Wahl der Matrizen $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N$ die Matrix \mathbf{H} zu *diagonalisieren*. Die Diagonalelemente der diagonalisierten Matrix sind dann genau die verschiedenen möglichen Energieniveaus des betrachteten Systems. Entsprechend können Übergangsenergien und damit Spektren berechnet werden. Eine solche Diagonalisierung ist stets möglich; ist die Hamilton-Matrix $\mathbf{H}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)$ nicht diagonal, gibt es eine *unitäre* Matrix \mathbf{U} , das heißt eine Matrix mit der zusätzlichen Eigenschaft $\mathbf{U}\mathbf{U}^+ = \mathbf{U}^+\mathbf{U} = \mathbf{1}$, so daß die Matrix

$$\mathbf{H}'(\mathbf{q}'_1, \dots, \mathbf{q}'_N, \mathbf{p}'_1, \dots, \mathbf{p}'_N) = \mathbf{U}\mathbf{H}(\mathbf{U}\mathbf{q}_1\mathbf{U}^+, \dots, \mathbf{U}\mathbf{q}_N\mathbf{U}^+, \mathbf{U}\mathbf{p}_1\mathbf{U}^+, \dots, \mathbf{U}\mathbf{p}_N\mathbf{U}^+)\mathbf{U}^+$$

diagonal ist²³. Außerdem gelten die kanonischen Vertauschungsrelationen (3.13) auch für die transformierten Matrizen $\mathbf{q}'_1, \dots, \mathbf{q}'_N, \mathbf{p}'_1, \dots, \mathbf{p}'_N$. Transformationen der Form

$$\mathbf{A} \longrightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{U}^+$$

heißen *unitäre Transformationen*. Sie entsprechen den kanonischen Transformationen in der klassischen Mechanik²⁴.

Um die Hamilton-Matrix eines physikalischen Systems zu diagonalisieren, benötigen wir deren Eigenwerte; diese sind bekanntlich gleichzeitig die Diagonalelemente der diagonalisierten Matrix. Zur Berechnung der Eigenwerte unendlicher Matrizen ist das gewöhnliche Verfahren über charakteristische Polynome natürlich nicht anwendbar²⁵. Typische quantenmechanische Systeme weisen Hamilton-Matrizen auf, die hermitesch sind und nach unten beschränkte Spektren aufweisen. Für diesen Fall wurde ein konstruktives Verfahren von H. S. Green angegeben [354]. Man geht dabei wie folgt vor: Die unendliche Matrix \mathbf{A} weise die genannten Eigenschaften auf. Wir definieren rekursiv eine Folge $\{\mathbf{A}_j\}_{j \in \mathbb{N}^*}$ durch

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \mathbf{A}_1 &= \mathbf{B}_1^+ \mathbf{B}_1 + \lambda_1, \\ \mathbf{A}_2 &= \mathbf{B}_1 \mathbf{B}_1^+ \lambda_2 &= \mathbf{B}_2^+ \mathbf{B}_2 + \lambda_2, \\ &\dots & \\ \mathbf{A}_j &= \mathbf{B}_j^+ \mathbf{B}_j + \lambda_j, \\ \mathbf{A}_{j+1} &= \mathbf{B}_j \mathbf{B}_{j+1} + \lambda_j, \\ &\dots & \end{aligned}$$

Dabei sind die λ_j gewöhnliche reelle Zahlen, die nicht eindeutig bestimmt sein müssen; bei mehreren Möglichkeiten ist jeweils dasjenige λ_j zu wählen, das den größten Wert hat, sodaß zusätzlich $\lambda_{j+1} \geq \lambda_j$ gilt für alle $j \in \mathbb{N}^*$. Ebenfalls für alle $j \in \mathbb{N}^*$ gilt auch

²³Ist \mathbf{A} eine quadratische Matrix, dann erhält man die adjungierte Matrix \mathbf{A}^+ durch Vertauschen von Zeilen und Spalten und anschließendem Konjugieren aller Einträge.

²⁴Dieser Zusammenhang taucht erstmals in [113] auf.

²⁵Die Pionierarbeiten zur Matrizenmechanik liefern noch keinen Algorithmus zur Diagonalisierung von Hamiltonmatrizen. Ein störungstheoretisches Verfahren wird in [113] entwickelt.

$$\mathbf{A}_{j+1} \mathbf{B}_j = (\mathbf{B}_j \mathbf{B}_j^+ + \lambda_j) \mathbf{B}_j = \mathbf{B}_j (\mathbf{B}_j \mathbf{B}_j^+ + \lambda_j) = \mathbf{B}_j \mathbf{A}. \quad (3.17)$$

Nun sei $\psi = \{\psi_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ eine Folge mit

$$\sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^* \psi_n = 1, \quad (3.18)$$

die wir als unendlichen Spaltenvektor interpretieren²⁶. Damit können wir die Relation (3.18) auch in der Form $\psi \psi^+ = 1$ schreiben. Zusätzlich gelte für alle $m \in \mathbb{N}$

$$\sum_{n=0}^{\infty} A_{mn} \psi_n = \lambda \psi_m$$

für ein $\lambda \in \mathbb{R}$, oder kurz und präzise $\mathbf{A} \psi = \lambda \psi$, das heißt, ψ sei ein Eigenvektor der Matrix \mathbf{A} zum Eigenwert λ ²⁷. Nun betrachten wir für ein beliebiges $n \in \mathbb{N}$ den Vektor

$$\varphi^{(n)} = \mathbf{B}_n \mathbf{B}_{n-1} \cdots \mathbf{B}_2 \mathbf{B}_1 \psi.$$

Für alle $n \in \mathbb{N}$ gilt dabei

$$\varphi^{(n)+} \varphi^{(n)} \geq 0.$$

Für $n = 1$ findet man

$$\varphi^{(1)+} \varphi^{(1)} = \psi^+ \mathbf{B}_1^+ \mathbf{B}_1 \psi = \psi^+ (\mathbf{A}_1 - \lambda_1) \psi = \lambda - \lambda_1 \geq 0,$$

das heißt, kein Eigenwert von \mathbf{A} ist kleiner als λ_1 . Mit (3.17) folgt weiter für $n = 2$

$$\begin{aligned} \varphi^{(2)+} \varphi^{(2)} &= \psi^+ \mathbf{B}_1^+ \mathbf{B}_2^+ \mathbf{B}_2 \mathbf{B}_1 \psi = \psi^+ \mathbf{B}_1^+ (\mathbf{A}_2 - \lambda_2) \mathbf{B}_1 \psi \\ &= \psi^+ \mathbf{B}_1^+ \mathbf{B}_1 (\mathbf{A}_1 - \lambda_2) \psi = (\lambda - \lambda_2) \varphi^{(1)+} \varphi^{(1)} \\ &= (\lambda - \lambda_2) (\lambda - \lambda_1) \geq 0, \end{aligned}$$

also ist entweder $\lambda \geq \lambda_2$ oder $\lambda = \lambda_1$. Für beliebiges $n \in \mathbb{N}$ erhalten wir daher induktiv

$$\begin{aligned} \varphi^{(n)+} \varphi^{(n)} &= \psi^+ \mathbf{B}_1^+ \cdots \mathbf{B}_{n-1}^+ \mathbf{B}_n^+ \mathbf{B}_n \mathbf{B}_{n-1} \cdots \mathbf{B}_1 \psi \\ &= \psi^+ \mathbf{B}_1^+ \cdots \mathbf{B}_{n-1}^+ (\mathbf{A}_n - \lambda_n) \mathbf{B}_{n-1} \cdots \mathbf{B}_1 \psi \\ &= \psi^+ \mathbf{B}_1^+ \cdots \mathbf{B}_{n-1}^+ \mathbf{B}_{n-1} \cdots \mathbf{B}_1 (\mathbf{A}_1 - \lambda_n) \psi \end{aligned}$$

²⁶Solche unendlichen Spaltenvektoren sind natürlich gerade die Zustandsvektoren der späteren von Neumannschen und Diracschen Quantenmechanik. Der Begriff der Zustandsvektoren taucht jedoch in der ursprünglichen Form der Matrizenmechanik überhaupt nicht auf. Siehe dazu auch Abschnitt 3.5.

²⁷Hermiteische Matrizen haben stets reelle Eigenwerte.

$$\begin{aligned}
 &= (\lambda - \lambda_n) \varphi^{(n-1)+} \varphi^{(n-1)} \\
 &\dots \\
 &= (\lambda - \lambda_n) (\lambda - \lambda_{n-1}) \cdots (\lambda - \lambda_1) \geq 0.
 \end{aligned}$$

Somit ist entweder $\lambda \geq \lambda_n$ oder $(\lambda - \lambda_{n-1})(\lambda - \lambda_{n-2}) \cdots (\lambda - \lambda_1) = 0$, das heißt, für alle Eigenwerte muß entweder $\lambda \in \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$ oder $\lambda > \lambda_j$ für $j = 1, 2, \dots, n$ gelten. Damit sind die Eigenwerte von \mathbf{A} eindeutig bestimmt. Denn ist die Folge $\{\lambda_j\}_{j \in \mathbb{N}^*}$ beschränkt, so ist entweder $\lambda \in \{\lambda_j\}_{j \in \mathbb{N}^*}$ oder aber $\lambda \geq \sup_{j \in \mathbb{N}^*} \{\lambda_j\}$ beliebig. Ist $\{\lambda_j\}_{j \in \mathbb{N}^*}$ unbeschränkt,

so gilt generell $\lambda \in \{\lambda_j\}_{j \in \mathbb{N}^*}$. Im ersten Fall hat der Operator ein Spektrum mit diskretem und kontinuierlichem Anteil, im zweiten Fall hat er ein rein diskretes Spektrum.

Die Matrizenmechanik erwies sich schnell als der gesuchte Durchbruch auf der Suche nach einer Theorie für mikrophysikalische Prozesse, allerdings um den Preis der Aufgabe jeglicher Anschaulichkeit. Es wird gar nicht erst versucht, die verwendeten Matrizen mit irgendwelchen real existierenden physikalischen Objekten in Verbindung zu bringen, insbesondere auch, um wie erwähnt unbeobachtbare Begriffe gänzlich aus der Theorie zu verbannen. In der ursprünglichen Fassung der Matrizenmechanik wurde das durch das völlige Fehlen jeglichen Zustandsbegriffs untermauert; die stationären Zustände von Elektronen in Atomhüllen beispielsweise wurden als Elektronenbahnen und damit überkommenes Relikt des anschaulichen Bohrschen Atommodells gedeutet. Der Zugang über die Hamiltonfunktion legt es zwar nahe anzunehmen, daß die Matrizen $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N$ irgendetwas mit Orten und die Matrizen $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N$ irgendetwas mit Impulsen zu tun haben; in gewissem Sinne stimmt das auch, doch führt eine zu weitgehende Auslegung dieser Analogie bekanntlich sehr schnell zu unlösbaren Problemen und Widersprüchen. In der Anfangsphase der Matrizenmechanik zog man daraus die Konsequenz, besser ganz auf gewohnte Deutungen jeder Art zu verzichten. Wie wir heute wissen, war das die erste Begegnung mit der Eigenschaft der Quantenmechanik, eine notwendigerweise unanschauliche Beschreibung der Natur zu liefern. Diese prinzipielle Unanschaulichkeit wurde außerhalb von Göttingen keineswegs begrüßt, sondern eher mit einer Mischung aus abwartender Distanz, Unbehagen und Staunen aufgenommen. Dennoch war damit ein erster entscheidender Schritt zur gesuchten neuen Theorie, oder, wie sich bald zeigen sollte, einer speziellen Form der gesuchten neuen Theorie, vollzogen.

3.3.2 Das Wasserstoffatom als Beispiel

Das Spektrum des Wasserstoffatoms darf als prominentestes Anwendungsgebiet der Quantenmechanik betrachtet werden; weil eine den experimentellen Ergebnissen standhaltende Formel schon sehr früh vorlag, war es gleichzeitig der Standard-Test für die neuen Theorien. Im Rahmen der Matrizenmechanik erwies sich diese Aufgabe als schwieriges Problem, an dem sich beispielsweise Heisenberg vergeblich abmühte²⁸.

²⁸Heisenberg, Born und Jordan berechneten als erstes Anwendungsbeispiel stattdessen die Energieniveaus des harmonischen und anharmonischen Oszillators [112], [113], [399].

3.3.2.1 Runge-Lenz-Vektor

Die algebraische Herleitung des Wasserstoffspektrums gelang zuerst Pauli [673]²⁹. Er verwendete dazu allerdings kein spezifisch matrixmechanisches Verfahren, sondern den aus der klassischen Mechanik bekannten *Runge-Lenz-Vektor*³⁰. Dieser ist neben der Energie, dem Bahndrehimpuls und dessen z -Komponente eine weitere bei Zentralpotentialen auftauchende Erhaltungsgröße. Klassisch kann man sich ihn als zeitlich konstanten Vektor in der Bahnebene vorstellen, der vom Kraftzentrum zum Perihel der Bahn zeigt.

Der Runge-Lenz-Vektor ist definiert durch

$$\vec{A} = \frac{\vec{p}}{\mu} \times \vec{L} - \gamma \frac{\vec{r}}{r};$$

dabei ist $\gamma = Z_1 Z_2 e^2$ und μ die reduzierte Masse des betrachteten Kepler-Systems³¹. \vec{L} ist dessen Bahndrehimpuls. Die quantenmechanische Version des Runge-Lenz-Vektors ist in der Sprache der Matrizenmechanik die Matrix

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2\mu} (\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p}) - \frac{\gamma}{r} \mathbf{r}.$$

Die Matrix des Bahndrehimpuls erhält man dabei analog zur klassischen Mechanik durch

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}.$$

Die im Vergleich zum klassischen Aufbau veränderte Anordnung von Impuls und Drehimpuls sorgt dafür, daß die Runge-Lenz-Matrix hermitesch ist³². Das ist ein Standardtrick, der häufig anzutreffen ist.

Wir beginnen mit einem Überblick der Eigenschaften der Runge-Lenz-Matrix, wobei sich zeigt, daß hier im wesentlichen dasselbe passiert wie im klassischen Fall. Zunächst erhält man durch geduldiges Nachrechnen

$$\mathbf{A} \mathbf{H} - \mathbf{H} \mathbf{A} = 0.$$

²⁹Das war noch bevor Schrödinger dasselbe Resultat im Rahmen seiner Wellenmechanik auf analytischem Weg fand. Die Veröffentlichung von Paulis Arbeit erfolgte wenige Tage nach derjenigen einer Arbeit von Dirac, in der dieser einen Teil der Lösung des Wasserstoffproblems vorgeführt hatte [194]. In derselben Arbeit führte Dirac die Bezeichnungen *c-numbers* (classical numbers) und *q-numbers* (quantum numbers) für kommutierende klassische beziehungsweise nichtkommutierende quantenmechanische Größen ein, die auch heute noch insbesondere im englischsprachigen Raum verbreitet in Gebrauch sind.

³⁰Der Runge-Lenz-Vektor erfuhr nach seiner Entdeckung durch J. Hermann [417], [418] und J. Bernoulli [57] eine Reihe von Wiederentdeckungen durch Laplace [538], Hamilton [386], [387] und Gibbs [329], bevor er von C. Runge [751] und W. Lenz [547] eher beiläufig erwähnt wurde, was ihm seinen heutigen Namen eintrug. Das Konzept ist sehr weitgehend verallgemeinerungsfähig, siehe beispielsweise [542].

³¹Pauli verwendet für das Vektorprodukt die Schreibweise $[FG]$ anstelle der heute üblichen Form $F \times G$.

³²In der Wellenmechanik findet man formal genau dasselbe, nur spricht man dann vom Runge-Lenz-Operator. An jeder Stelle, an der in diesem Abschnitt das Wort „Matrix“ steht, kann man sich genauso das Wort „Operator“ denken. Die gesamte Rechnung kann in formal strenger Weise funktionalanalytisch unter Berücksichtigung sämtlicher Details wie Definitionsbereichsfragen der Operatoren, Einschränkungen derselben auf deren jeweiligen Eigenräume der diskreten Eigenwerte und dergleichen erfolgen und läuft dabei rechentechnisch genauso wie hier beschrieben ab.

Folglich ist \mathbf{A} auch in der Quantenmechanik eine Erhaltungsgröße. Die Komponenten der Runge-Lenz-Matrix lauten

$$\begin{aligned}\mathbf{A}_i &= \frac{1}{2\mu} \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} (\mathbf{p}_j \mathbf{L}_k - \mathbf{L}_j \mathbf{p}_k) - \frac{\gamma}{r} \mathbf{r}_i \\ &= \frac{1}{2\mu} (\mathbf{p}^2 \mathbf{r}_i + \mathbf{r}_i \mathbf{p}^2 - \mathbf{p} \mathbf{r} \hat{P}_i - \mathbf{p}_j \mathbf{r} \mathbf{p}_j) - \frac{\gamma}{r} \hat{X}_i.\end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{L} = 0, \quad (3.19)$$

was das quantenmechanische Analogon der klassischen räumlichen Lage von \mathbf{A} ist: Der klassische Runge-Lenz-Vektor liegt wie erwähnt zeitlich konstant in der Bahnebene des Teilchens; dieser Sachverhalt läßt sich zwar nicht anschaulich auf die Quantenmechanik übertragen, findet dort aber seine Entsprechung in den Relationen (3.19). Aus der Komponentenschreibweise der Runge-Lenz-Matrix erhält man für deren Quadrat den Ausdruck

$$\mathbf{A}^2 = \frac{\hbar^2}{2\pi^2\mu} \mathbf{H} (\mathbf{L}^2 + 1) + \gamma^2. \quad (3.20)$$

Zur Bestimmung der diskreten Eigenwerte der Hamiltonmatrix notieren wir zunächst die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned}\mathbf{L}_i \mathbf{L}_j - \mathbf{L}_j \mathbf{L}_i &= \frac{i\hbar}{2\pi} \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \mathbf{L}_k, \\ \mathbf{L}_i \mathbf{A}_j - \mathbf{A}_j \mathbf{L}_i &= \frac{i\hbar}{2\pi} \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \mathbf{A}_k, \\ \mathbf{A}_i \mathbf{A}_j - \mathbf{A}_j \mathbf{A}_i &= -\frac{i\hbar^2}{2\pi^2\mu} \mathbf{H} \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \mathbf{L}_k,\end{aligned}$$

außerdem definieren wir neue Matrizen gemäß

$$\begin{aligned}\mathbf{B} &:= \frac{1}{2} \left(\mathbf{L} + \sqrt{\frac{\mu}{-2\mathbf{H}}} \mathbf{A} \right), \\ \mathbf{C} &:= \frac{1}{2} \left(\mathbf{L} - \sqrt{\frac{\mu}{-2\mathbf{H}}} \mathbf{A} \right);\end{aligned}$$

dabei ist $1/\mathbf{H}$ eine Diagonalmatrix, deren nichtverschwindende Einträge die Kehrwerte der Energieeigenwerte des Systems sind. Die Matrizen \mathbf{B} und \mathbf{C} erfüllen die Vertauschungsrelationen

$$\mathbf{B}_i \mathbf{B}_j - \mathbf{B}_j \mathbf{B}_i = \frac{i\hbar}{2\pi} \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \mathbf{B}_k,$$

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_i \mathbf{C}_j - \mathbf{C}_j \mathbf{C}_i &= \frac{i\hbar}{2\pi} \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \mathbf{C}_k, \\ \mathbf{B}_i \mathbf{C}_j - \mathbf{C}_j \mathbf{B}_i &= 0 \end{aligned}$$

und sind damit formal zwei vertauschbare Drehimpulsmatrizen. Die Eigenwerte der Matrizen \mathbf{B}^2 und \mathbf{C}^2 sind folglich wie bei Drehimpulsquadraten üblich³³ $b(b+1)\hbar^2$ beziehungsweise $c(c+1)\hbar^2$ mit $b, c = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$. Für die Matrizen selbst findet man mit Hilfe von (3.19)

$$4\mathbf{B}^2 = 4\mathbf{C}^2 = \mathbf{L}^2 - \frac{\mu}{2\mathbf{H}} \mathbf{A}^2$$

und mit (3.20) weiter

$$4\mathbf{B}^2 = 4\mathbf{C}^2 = -\frac{\hbar^2}{4\pi^2} - \frac{\mu\gamma^2}{2\mathbf{H}}. \quad (3.21)$$

Folglich sind die Eigenwerte der rechten und linken Seite dieser Gleichung ebenfalls gleich, und es folgt die Relation

$$4\hbar^2 b(b+1) = -\frac{\hbar^2}{4\pi^2} - \frac{\mu\gamma^2}{2E_n}.$$

Auflösen nach E_n führt auf

$$E_n = -\frac{2\pi^2\mu\gamma^2}{4\hbar^2 b(b+1) + \hbar^2} = -\frac{2\pi^2\mu\gamma^2}{2\hbar^2 (2b+1)^2},$$

und Einführen der Hauptquantenzahl $n = b(b+1)$ sowie Einsetzen des oben angegebenen Ausdrucks für γ liefert schließlich

$$E_n = -\frac{2\pi^2\mu Z_1 Z_2 e^4}{\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

also gerade wieder das Resultat der Bohr-Sommerfeldschen Theorie.

Als Nebenprodukt erhält man hier auch den Zusammenhang zwischen den Quantenzahlen n und l . Aus der Relation

$$\mathbf{L}^2 = 4\mathbf{B}^2 + \frac{\mu}{2\mathbf{H}} \mathbf{A}^2$$

folgt aufgrund der Voraussetzung $E < 0$ für die Eigenwerte

$$l(l+1) \leq 4b(b+1) = n^2 - 1 = (n-1)(n+1)$$

und damit

$$l \leq n-1.$$

Auch der Entartungsgrad läßt sich auf diesem Weg in einfachster Weise ermitteln. Die z -Komponenten der beiden Drehimpulsmatrizen $\vec{\mathbf{B}}$ und $\vec{\mathbf{C}}$ verfügen über dieselben Eigenfunktionen wie die Quadrate dieser Matrizen, wobei zu jedem Eigenwert b beziehungsweise c der

³³Siehe zum Beispiel [225].

Drehimpulsquadrate die Eigenwerte $-b, -b+1, \dots, b$ beziehungsweise $-c, -c+1, \dots, c$ der z -Komponenten der Drehimpulse auftreten³⁴. Das sind jeweils $2b+1$ Stück, sodaß der Entartungsgrad insgesamt

$$d = (2b+1)^2 = n^2$$

ist.

Eine mathematische Bemerkung zum Abschluß dieses Abschnitts sei noch angeführt. Die sechs Komponenten der Matrizen $\vec{\mathbf{L}}$ und $\vec{\mathbf{A}}$ oder auch von $\vec{\mathbf{B}}$ und $\vec{\mathbf{C}}$ bilden zusammen mit ihren Kommutatoren eine Lie-Algebra und sind damit die Generatoren der zugehörigen Lie-Gruppe. Man kann zeigen, daß diese Lie-Gruppe die Gruppe $SO(4)$ ist. Das quantenmechanische Keplerproblem weist damit formal eine Symmetrie unter Drehungen im \mathbb{R}^4 auf, wobei es sich natürlich nicht um eine äußere, anschauliche Symmetrie handelt.

3.3.2.2 Direkter Weg mit Matrizenmechanik

Paulis Herleitung der Energieeigenwerte des Wasserstoffatoms ist zwar ein geniales Stück Physikgeschichte und enthält darüberhinaus eine wegweisende Verwendung eines Symmetrieprinzips, es stellt jedoch wie gesagt genaugenommen keine typisch matrizenmechanische Berechnung dar. Auf der Basis der demnächst zu besprechenden Wellenmechanik könnte das Verfahren genauso durchgeführt werden³⁵. Ein rein matrizenmechanische Vorgehensweise wurde zunächst nicht gefunden; eine solche ist nichtsdestotrotz natürlich möglich, wovon wir uns sogleich überzeugen werden.

Die hier beschriebene Variante wurde von Green angegeben [354]; sie läßt die matrizenmechanische Natur der Berechnung unmittelbar erkennen. Aus der klassischen Mechanik kennt man die Hamiltonfunktion des Keplerproblems im Coulomb-Potential; sie lautet

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{L^2}{r^2} \right) - \frac{Ze^2}{r},$$

wobei M die Masse und P der Impuls des gesamten Atoms, m dagegen die Masse, p_r der Impuls und L der Drehimpuls des Elektrons ist. Die Hamilton-Matrix ist damit von der Form

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2M} \mathbf{p}^2 + \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p}_r^2 + \frac{1}{r^2} \mathbf{L}^2 \right) - \frac{Ze^2}{r}.$$

Das gesamte Atom bewege sich kräftefrei, sodaß für dessen gesamten Impuls der Impulserhaltungssatz gilt, außerdem garantiert das Coulomb-Potential als konservatives Potential die Gültigkeit des Drehimpulserhaltungssatzes. Aus den Bewegungsgleichungen (3.15) folgt daher, daß \mathbf{H} sowohl mit \mathbf{P} als auch mit \mathbf{L}^2 kommutiert und diese drei Matrizen daher gemeinsame Eigenvektoren besitzen; die zugehörigen Eigenwerte seien E, T und L^2 . Aus der

³⁴Siehe auch hierzu [225].

³⁵Und wird es in modernen Darstellungen auch, die sich allerdings üblicherweise nicht in elementaren Lehrbüchern finden lassen.

Experimentalphysik oder durch direkte Berechnung³⁶ ist bekannt, daß $L^2 = l(l+1)\hbar^2$ gilt mit $l \in \mathbb{N}$. Darüberhinaus kann man durch Wechsel in ein mitbewegtes Koordinatensystem oder durch Betrachtung ruhender oder langsam bewegter Atome $P = 0$ voraussetzen³⁷. Verwenden wir die Abkürzung $C = Ze^2$, so gilt es nun, bis auf einen Vorfaktor $2m$ die Matrix

$$\mathbf{A} = \mathbf{p}_r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{r^2} - \frac{C}{r}$$

zu diagonalisieren. Wie oben beschrieben definieren wir dazu rekursiv

$$\mathbf{A} = \mathbf{B}_1^+ \mathbf{B}_1 + \lambda_1, \quad \mathbf{A}_j = \mathbf{B}_j^+ \mathbf{B}_j + \lambda_j, \quad \mathbf{A}_{j+1} = \mathbf{B}_j \mathbf{B}_j^+ + \lambda_j$$

für $j \in \mathbb{N}^*$ und erhalten damit zunächst

$$\mathbf{B}_1^+ \mathbf{B}_1 + \lambda_1 = \mathbf{p}_r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{r^2} - \frac{C}{r} \quad (3.22)$$

und

$$\mathbf{B}_{j+1}^+ \mathbf{B}_{j+1} + \lambda_{j+1} = \mathbf{B}_j \mathbf{B}_j^+ + \lambda_j. \quad (3.23)$$

Der Ansatz

$$\mathbf{B}_j = \mathbf{p}_r + i \left(\alpha_j + \frac{\beta_j}{r} \right)$$

mit $\alpha_j, \beta_j \in \mathbb{R}$ liefert außerdem

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_j^+ \mathbf{B}_j &= \left[\mathbf{p}_r - i \left(\alpha_j + \frac{\beta_j}{r} \right) \right] \left[\mathbf{p}_r + i \left(\alpha_j + \frac{\beta_j}{r} \right) \right] \\ &= \mathbf{p}_r^2 + \alpha_j^2 + \frac{2\alpha_j\beta_j}{r} + \frac{\beta_j(\beta_j - \hbar)}{r^2} \end{aligned} \quad (3.24)$$

sowie

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_j \mathbf{B}_j^+ &= \left[\mathbf{p}_r + i \left(\alpha_j + \frac{\beta_j}{r} \right) \right] \left[\mathbf{p}_r - i \left(\alpha_j + \frac{\beta_j}{r} \right) \right] \\ &= \mathbf{p}_r^2 + \alpha_j^2 + \frac{2\alpha_j\beta_j}{r} + \frac{\beta_j(\beta_j + \hbar)}{r^2}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

³⁶Für die Herleitung mit Hilfe der Matrizenmechanik siehe auch hier [354].

³⁷Genaugenommen muß man aus klassischer Sicht die Mitbewegung des Atomkerns mitberücksichtigen. Das kann man jedoch für Zentralpotentiale umgehen, indem man das eigentlich vorliegende Zweikörperproblem in die freie Bewegung des Schwerpunkts und die Relativbewegung der beiden Komponenten aufspaltet; diese Relativbewegung ist äquivalent zu einem Ein-Teilchen-Problem mit der *reduzierten Masse*

$$\mu = \frac{mM}{m+M}.$$

Im Fall wasserstoffähnlicher Atome gilt in guter Näherung $\mu \approx m$. Vergleiche Abschnitt 2.4.1.

Daraus ergeben sich Bestimmungsgleichungen für α_1, β_1 und λ_1 . Aus (3.22) und (3.24) folgt

$$\alpha_1 \beta_1 = -\frac{C}{2}$$

sowie

$$\beta_1 (\beta_1 - \hbar) = l(l+1)\hbar$$

und damit

$$\lambda_1 + \alpha_1^2 = 0.$$

Für diese Gleichungen gibt es zwei Lösungen:

$$\begin{aligned} \alpha_1^{(1)} &= \frac{C}{2l\hbar}, & \beta_1^{(1)} &= -l\hbar, & \lambda_1^{(1)} &= -\frac{C^2}{(2l\hbar)^2}; \\ \alpha_1^{(2)} &= -\frac{C}{2(l+1)\hbar}, & \beta_1^{(2)} &= (l+1)\hbar, & \lambda_1^{(2)} &= -\frac{C^2}{4(l+1)\hbar^2}. \end{aligned}$$

Wegen $\lambda_1^{(2)} > \lambda_1^{(1)}$ ist der zweiten Lösung der Vorzug zu geben. Analog erhalten wir rekursive Bestimmungsgleichungen für $\alpha_{j+1}, \beta_{j+1}$ und λ_{j+1} . (3.23) und (3.25) liefern

$$\alpha_{j+1} \beta_{j+1} = \alpha_j \beta_j$$

sowie

$$\beta_{j+1} (\beta_{j+1} - \hbar) = \beta_j (\beta_j + \hbar)$$

und damit

$$\lambda_{j+1} + \alpha_{j+1}^2 = \lambda_j + \alpha_j^2,$$

wofür es ebenfalls zwei Lösungen gibt. Die erste lautet

$$\begin{aligned} \alpha_{j+1}^{(1)} &= -\alpha_j^{(1)}, \\ \beta_{j+1}^{(1)} &= -\beta_j^{(1)}, \\ \lambda_{j+1}^{(1)} &= \lambda_j^{(1)}; \end{aligned}$$

die zweite erhält man rekursiv aus

$$\beta_{j+1}^{(2)} = \beta_j^{(2)} + \hbar = \beta_{j-1}^{(2)} + 2\hbar = \dots = \beta_1^{(2)} + j\hbar = (l+1+j)\hbar,$$

$$\alpha_{j+1}^{(2)} \beta_{j+1}^{(2)} = \alpha_j^{(2)} \beta_j^{(2)} = \dots = \alpha_1^{(2)} \beta_1^{(2)} = -\frac{C}{2},$$

$$\lambda_{j+1}^{(2)} + \alpha_{j+1}^{(2)2} = \lambda_j^{(2)} + \alpha_j^{(2)2} = \dots = \lambda_1^{(2)} + \alpha_1^{(2)2} = 0;$$

sie lautet damit explizit

$$\alpha_j^{(2)} = -\frac{C}{2(l+j)\hbar}, \quad \beta_j^{(2)} = (l+j)\hbar, \quad \lambda_j^{(2)} = -\frac{C^2}{[2(l+j)\hbar]^2}.$$

Die erste Lösung ist physikalisch unbrauchbar. Da $l \in \mathbb{N}$ und $j \in \mathbb{N}^*$ beliebig sind, liefert die zweite zunächst diskrete Eigenwerte der Form

$$\lambda_n = -\frac{Ze^2}{4\hbar^2 n^2}, \quad n \in \mathbb{N}^*,$$

und da das eine nach oben beschränkte Folge mit oberer Schranke 0 ist, gibt es weitere kontinuierliche Eigenwerte, die jeden beliebigen Wert $\lambda \geq 0$ annehmen. Der Operator \mathbf{H} besitzt damit einerseits die diskreten Eigenwerte

$$E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n \in \mathbb{N}^*$$

und andererseits die kontinuierlichen Eigenwerte $\{\lambda \in \mathbb{R} \mid \lambda \geq 0\}$; erstere bilden die diskreten Energieniveaus des gebundenen Elektrons in der Atomhülle eines wasserstoffähnlichen Atoms, letztere beschreiben die Energie des freien Elektrons eines ionisierten wasserstoffähnlichen Atoms. Natürlich sind das dieselben Resultate wie diejenigen der anderen Lösungsverfahren.

3.4 Wellenmechanik

Die Matrizenmechanik fand trotz ihres insbesondere quantitativen Erfolgs zunächst einmal durchaus nicht nur begeisterte Anhänger. Der bedeutendste Vertreter einer eher zurückhaltenden Rezeption der Göttinger Philosophie war, wie sich alsbald zeigte, Erwin Schrödinger. Er war von Anfang an nicht bereit, auf eine anschauliche Deutung theoretischer Begriffe zu verzichten und hegte eine regelrechte Abneigung gegen die Matrizenmechanik; folglich ging er einen ganz anderen Weg auf der Suche nach einer neuen Beschreibung mikrophysikalischer Prozesse. Dieser Weg führte ihn zu einer Theorie, die als *Wellenmechanik* bekannt geworden ist [785] – [789]³⁸. Der Name ist Programm, da hierbei das Modell stehender und später auch sich ausbreitender Wellen im Vordergrund stand und sehr realistisch interpretiert wurde. Entsprechend war von vorneherein klar, daß dazu partielle Differentialgleichungen zum Einsatz kommen mußten, und folglich ist die Wellenmechanik im Gegensatz zur algebraischen Matrizenmechanik eine analytische Theorie.

3.4.1 Ein vorweggenommener Alternativvorschlag

Es sollte an dieser Stelle erwähnt werden, daß Cornelius Lanczos einen Monat vor Schrödingers erster Veröffentlichung zu seiner Wellengleichung ebenfalls eine zur Matrizenmechanik alternative Theorie vorstellte [527], im Rahmen derer er eine Integralgleichung herleitete, die eine gewisse Verwandtschaft zur stationären Schrödingergleichung aufweist³⁹. Insbesondere

³⁸Ausführlichere Beschreibungen der Entstehung der Wellenmechanik findet man beispielsweise in [518] und in [839].

³⁹Dieses Theoriefragment wurde zwar nach seiner Veröffentlichung von Schrödinger [787] sowie von Dirac [199] beiläufig erwähnt, anschließend jedoch komplett vergessen und bis heute kaum wiederentdeckt. Die einzige Publikation, in der es etwas ausführlicher diskutiert wird, ist [691].

wird dabei die Idee der Zustandsfunktionen vorweggenommen, um dann allerdings anders als bei Schrödinger und nur ansatzweise umgesetzt zu werden. Lanczos möchte unendliche Matrizen auf Funktionen übertragen und schreibt hierfür die Komponenten A_{ij} der Matrix \mathbf{A} unter Verwendung eines orthonormierten vollständigen Funktionensystems $\{u_n \mid n \in \mathbb{N}\}$ in der Form

$$A_{ij} = \iint A(s, \sigma) u_i(s) u_j(\sigma) ds d\sigma$$

mit einem Integralkern, für den man aufgrund der Orthogonalität der Funktionen $\{u_i\}$ unmittelbar

$$A(s, \sigma) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} A_{ij} u_i(s) u_j(\sigma)$$

findet. Für die Einheitsmatrix $\mathbf{1}$ liefert das speziell

$$(\mathbf{1})_{ij} = \delta_{ij} = \iint E(s, \sigma) u_i(s) u_j(\sigma) ds d\sigma$$

mit dem Kern

$$E(s, \sigma) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \delta_{ij} u_i(s) u_j(\sigma) = \sum_{i=0}^{\infty} u_i(s) u_i(\sigma);$$

für diesen gilt

$$E(s, \sigma) = \begin{cases} \infty & \text{für } s = \sigma \\ 0 & \text{für } s \neq \sigma \end{cases}$$

und außerdem

$$\int E(0, \sigma) d\sigma = 1,$$

womit Lanczos die Diracsche Delta-Funktion vorweggenommen hat⁴⁰. Den Bezug zur Quantenmechanik stellt er nun her, indem er die Funktionen u_i zur Beschreibung physikalischer Systeme heranzieht. Dazu postuliert er, daß jede dieser Funktionen jeweils einem Quantenzustand des betrachteten Systems entspricht. Dabei sollen erstere Eigenfunktionen der Integralgleichung

$$\psi(s) = \lambda \int K(s, \sigma) \psi(\sigma) dq\sigma \quad (3.26)$$

⁴⁰Die Delta-Funktion wurde von Dirac 1926 und 1927 schrittweise eingeführt. Erste vage Erwähnungen finden sich in [196] und [198]; offiziell und zusammen mit der Beschreibung elementarer Eigenschaften taucht sie erstmals in [199] auf. Dirac war jedoch nicht der erste, denn die Delta-Funktion wurde unter anderen Bezeichnungen bereits zuvor in unterschiedlichen Zusammenhängen verwendet. Zu nennen sind hier Kirchhoff [496], [497], Heaviside [392], [393], Sommerfeld [821] (Vergleiche auch [831]), Courant [168] und wie gesagt Lanczos [527]. Näheres hierzu findet man in [691]. Aus mathematischer Sicht handelt es sich bei Delta-Funktionen nicht um Funktionen, sondern um Distributionen. Die Delta-Funktion wird noch an einigen weiteren Stellen in diesem Buch auftauchen.

sein, mit $\lambda \in \mathbb{R}$ und einem vom Funktionensystem $\{u_i\}$ abhängigen, symmetrischen Integralkern

$$K(s, \sigma) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{u_i(s) u_i(\sigma)}{\lambda_i}. \quad (3.27)$$

Lanczos konnte zeigen, daß aus seiner Integralgleichung die Heisenbergsche Matrixdarstellung des betrachteten Problems abgeleitet werden kann⁴¹. Es handelt sich hierbei um die erste Formulierung der neueren Quantenmechanik in einer kontinuierlichen Nicht-Matrixform. Die Ähnlichkeit zur Wellenmechanik ist allerdings nur formal, was man sofort erkennt, wenn man die Hamiltonmatrix \mathbf{H} nach dem Funktionensystem $\{u_i\}$ entwickelt; da sie diagonalisierbar ist und dann die Energieeigenwerte $\{E_i \mid n \in \mathbb{N}\}$ als Diagonalelemente hat, findet man

$$H(s, \sigma) = \sum_{i=0}^{\infty} E_i u_i(s) u_i(\sigma). \quad (3.28)$$

Ein Vergleich von (3.27) und (3.28) zeigt, daß eine Interpretation der Funktionen u_i als Zustandsfunktionen des betrachteten Systems auf

$$E_i = \frac{1}{\lambda_i}, \quad i \in \mathbb{N}$$

führt, das heißt, die Eigenwerte λ_i der Integralgleichung (3.26) sind genau die Kehrwerte der Energieeigenwerte E_i . Damit ist (3.26) insbesondere *nicht äquivalent* zur kurz darauf entdeckten stationären Schrödingergleichung; überführt man diese in eine äquivalente Integralgleichung

$$\psi(s) = \int G(s, \sigma) \psi(\sigma) d\sigma,$$

so ist der hier auftauchende Integralkern $G(s, \sigma)$ nicht identisch mit $K(s, \sigma)$. Oder anders formuliert: Wenn man die beiden Integralgleichungen in partielle Differentialgleichungen der Form

$$\mathcal{D}_L \varphi = \frac{1}{\lambda} \varphi$$

beziehungsweise

$$\mathcal{D}_S \psi = E \psi$$

⁴¹Beispielsweise schreibt sich die kanonische Vertauschungsrelation für die Matrizen \mathbf{p} und \mathbf{q} mit Hilfe geeigneter Integralkerne $p(s, \sigma)$ und $q(s, \sigma)$ zunächst

$$p(s, \sigma) q(s, \sigma) - q(s, \sigma) p(s, \sigma) = \frac{h}{2\pi i} E(s, \sigma)$$

Da diese Gleichung für $s = \sigma$ singulär wird, multipliziert Lanczos sie mit $K(s, \sigma)$ und erhält so die Quantisierungsbedingung

$$K(s, \sigma) p(s, \sigma) q(s, \sigma) - K(s, \sigma) q(s, \sigma) p(s, \sigma) = \frac{h}{2\pi i} K(s, \sigma),$$

die auch für $s = \sigma$ gültig ist.

umwandelt, sind die dabei auf der linken Seite auftretenden Differentialoperatoren \mathcal{D}_L und \mathcal{D}_S nicht miteinander identisch, und folglich sind die Eigenfunktionen von (3.26) nicht die Schrödingerschen Wellenfunktionen. Das Konzept wurde an dieser Stelle nicht weiter verfolgt. Dennoch bleibt die Lanczossche Theorie nicht nur aus historischer Sicht bedeutsam, da sie als erste die Möglichkeit andeutete, in der neueren Quantenmechanik parallel zu rein algebraischen Wegen auch solche analytischer Natur zu beschreiten.

3.4.2 Der Weg zur Wellenmechanik

Die Matrizenmechanik lehnt sich zumindest formal sehr eng an die Hamiltonsche Mechanik, von der Wahl der kanonischen Variablen bis zu den zugehörigen Bewegungsgleichungen. Auch in der Wellenmechanik findet man trotz völlig anderer dynamischer Größen Strukturen aus der klassischen Mechanik wieder, da man sie in gewisser Hinsicht als Verallgemeinerung der klassischen Hamilton-Jacobi-Gleichung ansehen kann⁴². Das sieht man besonders deutlich, wenn man den Weg nachvollzieht, auf dem Schrödinger seine Wellengleichung fand [786]⁴³. Auslöser der Idee einer wellenmechanischen Beschreibung atomarer Vorgänge waren dabei einerseits die De Broglieschen Materiewellen⁴⁴, was niemanden überraschen wird, und andererseits Einsteins Theorie der idealen Gase⁴⁵, was weitaus weniger bekannt sein dürfte. In einer am 15. Dezember 1925 eingereichten und am 1. März 1926 veröffentlichten Arbeit beschäftigt sich Schrödinger ausführlich mit letzterer [784], indem er die Analogie der idealen Gase als Systeme linearer Eigenschwingungen zum Strahlungsfeld von schwarzen Körpern und zu den Gitterschwingungen von Festkörpern hervorhebt⁴⁶ und insbesondere, gewissermaßen zur Motivation des Aufsatzes, feststellt, daß die Einsteinsche Theorie nahelegt, die Vorstellung der Materiewellen ernstzunehmen. Das wird ganz anschaulich durch die Vorstellung illustriert, man solle bewegte Teilchen als *Schaumkamm* auf einem eigentlich die physikalische Welt konstituierenden Wellenfeld betrachten.

Mit letzter Konsequenz verfolgt er dieses Konzept in der soeben zitierten Arbeit zwar noch nicht, dafür umso nachdrücklicher in den oben erwähnten weiteren Arbeiten des Jahres

⁴²Zur Hamilton-Jacobi-Theorie siehe Abschnitt 1.1.2.5.

⁴³Genaugenommen handelt es sich dabei um die zweite von ihm vorgeschlagene Variante; eine erste steht in [785], diese ist jedoch, wie er später selbst einräumt, schwer nachvollziehbar. Weniger bekannt ist übrigens, daß Schrödinger zunächst in einer unveröffentlichten Arbeit eine relativistische Wellengleichung der Form

$$[\hbar^2 c^2 \nabla^2 + (E - V)^2 - m^2 c^4] \psi = 0$$

aufstellte, bei der es sich um nichts anderes als die Klein-Gordon-Gleichung handelt. Er löste diese Gleichung anschließend gleich für das Wasserstoff-Atom, verwarf sie aber wieder zu gunsten der nichtrelativistischen Gleichung. Die Klein-Gordon-Gleichung wird lediglich am Ende von [785] beiläufig erwähnt. Details hierzu findet man in [621].

⁴⁴Siehe Abschnitt 3.1.

⁴⁵Siehe Abschnitt 2.5.2.

⁴⁶Dabei charakterisiert er die drei Systemklassen wie folgt: Thermische Strahlungsfelder weisen unendlich viele Eigenschwingungen ohne Beschränkung der Quantenzahlen auf, Festkörper nur endlich viele ohne Beschränkung der Quantenzahlen, ideale Gase jedoch besitzen unendlich viele Eigenschwingungen, wobei die Summe der Quantenzahlen konstant ist, da sie der Anzahl der Moleküle des Gases entspricht.

1926. Entscheidend ist dabei die Verwendung des Formalismus der Hamilton-Jacobi-Theorie, und entsprechend ist die klassische Relation

$$S(q_i, P_i, t) = W(q_i, P_i) - Et$$

zwischen der Hamiltonschen Wirkungsfunktion S und der Hamiltonschen charakteristischen Funktion W , die für konservative Systeme mit $H = E$ stets gilt, der Startpunkt des Unterfangens. In diesem Fall lautet die Hamilton-Jacobi-Gleichung für W

$$H\left(q_i, \frac{\partial W}{\partial q_i}\right) = E.$$

Schrödinger beschränkt sich nun auf Systeme mit $H = T + V$. Dabei soll die kinetische Energie T eine quadratische Form der kanonischen Impulse sein, es soll also

$$T(q_i, \dot{q}_i) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N g_{ij}(q) \dot{q}_i \dot{q}_j$$

beziehungsweise

$$T(p_i, q_i) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N g^{ij}(q) p_i p_j$$

gelten⁴⁷. Die Hamilton-Jacobi-Gleichung für W nimmt damit die Gestalt

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N g^{ij} \frac{\partial W}{\partial q_i} \frac{\partial W}{\partial q_j} = 2(E - V) \quad (3.29)$$

an. Dabei werden zunächst Flächen mit konstantem S im Konfigurationsraum betrachtet. Während Flächen mit konstantem W ortsfest sind, bewegen sich Flächen mit konstantem S ; man kann sie als im Konfigurationsraum fortschreitende Wellenfronten ansehen. Wellen sind üblicherweise charakterisiert durch ihre *Ausbreitungsrichtung*, ihre *Ausbreitungsgeschwindigkeit* und ihre *Wellenlänge*. Soll die angegebene Analogie der S -Flächen mit Wellenfronten physikalisch präzisiert werden, muß man eingehendere Angaben zu diesen drei Größen liefern. Die Ausbreitungsrichtung ist dabei unmittelbar evident; sie erfolgt an jeder Stelle orthogonal zur dortigen Fläche mit konstantem W .

⁴⁷Interessanterweise interpretiert Schrödinger die Größen $g_{ij}(q)$ und $g^{ij}(q)$ ausdrücklich als ko- und kontravariante Komponenten des metrischen Tensors des Konfigurationsraums, der in letzterem eine Riemannsche Metrik

$$ds^2 = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N g_{ij}(q) dq^i dq^j$$

definiert. Der Konfigurationsraum hat damit eine im allgemeinen nichteuklidische Geometrie, womit Schrödinger die moderne, differentialgeometrische Formulierung der Mechanik ein wenig vorweggenommen hat.

Um die Ausbreitungsgeschwindigkeit u der S -Wellen zu berechnen, betrachten wir eine Fläche mit $S = \text{const}$, die in der Zeit dt von einer ortsfesten Fläche mit $W_1 = W = \text{const}$ zu einer solchen mit $W_2 = W + dW = W + E dt$ wandert. Ist ds der an einem bestimmten Punkt senkrecht zu den Flächen gemessene Abstand derselben, so gilt

$$u = \frac{ds}{dt},$$

woraus mit

$$dW = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N g^{ij} \frac{\partial W}{\partial q_i} \frac{\partial W}{\partial q_j} ds$$

und der Hamilton-Jacobi-Gleichung (3.29) für die Ausbreitungsgeschwindigkeit der S -Wellen die Relation

$$u = \frac{E}{\sqrt{2(E-V)}}$$

folgt⁴⁸.

Damit fehlt noch die Wellenlänge der S -Wellen. Hier hilft ein Vergleich dieser optischen Analogie mit der wirklichen Optik. Letztere beschreibt das Verhalten von Lichtwellen mit skalarem elektromagnetischem Potential Φ und der Geschwindigkeit c in einem Medium mit Brechungsindex n mit der *skalaren Wellengleichung*

$$\nabla^2 \Phi - \frac{n^2}{c^2} \frac{d^2 \Phi}{dt^2} = 0. \quad (3.30)$$

Für räumlich konstantes n und damit optisch homogene Medien sind Lösungen der Wellengleichung bekanntlich beispielsweise durch ebene Wellen der Form

$$\Phi(\vec{r}, t) = \Phi_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

⁴⁸Ein interessantes anschauliches Detail ergibt sich aus der Relation

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j},$$

denn hieraus folgt im vorliegenden Fall konservativer Potentiale für die Geschwindigkeit v der mechanischen Bewegung des betrachteten Systems

$$v = \|\vec{\nabla} S\| = \sqrt{2(E-V)}$$

und damit auch

$$v = \frac{E}{u},$$

so daß die Geschwindigkeit der S -Wellen und die Teilchengeschwindigkeit zueinander umgekehrt proportional sind. Die Richtung der mechanischen Bewegung ist wegen $\vec{p} = \vec{\nabla} W$ dieselbe wie diejenige der Ausbreitung der S -Wellen. Somit wandern die Flächen konstanter Wirkung mit der Bewegung des Systems, aber nicht synchron mit derselben; die Flächen bewegen sich umso schneller, je langsamer sich das System bewegt und umgekehrt.

gegeben, wobei für die Wellenzahl $k = \|\vec{k}\|$, die Wellenlänge λ und die Frequenz ω die Relation

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n\omega}{c}$$

gilt. Für den praktisch bedeutsameren Fall eines räumlich veränderlichen Brechungsindex, also optisch inhomogene Medien, kann die Lösung der Wellengleichung natürlich nahezu beliebig kompliziert werden; insbesondere sind dann ebene Wellen keine Lösungen mehr. An dieser Stelle genügt jedoch die Beschränkung auf den Fall eines räumlich nur geringfügig variablen n , was den Versuch rechtfertigt, Lösungen zu finden, die den ebenen Wellen in gewissem Sinne nachempfunden sind. Man macht daher den Ansatz

$$\Phi(\vec{r}, t) = e^{A(\vec{r}) + i[kL(\vec{r}) - \omega t]}$$

mit reellen, ortsabhängigen Größen A und L , die ein Maß für die Amplitude beziehungsweise für die räumliche Phasenlage sind. L heißt *optische Weglänge* oder *Eikonal*. Einsetzen dieses Ansatzes in die Wellengleichung liefert

$$ik [2 \vec{\nabla} A \cdot \vec{\nabla} L + \nabla^2 L] \Phi + [\nabla^2 A + (\vec{\nabla} A)^2 - k^2 (\vec{\nabla} L)^2 + n^2 k^2] \Phi = 0.$$

Diese Gleichung kann nur gelten, wenn Real- und Imaginärteil einzeln verschwinden, sie ist folglich äquivalent zu den Gleichungen

$$\nabla^2 A + (\vec{\nabla} A)^2 + k^2 [n^2 - (\vec{\nabla} L)^2] = 0,$$

$$\nabla^2 L + 2 \vec{\nabla} A \cdot \vec{\nabla} L = 0.$$

Das ist immer noch recht kompliziert, und als weitere Vereinfachung kann man zum Grenzfall der *geometrischen Optik* übergehen, das heißt, man nimmt an, daß die Wellenlänge λ viel kleiner als die räumlichen Ausmaße charakteristischer Änderungen des Brechungsindex ist. Damit wird k sehr groß und der zugehörige Term in der ersten der beiden obigen Gleichungen dominierend, so daß man die Gleichung

$$(\vec{\nabla} L)^2 = n^2$$

erhält. Das ist die *Eikonalgleichung der geometrischen Optik*.

Entscheidend für Schrödingers weitere Überlegungen ist nun die Beobachtung, daß die Eikonalgleichung formal identisch mit der Hamilton-Jacobi-Gleichung für W ist, wenn man W als Eikonal und den Ausdruck $\sqrt{2(E - V)}$ als Brechungsindex betrachtet. Man landet so bei der sehr bedeutsamen Aussage, daß die optische Analogie der klassischen Mechanik *auf die geometrische Optik, also auf den Grenzfall verschwindender Wellenlängen in der Wellenoptik führt*⁴⁹. Damit stellt sich natürlich automatisch die Frage, wie in der Mechanik der Fall nicht vernachlässigbarer Wellenlängen aussieht, also die Frage nach dem *mechanischen Analogon zur Wellenoptik*.

⁴⁹Man kann die Analogie noch weiter ausbauen. Die optische Weglänge ist nach dem *Fermatschen Prinzip*

Dazu stellt man zunächst fest, daß die Analogie von L und W eine ebensolche der Phase

$$\Theta = kL - \omega t = 2\pi \left(\frac{L}{\lambda} - \nu t \right)$$

und der Wirkung

$$S = W - Et$$

nahelegt. Aus der ersten dieser beiden Analogien folgt $L \propto W$, die zweite zieht somit unter anderem $E \propto \nu$ nach sich, was nichts anderes als die Plancksche Beziehung

$$E = h\nu$$

ist. Für Wellenlänge und Frequenz drängt sich die Beziehung

$$\lambda \nu = u$$

auf, woraus

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2(E-V)}} \quad (3.31)$$

und damit

$$k = \frac{\sqrt{8\pi(E-V)}}{h}$$

oder

$$\omega = \frac{2\pi}{h} \left(\frac{h^2 k^2}{8\pi^2} + V \right)$$

folgt; das ist die Verallgemeinerung der Dispersionsrelation. Aus dieser ergibt sich

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{hk}{2\pi} = \sqrt{2(E-V)} = v,$$

das heißt, die Gruppengeschwindigkeit der Wellenausbreitung stimmt mit der mechanischen Geschwindigkeit überein. Noch viel aufschlußreicher ist jedoch das, was als Analogon zur Wellengleichung (3.30) herauskommt. Diese lautet in verallgemeinerten Koordinaten

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N g^{ij} \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial q_j} \Phi - \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0. \quad (3.32)$$

stets extremal, es gilt also

$$\delta \int n ds = 0.$$

Das ist im Rahmen der Analogie zur Mechanik aufgrund der Zuordnung $n \rightarrow \sqrt{2T} = p$ formal identisch mit dem Prinzip der kleinsten Wirkung nach Maupertuis,

$$\delta \int p dq = 0;$$

vergleiche Anmerkung 11 in Abschnitt 1.1.2.3. Man hat folglich eine völlige Analogie des Prinzips von Maupertuis in der Mechanik und des Fermatschen Prinzips in der Optik.

Spaltet man bei deren Lösungsansatz zunächst den zeitabhängigen Teil ab gemäß

$$\Phi = \phi e^{-i\omega t}$$

und setzt das in (3.32) ein, findet man

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N g^{ij} \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial q_j} \phi + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \phi = 0, \quad (3.33)$$

also so etwas wie eine zeitunabhängige Wellengleichung. Im Sinne der Analogie zur Optik muß es daher in der Mechanik eine das betrachtete System beschreibende Größe ψ geben, welcher der optischen Größe ϕ entspricht und folglich einer (3.33) entsprechenden Gleichung genügt, in der die Wellenlänge durch (3.31) gegeben ist. Das führt auf

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N g^{ij} \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial q_j} \psi + \frac{8\pi^2}{h^2} (E - V) \psi = 0, \quad (3.34)$$

eine Gleichung, die Schrödinger *Wellengleichung im q -Raum* nennt und die natürlich nichts anderes als die Schrödingergleichung in verallgemeinerten Koordinaten ist. Man sieht das noch deutlicher, wenn man zum Spezialfall kartesischer Koordinaten im \mathbb{R}^3 übergeht; dort lautet die zeitunabhängige Wellengleichung⁵⁰

$$\nabla^2 \phi + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \phi = 0,$$

und vermöge dem Ausdruck von (3.31) für ein einzelnes Teilchen mit Masse m ,

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m(E - V)}}$$

ergibt sich als mechanisches Analogon

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0, \quad (3.35)$$

oder, nach etwas Umsortieren und Einführen von $\hbar = h/2\pi$,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi = E \psi,$$

und damit das, was als *Schrödingergleichung* Eingang in die Geschichte der Physik gefunden hat. Genaugenommen spricht man dabei von der *stationären Schrödingergleichung*, worauf noch zurückzukommen sein wird.

⁵⁰Diese Gleichung heißt auch *Helmholtz-Gleichung*.

Schrödinger folgert daraus, daß die richtige mechanische Beschreibung des mikrophysischen Geschehens *Wellenvorgänge* im Konfigurationsraum berücksichtigen muß, welche durch die Wellengleichung (3.34) beziehungsweise (3.35) bestimmt werden. Die klassische Mechanik ist lediglich ein Grenzfall dieser Wellenmechanik, und zwar ganz genau so, wie die geometrische Optik der Grenzfall der Wellenoptik für verschwindende Wellenlängen ist. Die Relation (3.31) zeigt dabei, daß die klassische Mechanik als geometrisch-optische Version der Quantenmechanik formal durch den Grenzübergang $\hbar \rightarrow 0$ realisiert wird.

Eine Verallgemeinerung auf konservative Systeme mit beliebigen zeitunabhängigen Hamiltonfunktionen ist leicht möglich. Ist

$$H = H(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$$

die klassische Hamiltonfunktion des Systems, so gelangt man über die Ersetzung

$$p_i \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

zur Quantenmechanik, und die Schrödingergleichung lautet

$$H \left(q_1, \dots, q_N, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_N} \right) \psi(q_1, \dots, q_N) = \lambda \psi(q_1, \dots, q_N). \quad (3.36)$$

(3.35) ist ersichtlicherweise ein Spezialfall von (3.36).

Betrachtet man Gleichung (3.36) und ihre Spezialfälle aus mathematischer Sicht, so sieht man, daß es sich dabei um *Eigenwertprobleme* handelt, denn ψ kann als Eigenfunktion des Differentialoperators H zum Eigenwert E aufgefaßt werden. Fordert man für ψ ein mathematisch mehr oder weniger anständiges Verhalten (Verschwinden im Unendlichen, Eindeutigkeit und Regularität), so läßt sich (3.36) im Sinne einer Rand- und Eigenwertaufgabe lösen. Die Eigenwerte sind dann gerade die möglichen Energieniveaus des betrachteten Systems. Schrödinger demonstrierte diese wichtigste Anwendung seiner Wellenmechanik auch sogleich, indem er sie auf einige prominente Probleme anwendete. Dabei berechnete er die stationären Zustände des harmonischen Oszillators, des Rotators [786] sowie des Wasserstoffatoms, wobei er zeigte, daß dabei für die Energieniveaus dieselben Ergebnisse wie bei der Bohrschen Theorie herauskommen⁵¹, außerdem den kontinuierlichen Teil des Wasserstoffspektrums [785]; darüberhinaus entwickelte er die stationäre Störungstheorie und demonstriert deren Anwendung auf den Stark-Effekt [788]⁵². Es rief zunächst höchste Verwunderung hervor, daß die Matrizenmechanik und die Wellenmechanik trotz ihrer Verschiedenartigkeit die selben Resultate liefern. Das gilt insbesondere für sämtliche Details, in denen beide Theorien von den Voraussagen der älteren Fassungen der Quantentheorie abweichen. Die Matrizenmechanik und die Wellenmechanik erwiesen sich im Gegensatz zur Bohr-Sommerfeldschen Theorie (zumindest im

⁵¹Die sehr häufig zu hörende Aussage, das quantenmechanische Modell des Wasserstoffatoms löse dessen Stabilitätsproblem, wie es in Abschnitt 1.2.3.3 beschrieben wurde, trifft nicht zu. Das gelingt erst im Rahmen der Quantenelektrodynamik. Siehe hierzu beispielsweise [24].

⁵²Da diese Anwendungen zu den Paradestücken jeder Einführung in die Quantenmechanik zählen, wiederholen wir sie hier nicht ein weiteres Mal; man findet sie in allen Standard-Lehrbüchern des Gegenstands.

nichtrelativistischen Bereich) als flächendeckend auf mikrophysikalische Phänomene anwendbar. Sie stellten die Grundlage dar für die universelle Bedeutung, die der Quantenmechanik seit dieser Zeit zukommt. Die Tatsache, daß die Wellenmechanik im wesentlichen das Lösen partieller Differentialgleichungen und damit weithin etablierte Hilfsmittel der theoretischen Physik verlangte⁵³ – und nicht, wie man annehmen könnte, deren vermeintliche Anschaulichkeit – war der Grund dafür, daß sie von Anfang an die beliebtere war und sich, wenn auch in veränderter Form, praktisch ausschließlich gegen die Matrizenmechanik durchsetzte, die mit der Diagonalisierung unendlicher Matrizen sehr viel ungewohntere Anforderungen stellte.

Wie sich leicht nachrechnen läßt, erfüllen die im Differentialoperator der linken Seite der Wellengleichung auftretenden Einträge q_1, \dots, q_N und $-i\hbar \partial/\partial q_1, \dots, -i\hbar \partial/\partial q_N$ dieselben Vertauschungsrelationen wie die Matrizen $\mathbf{Q}_1, \dots, \mathbf{Q}_N$ und $\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_N$ der Matrizenmechanik; es gilt nämlich

$$\begin{aligned}
 q_i q_j \psi - q_j q_i \psi &= 0, \\
 \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}\right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_j}\right) \psi - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_j}\right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}\right) \psi &= 0, \\
 \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}\right) (q_j \psi) - q_i \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_j}\right) \psi &= -i\hbar \delta_{ij} \psi.
 \end{aligned}$$

Hier deutet sich bereits ein Zusammenhang der beiden Theorien an. Entsprechend kann man klassische Funktionen $F = F(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$ der kanonischen Variablen in die Wellenmechanik übertragen, indem man die Impulsvariablen durch mit $i\hbar$ multiplizierte partielle Ableitungen nach den jeweils konjugierten Variablen ersetzt. Die so entstehenden formalen Ausdrücke

$$\hat{F} = \hat{F} \left(q_1, \dots, q_N, \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial q_N} \right)$$

sind auf Wellenfunktionen anzuwenden und heißen *Feldoperatoren*. Die linke Seite der Wellengleichungen (3.36) und (3.37) stellt ein konkretes und gleichzeitig das wichtigste Beispiel dafür dar und wird wie oben erwähnt *Hamiltonoperator* genannt. In der ursprünglichen Fassung der Wellenmechanik werden Ausdrücke der Form q_j und $-i\hbar \partial/\partial q_j$ und deren Funktionen allerdings nirgends explizit als Wellenoperatoren aufgefaßt; ihre fundamentale Bedeutung wurde erst etwas später klar. Das sind im übrigen nicht die einzigen später etablierten Grundbegriffe, die anfangs noch fehlen; auch die Deutung der Wellenfunktionen als *Zustandsfunktionen* der zu beschreibenden Systeme taucht genau wie der Zustandsbegriff selbst erst in der Folgezeit auf.

⁵³Dieses Hilfsmittel war damals bereits hochentwickelt. Einen Eindruck vom „State of the Art“ vermittelt das zweibändige Lehrbuch der Methoden der mathematischen Physik von Courant und Hilbert [168], [169].

3.4.3 Die zeitabhängige Version der Wellenmechanik

In ihrer ursprünglichen Fassung ist die Wellenmechanik nur für stationäre und damit zeitlich nicht veränderliche Zustände formuliert und damit auf keinerlei dynamische Prozesse anwendbar, genau genommen nicht einmal auf Übergänge zwischen den einzelnen Energieniveaus. Eine entsprechende Erweiterung war jedoch nach einiger Mühe ebenfalls gefunden [789]. Dabei stand Schrödinger zunächst die Überzeugung im Weg, sich auf reelle Wellenfunktionen beschränken zu müssen, zu der er aufgrund seiner Zielsetzung, mit der Wellenmechanik reale Wellenphänomene zu beschreiben, gelangt war. Hatte er komplexe Wellenfunktionen wenn auch zunächst nur als rechentechnisches Hilfsmittel einmal akzeptiert, war der Weg frei. Der einfachste Fall einer harmonischen Zeitabhängigkeit der Form

$$\psi(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z) e^{-iEt/\hbar}$$

liefert

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \psi,$$

wodurch Schrödinger auf die Gleichung

$$\hat{H} \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

geführt wurde. Für nicht stationäre Zustände, also Zustände, die sich mit der Zeit ändern, hält eine entsprechend verallgemeinerte Wellenmechanik damit folgende Verfahrensweise bereit: Die Wellenfunktion wird zeitabhängig,

$$\psi : \mathbb{R}^N \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}, \quad \psi = \psi(q_1, \dots, q_N, t),$$

und sie wird nun durch eine zeitabhängige Wellengleichung bestimmt; diese hat die Form

$$H \left(q_1, \dots, q_N, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_N} \right) \psi(q_1, \dots, q_N, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q_1, \dots, q_N, t) \quad (3.37)$$

und heißt heute *zeitabhängige Schrödingergleichung*. Bei beliebiger Festlegung eines Anfangswertes von ψ für $t = t_0$ ist ψ dann durch (3.37) für alle t eindeutig bestimmt. Im Spezialfall konservativer Potentiale erhält man für die zeitabhängige Gleichung die Gestalt

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

beziehungsweise

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (3.38)$$

Natürlich ließ es Schrödinger mit der Entdeckung der zeitabhängigen Gleichung nicht bewenden, vielmehr wendete er auch diese sofort an, indem er die zeitabhängige Störungstheorie

entwickelte [789]. Als Anwendung derselben berechnete er das induzierte Dipolmoment eines Atoms in einem zeitabhängigen Feld.

Beschränkt man sich auf eine rein instrumentalistische Sicht der Dinge, so darf man feststellen, daß die Wellenmechanik sich in ihrer ursprünglichen Form als grundlegende Werkzeugkiste der Quantenmechanik praktisch unverändert gehalten hat. So sind zwar nicht der Weg zu ihrer Entdeckung, wohl aber ihre wesentlichen Aussagen und elementaren Anwendungen nach wie vor unentbehrliche Bestandteile schon der Kursvorlesungen. Anders sieht es mit der Frage aus, was die neuen Begriffe dieser Theorie tatsächlich bedeuten sollen.

3.4.4 Versuche anschaulicher Deutungen

Nachdem nun schon mehrfach erwähnt wurde, daß sich der Entdecker der Wellenmechanik nicht mit einer völlig unanschaulichen Theorie zufrieden geben wollte, ist es auch von Interesse, welche – wie sich zeigen sollte vergeblichen – Versuche dieser zu einer anschaulichen Deutung unternahm. Diese Frage ist nicht einheitlich zu beantworten, denn Schrödinger lieferte mehrere solche Versuche. Auf alle Fälle stellte er sich sehr wohl reale Wellenphänomene vor, die durch seine Wellenmechanik beschrieben werden sollten. Was das genau heißen soll, bleibt zunächst unklar, denn Schrödinger beschränkt sich im Rahmen seiner ersten konkreten Veröffentlichung zur Wellenmechanik auf vage Andeutungen, wonach die Wellenfunktionen irgendeinen Schwingungsvorgang im Atom beschrieben, der nicht weiter erklärt wird [785]. Wenig später, genauer gesagt in der vierten Veröffentlichung dazu, wird er präziser [789]. Anfangs denkt er bei den stationären Zuständen der Atomhülle an über den ganzen 3-dimensionalen Anschauungsraum „verschmierte“ Elektronen, also an Ladungswolken, was durch die über den ganzen 3-dimensionalen Konfigurationsraum verschmierte, nämlich stetige Verteilungsfunktion $\psi^*\psi$ beschrieben werden sollte. Genauergesagt soll dabei die elektrische Ladungsdichte eines einzelnen, durch die Wellenfunktion ψ beschriebenen Elektrons durch

$$\rho(q_1, q_2, q_3) = e \psi^*(q_1, q_2, q_3) \psi(q_1, q_2, q_3) = e |\psi(q_1, q_2, q_3)|^2$$

gegeben sein. Daraus folgt unmittelbar

$$\iiint_{\mathbb{R}^3} \rho(q_1, q_2, q_3) d^3q = e$$

oder

$$\iiint_{\mathbb{R}^3} |\psi(q_1, q_2, q_3)|^2 d^3q = 1.$$

Man sagt, Wellenfunktionen müssen *normiert* sein. Sie gehören folglich zum Raum $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ der quadratintegriblen Funktionen auf dem \mathbb{R}^3 . Entsprechend gilt für Wellenfunktionen von Systemen mit N Freiheitsgraden

$$\iint \cdots \int_{\mathbb{R}^N} |\psi(q_1, q_2, \dots, q_N)|^2 d^Nq = 1,$$

sie sind Elemente des Raums $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ ⁵⁴. Die Zustände, die durch Wellenfunktionen beschrieben werden, sind dann Eigenschwingungen und damit stehende Wellen der Ladungswolken, wobei unterschiedliche Eigenzustände durch unterschiedliche Moden mit unterschiedlichen Frequenzen dargestellt werden. Diese Eigenschwingungen entsprechen im Fall des Wasserstoffatoms natürlich gerade den stationären Zuständen der Bohr-Sommerfeldschen Theorie. Eine in diesem Sinn anschauliche Vorstellung von verschmierten Elektronen und schwingenden Ladungswolken mit zu den Betragsquadraten der zugehörigen Wellenfunktionen proportionalen Ladungsdichten rief von Anfang an energischen Widerspruch hervor, und es war schnell klar, daß sie nicht funktionierte. Wäre sie richtig, müßten Ladungsmessungen möglich sein, die Bruchteile der Elementarladung liefern, beispielsweise, indem man nur räumliche Teilbereiche der Atomhülle betrachtet. Das ist jedoch für geladene Teilchen noch nie gelungen, sieht man von den viel später entdeckten Quarks einmal ab, und auch dort verschiebt sich dieser Sachverhalt einfach auf drittelzahlige Elementarladungen. Genauso unvereinbar mit allen Beobachtungen sind die elektromagnetischen Wellen, die eine schwingende Ladungsverteilung abgeben müßte, da sie aus beschleunigten Ladungen aufgebaut sein müßte. Außerdem würden Ortsmessungen an Elektronen in den Hüllen solcher Atome, etwa in Form von Streuexperimenten, die stets mehr oder weniger lokalisierte Ergebnisse liefern, Schwierigkeiten machen, denn solche Vorgänge erzwingen die Vorstellung, daß sich die Ladungswolken blitzschnell auf winzige Bereiche zusammenziehen. Abgesehen davon, daß kein Mensch eine Ahnung hat, wie so etwas physikalisch funktionieren soll, müßten auch hier die dabei stark beschleunigten Ladungen elektromagnetische Wellen aussenden, im Widerspruch zu allen Beobachtungen. Das Konzept einer auf die Atomhülle verteilten Substanz erweist sich offensichtlich grundsätzlich als unhaltbar⁵⁵.

Im selben Aufsatz bietet Schrödinger gleich noch eine andere anschauliche Vorstellung der Wellenfunktion eines physikalischen Systems an. Dazu deutet er den Ausdruck $\psi^*\psi$ als, wie er sich ausdrückt, eine Art Gewichtsfunktion im Konfigurationsraum, was er in der bekannten Art und Weise durch Herleitung einer Kontinuitätsgleichung begründet. Um das nachzuvollziehen, betrachten wir die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V \psi \quad (3.39)$$

⁵⁴Im Gegensatz zu dieser modernen Sichtweise dachte Schrödinger ursprünglich bei Atomen mit mehreren Elektronen daran, zur Berechnung der Ladungsdichte jeweils ein Elektron herauszugreifen und über die restlichen zu integrieren.

⁵⁵Vergleiche dazu auch den nächsten Abschnitt. – Umso verblüffender ist es, daß die Vorstellung einer konkreten stofflichen Substanz, aus der Atomhüllen aufgebaut sein sollen, gegenwärtig in der gymnasialen Physikdidaktik wieder auftaucht. Diese merkwürdige Substanz heißt dann beispielsweise „Elektronium“ [419], [420]. Selbst wenn man davon absieht, daß es völlig inakzeptabel ist, mit frei erfundenen Begriffen Physikunterricht zu gestalten, ist man zuerst einmal sprachlos. Sämtliche Veranschaulichungen der Atomhülle als einer kontinuierlichen materiellen Substanz und ganz allgemein von $|\psi|^2$ als Maß für die Dichte einer solchen sind nicht nur physikalisch vollkommen abwegig, sondern natürlich auch didaktisch unhaltbar, da sie bei Schülerinnen und Schülern zu fatalen Fehlvorstellungen führen. Kritisches dazu steht in [897].

und zusätzlich die daraus resultierende konjugiert komplexe Gleichung

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V \psi. \quad (3.40)$$

Multiplizieren wir nun (3.39) mit ψ^* und (3.40) mit ψ und subtrahieren anschließend (3.40) von (3.39), so erhalten wir

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*). \quad (3.41)$$

Mit Hilfe der Produktregel wird aus der rechten Seite

$$\begin{aligned} \psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* &= \psi^* \nabla^2 \psi + \vec{\nabla} \psi \vec{\nabla} \psi^* - \vec{\nabla} \psi \vec{\nabla} \psi^* - \psi \nabla^2 \psi^* \\ &= \vec{\nabla} \cdot (\psi \vec{\nabla} \psi^* - \psi^* \vec{\nabla} \psi) \end{aligned}$$

und damit aus (3.41)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = \frac{i\hbar}{2m} \operatorname{div} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*).$$

Durch Einführung der beiden reellen Größen

$$\rho = \psi^* \psi = |\psi|^2 \quad (3.42)$$

und

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \quad (3.43)$$

erhält man daraus die ebenfalls reelle Gleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0, \quad (3.44)$$

was genau die Form einer Kontinuitätsgleichung hat, wie man sie beispielsweise aus der Hydrodynamik, der Elektrodynamik oder allgemeiner jeder klassischen Feldtheorie kennt. Was das bedeutet, sieht man, wenn man die Gleichung (3.44) räumlich integriert,

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \psi^* \psi dV + \iiint_V (\operatorname{div} \vec{j}) dV = 0,$$

und sodann das zweite Raumintegral auf der linken Seite mit dem Gaußschen Integralsatz in ein Oberflächenintegral über die Oberfläche des Integrationsvolumens verwandelt,

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \psi^* \psi dV + \oint_{\partial V} \vec{j} d\vec{S} = 0.$$

Dies legt es nun nahe, (3.42) als Raumdichte und (3.43) als Stromdichte der selben physikalischen Größe zu interpretieren, und damit besagt die Kontinuitätsgleichung (3.44) in der

üblichen Weise, daß der Fluß dieser Größe durch die Oberfläche ∂V eines Gebietes V gleich der Änderung der Dichte der Größe innerhalb dieses Gebietes ist. Was das nun genau für eine Größe sein soll, bleibt zunächst unklar.

Die Deutung, die Schrödinger für die Größe $\rho = \psi^*\psi$ vorschlägt, ist entgegen seiner Absicht alles andere als anschaulich, wenn man darunter eine Vorstellung in *klassischen Bildern* verstehen will [789]. Gibt man diesen Anspruch auf, so handelt es sich dabei um die Andeutung der auch aus heutiger Sicht am ehesten möglichen anschaulichen Deutung, anschaulich jetzt jedoch im Sinne von realistisch. Da einerseits jeder Punkt im Konfigurationsraum des Systems eine mögliche Anordnung desselben darstellt und ρ andererseits als Gewichtsfunktion im Konfigurationsraum gedeutet wird, befindet sich das System in einem Zustand, in welchem es alle möglichen kinematischen Konfigurationen gleichzeitig einnimmt, oder etwas direkter formuliert: Die Elektronen in der Atomhülle befinden sich an allen Orten gleichzeitig. Damit ist erstmals die Vorstellung eines nichtklassischen quantenmechanischen Zustandes als Superposition von gegebenenfalls unendlich vielen, sich klassisch ausschließenden Zuständen angelegt.

Unabhängig von der konkreten Interpretation der Größen ρ und \vec{j} wird durch die Kontinuitätsgleichung (3.44) deutlich, daß in der hier diskutierten elementaren nichtrelativistischen Quantenmechanik uneingeschränkt Teilchenzahlerhaltung gilt. Sie kann folglich nur auf Systeme mit *konstanter Teilchenzahl* angewendet werden. Systeme mit *variabler Teilchenzahl*, wie sie in der Quantenoptik, der Festkörperphysik und insbesondere der Hochenergiephysik anzutreffen sind, können damit nicht beschrieben werden. Das mußte der erst später entdeckten Quantenfeldtheorie vorbehalten bleiben, in der die Teilchenzahl zu einer nichttrivialen Observablen wird⁵⁶.

Daß Schrödingers zweite Deutung in der erwähnten Weise unanschaulich ist, sollte nicht als Nachteil, sondern als Charakteristikum der Quantenmechanik aufgefaßt werden. Dennoch blieb sie ohne große Resonanz, wahrscheinlich insbesondere, weil sie für quantitative Aussagen ohne Bedeutung ist, was nicht so gut in den positivistischen Zeitgeist der Physik in der Weimarer Republik paßte. Eine allgemein akzeptierte und für konkrete Anwendungen bedeutsame Interpretation der Größe $\psi^*\psi$ wurde erst im Rahmen der Wahrscheinlichkeitsinterpretation gefunden, die wir im übernächsten Abschnitt diskutieren.

3.4.5 Zerfließende Wellenpakete

Der vorige Abschnitt dürfte gezeigt haben, daß bereits in einer relativ frühen Phase der Entwicklung der neueren Quantenmechanik jede Hoffnung auf eine ähnlich unmittelbar anschauliche Naturbeschreibung, wie man sie aus der klassischen Physik gewohnt war, aufgegeben werden mußte. Daran änderte auch Schrödingers uneingeschränkte Treue zu dieser Philosophie nichts. Er hatte sich auch durch die soeben geschilderten Schwierigkeiten nicht von

⁵⁶Die Vorstellung von Teilchen als lokalisierten Materiepaketen, die in der elementaren Quantenmechanik schon problematisch ist, gerät in der Quantenfeldtheorie noch sehr viel stärker in Schwierigkeiten angesichts tiefschürfender Probleme, die ein allzu naiver Teilchenbegriff dort heraufzubeschwören imstande ist.

der Absicht abbringen lassen, zur Anschaulichkeit⁵⁷ bei der Beschreibung mikrophysikalischer Vorgänge zurückzukehren. Der nächste Versuch bestand darin, das teilchenähnliche Verhalten freier Elektronen zu modellieren, indem man sie als Wellenpakete beschreibt, das heißt als Superpositionen von Wellen, die nur in einem kleinen Raumbereich nennenswert von Null abweichen. Bestärkung fand Schrödinger zunächst in einem von ihm gefundenen Resultat, nachdem sich beim harmonischen Oszillator der Mittelwert der Wahrscheinlichkeitsdichte des betrachteten Teilchens für hohe Quantenzahlen dem klassischen Verhalten eines Massenpunktes im Oszillatorpotential annähert [790]⁵⁸. Das bedeutet auch, daß für diesen Fall ein Wellenpaket seine Form im Lauf der Zeit beibehält. Lorentz war der erste, der darauf hinwies, daß ein solches Unterfangen für das Wasserstoffatom nicht möglich ist, und Heisenberg konnte wenig später nachweisen, daß der harmonische Oszillator in der Tat *das einzige* System ist, bei dem es funktioniert [402].

Was dabei für alle anderen Systeme passiert, sieht man besonders deutlich am einfachsten denkbaren Fall, wenn man versucht, ein freies Teilchen der Masse m als sich ausbreitende Welle zu modellieren⁵⁹. Unter einem Teilchen versteht man dabei etwas mehr oder weniger lokalisiertes, das sich durch den Raum bewegt. Es genügt dabei, sich auf den eindimensionalen Fall zu beschränken. Die das Teilchen beschreibende Wellenfunktion muß natürlich Lösung der entsprechenden Schrödingergleichung sein; diese lautet im kräftefreien Fall

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x, t)}{dx^2} = i\hbar \frac{d\psi(x, t)}{dt}. \quad (3.45)$$

Eine Lösung dieser Gleichung läßt sich sofort angeben, etwa

$$\psi(x, t) = e^{i[kx - \omega(k)t]}$$

mit $k^2 = -2mE/\hbar^2$ und $\omega(k) = \hbar k^2/2m$ sowie der Gesamtenergie E , die als Separationskonstante mit in die Rechnung kommt. Solche Lösungen beschreiben sich ausbreitende ebene Wellen mit Wellenzahl k und Frequenz $\omega(k)$. Das ist jedoch ein Phänomen, das sich von einem Teilchen im oben beschriebenen Sinne beliebig stark unterscheidet, denn eine ebene Welle wabert als unendlich ausgedehntes Objekt durch den Raum und hält sich damit sozusagen überall gleichzeitig auf. Wir brauchen stattdessen etwas, das sich hauptsächlich in einem begrenzten Raumgebiet befindet. Hier kommt uns nun die Linearität der Schrödingergleichung zugute, denn dadurch sind beliebige Linearkombinationen von Lösungen wieder Lösungen. Verschiedene Lösungen erhält man durch Wahl von verschiedenen Werten für k , Lösungen der Schrödingergleichung (3.45) sind daher auch Ausdrücke der Form

⁵⁷Gemeint ist hier Anschaulichkeit in einem Sinn, der von V. A. Muller sehr treffend als Mischung aus Vorstellbarkeit, Intuitivität, Bildlichkeit, Begreifbarkeit, Klarheit und Verständlichkeit bezeichnet wurde [633].

⁵⁸Dabei entdeckte er gewissermaßen nebenbei die sogenannten *kohärenten Zustände*, die später im Zusammenhang mit der Quantisierung des elektromagnetischen Feldes von R. J. Glauber wiedergefunden wurden [332], [333], [334]. Einen ausführlichen Überblick bietet [500]. Der Begriff der kohärenten Zustände wurde inzwischen sehr weitgehend verallgemeinert, siehe zum Beispiel [688] und [762]; er ist heute insbesondere in der Quantenoptik von großer Bedeutung.

⁵⁹Dieses traditionelle Lehrbuchbeispiel wurde erstmals von Heisenberg in seiner Arbeit [402] über die Unschärferelation angegeben.

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{i[k_n x - \omega(k)t]}$$

oder auch

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} dk.$$

Die Koeffizienten c_n beziehungsweise Gewichtsfunktionen $C(k)$ sind dabei aus mathematischer Sicht weitgehend beliebig wählbar. Die Idee besteht nun darin, durch geschicktes Wählen der $C(k)$ eine Linearkombination aus ebenen Wellen zu konstruieren, die nur in einem eng begrenzten räumlichen Gebiet, das sich bewegen darf, über merklich von Null verschiedene Amplituden verfügt und außerhalb davon möglichst schnell verschwindet. Man nennt so etwas ein *Wellenpaket*. Die Hoffnung gewisser früher Quantenmechaniker lag natürlich genau darin, Teilchen durch Lösungen der Schrödingergleichung in Form von *sich ausbreitenden Wellenpaketen* vernünftig beschreiben zu können. Dann wäre der Versuch, Wellenfunktionen als Darstellungen von realen Wellenphänomenen (vergleichbar mit der Elektrodynamik) aufzufassen, vielleicht doch ein aussichtsreiches Unterfangen.

Aus der Mathematik weiß man, daß sogenannte *Gaußsche Wellenpakete* genauso aussehen, wie man sich Momentaufnahmen von sich ausbreitenden Wellenpaketen vorstellt. Gaußsche Wellenpakete sind Wellenpakete, deren Einhüllende die Form einer Gaußkurve hat, also beschrieben wird durch eine Funktion der Form

$$f(x) = e^{-x^2/b^2}. \quad (3.46)$$

Wir können solche Gaußkurven auch etwas verallgemeinern, wenn wir als sie darstellende Funktionen solche der Gestalt

$$f(x) = e^{-(x-x_0)^2/b^2}. \quad (3.47)$$

verwenden⁶⁰. Diese Gaußkurven unterscheiden sich von den durch (3.46) repräsentierten durch die Lage des Maximums, das durch x_0 bestimmt wird, wie man durch etwas Kurvendiskussion nachprüfen kann: Das Schaubild von (3.46) ist um den Ursprung herum konzentriert, dasjenige von (3.47) dagegen um x_0 . Gaußsche Wellenpakete können daher geschrieben werden als

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} e^{-(k-k_0)^2/b^2} dk. \quad (3.48)$$

Wir beschreiben unser Teilchen entsprechend zum Zeitpunkt $t = 0$ durch das am Ursprung $x = 0$ lokalisierte normierte Gaußsche Wellenpaket

$$\Psi(x, 0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} e^{-a^2(k-k_0)^2/4} dk \quad (3.49)$$

⁶⁰Für Leser, die sich an die Zeit vor dem Euro erinnern: Auf den Zehnmarkscheinen der neuesten Generation sind solche Gaußkurven samt zugehöriger Funktionsgleichung abgebildet.

und für $t \neq 0$ durch das sich ausbreitende Wellenpaket

$$\Psi(x, t) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2(k-k_0)^2/4} e^{i(kx-\omega(k)t)} dk. \quad (3.50)$$

Die Normierung ist dabei notwendig, weil das Wellenpaket *ein* Teilchen darstellen soll, was die Forderung

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

nach sich zieht, denn die Wahrscheinlichkeit, ein tatsächlich vorhandenes Teilchen überhaupt irgendwo zu finden, muß natürlich 1 sein⁶¹. b beziehungsweise a sind Konstanten, welche die Breite der Einhüllenden und damit des gesamten Wellenpakets bestimmen. Diese Breite ist für eine Gaußkurve der Form (3.47) definiert als

$$\Delta x = \frac{b}{\sqrt{2}},$$

hier gilt folglich

$$\Delta x = \frac{1}{2\sqrt{2}a}.$$

Bei den Ausdrücken (3.48) und (3.49) handelt es sich mathematisch gesehen natürlich gerade um die Darstellung der Gaußkurve (3.47) als Fourierintegral.

Damit hätten wir auf den erste Blick eigentlich genau das Gewünschte. Solche Wellenpakete besitzen jedoch sehr spezielle Eigenschaften, und um dies zu sehen, bleibt uns nichts anderes übrig, als das Integral in (3.50) auszurechnen, was zwar nicht schwierig, dafür aber recht aufwendig ist. Die angemessene Methode hierfür ist es, das Integral mit Hilfe eines geeigneten Tricks auf ein vollständiges Gaußsches Fehlerintegral der Form $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2x^2} dx$ zurückzuführen. Dieses wiederum kann man ebenfalls mit einem Trick, nämlich mit dem in Fußnote 94 von Abschnitt 2.5.2, beschriebenen direkt berechnen; das liefert

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{a}. \quad (3.51)$$

Um nun (3.50) auf diese Gestalt zu bringen, formen wir es zunächst etwas um,

$$\Psi(x, t) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \exp\left(-\frac{a^2k_0^2}{4}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[k^2\left(\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}\right) + k\left(-ix - \frac{a^2k_0}{2}\right)\right] dk \quad (3.52)$$

⁶¹Näheres dazu im nächsten Abschnitt.

um dann den Exponenten mit Hilfe von quadratischer Ergänzung auf eine binomische Form zu bringen,

$$\begin{aligned}
 k^2 \left(\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m} \right) + k \left(-ix - \frac{a^2 k_0}{2} \right) &= \left(\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m} \right) \left(k^2 + k \frac{-ix - \frac{a^2 k_0}{2}}{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}} \right) \\
 &= \left(\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m} \right) \left[k^2 + k \frac{-ix - \frac{a^2 k_0}{2}}{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}} + \left(\frac{-ix - \frac{a^2 k_0}{2}}{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}} \right)^2 - \left(\frac{-ix - \frac{a^2 k_0}{2}}{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}} \right)^2 \right] \\
 &= \left(\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m} \right) \left[\left(k + \frac{-ix - \frac{a^2 k_0}{2}}{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}} \right)^2 - \left(\frac{-ix - \frac{a^2 k_0}{2}}{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}} \right)^2 \right].
 \end{aligned}$$

Setzen wir dies nun in (3.52) ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned}
 \Psi(x, t) &= \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \exp\left(-\frac{a^2 k_0^2}{4}\right) \times \\
 &\times \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ - \left(\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m} \right) \left[\left(k + \frac{-ix - \frac{a^2 k_0}{2}}{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}} \right)^2 - \left(\frac{-ix - \frac{a^2 k_0}{2}}{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}} \right)^2 \right] \right\} dk \\
 &= \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \exp\left(-\frac{a^2 k_0^2}{4}\right) \times \\
 &\times \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[- \left(\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m} \right) \left(k + \frac{-ix - \frac{a^2 k_0}{2}}{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}} \right)^2 + \frac{1}{4} \frac{\left(ix + \frac{a^2 k_0}{2} \right)^2}{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}} \right] dk \\
 &= \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \exp\left(-\frac{a^2 k_0^2}{4}\right) \exp \left[\frac{1}{4} \frac{\left(ix + \frac{a^2 k_0}{2} \right)^2}{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}} \right] \times \\
 &\times \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[- \left(\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m} \right) \left(k - \frac{ix + \frac{a^2 k_0}{2}}{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}} \right)^2 \right] dk, \tag{3.53}
 \end{aligned}$$

und das ist bereits ein vollständiges Fehlerintegral, man sieht es nur noch nicht so gut. Die Substitution

$$z = k - \frac{ix + \frac{a^2 k_0}{2}}{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}}$$

verschafft jedoch sogleich Klarheit, und (3.53) wird zu

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = & \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \exp \left\{ -\frac{1}{4} \left[a^2 k_0^2 - \frac{\left(ix + \frac{a^2 k_0}{2} \right)^2}{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}} \right] \right\} \times \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\left(\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m} \right) z^2 \right] dz. \end{aligned}$$

Jetzt verwenden wir das obige Resultat (3.51) und erhalten so für die Wellenfunktion des sich ausbreitenden Wellenpakets den Ausdruck

$$\Psi(x, t) = \frac{\sqrt{a}}{2^{3/4} \pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}}} \exp \left\{ -\frac{1}{4} \left[a^2 k_0^2 - \frac{\left(ix + \frac{a^2 k_0}{2} \right)^2}{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}} \right] \right\}. \quad (3.54)$$

Das ist eine komplexe Funktion einer reellen Veränderlichen. Um deren Verhalten nun näher zu beschreiben, können wir beispielsweise ihr Betragsquadrat $|\psi(x)|^2$ berechnen, was eine reelle Funktion liefert und damit direkt anschaulich physikalisch interpretierbar ist⁶². Das macht wieder etwas Arbeit; wir erhalten zunächst

$$\begin{aligned} |\Psi(x, t)|^2 &= \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) \\ &= \frac{a}{\sqrt{8\pi}} \frac{1}{\sqrt{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}} \sqrt{\frac{a^2}{4} - \frac{i\hbar t}{2m}}} \times \\ & \times \exp \left\{ -\frac{a^2 k_0^2}{2} - \frac{1}{4} \left[\frac{\left(ix + \frac{a^2 k_0}{2} \right)^2}{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}} + \frac{\left(-ix + \frac{a^2 k_0}{2} \right)^2}{\frac{a^2}{4} - \frac{i\hbar t}{2m}} \right] \right\}, \end{aligned}$$

⁶²Im nächsten Abschnitt wird diese Größe eine weitere, wesentlich bedeutendere anschauliche physikalische Interpretation erhalten.

und sodann durch geduldiges Ausmultiplizieren und Vereinfachen des Exponenten als Ergebnis

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{\sqrt{2}}{a\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{a^2 - \frac{4\hbar^2 t^2}{a^4 m^2}}} \exp \left[\frac{-2 \left(x - \frac{k_0 \hbar t}{m} \right)^2}{a^2 \left(1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{a^4 m^2} \right)} \right]. \quad (3.55)$$

Die Exponentialfunktion stellt dabei nichts anderes dar als eine Gaußkurve, allerdings eine, deren Exponent *zeitabhängig* ist. Um diese Zeitabhängigkeit anschaulich zu deuten, vergleichen wir (3.55) mit (3.47). Das Maximum x_0 der Gaußkurve kann man zur Definition des *Schwerpunktes des Wellenpaketes* verwenden. Im hier betrachteten Fall gilt

$$x_0(t) = \frac{k_0 \hbar t}{m},$$

woran man sofort erkennt, daß sich der Schwerpunkt und damit das gesamte Wellenpaket tatsächlich wie gewünscht *fortbewegt*. Ein Maß für die Lokalisierung des Wellenpaketes $\Psi(x, t)$ erhält man, in dem man die Breite der zu $|\Psi(x, t)|^2$ gehörenden Gaußkurve berechnet. Durch Ablesen findet man

$$\Delta x(t) = \frac{a}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{a^4 m^2}}; \quad (3.56)$$

die Breite der Gaußkurve nimmt also mit der Zeit zu. Anschaulich bedeutet dies, daß das Wellenpaket immer breiter wird: *Das Wellenpaket zerfließt mit der Zeit*. Dabei setzt das Zerfließen allmählich ein, um dann nach und nach in eine Entwicklung überzugehen, die näherungsweise linear mit der Zeit verläuft, wie Gleichung (3.56) zeigt. Ein solcher Prozeß ist in Abbildung 3.1 dargestellt.

Das Zerfließen von Wellenpaketen läßt sich auch über die Geschwindigkeitsverteilung nachweisen. Eine solche kann man in dem hier verwendeten Modell sinnvoll definieren, denn es geht ja um etwas, das sich durch den Raum bewegen soll. Anschaulich bedeutet das folgendes: Die einzelnen Punkte des Wellenpaketes bewegen sich mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten, dabei sind die Werte der Geschwindigkeiten so verteilt, daß das Wellenpaket zwar insgesamt qualitativ seine Form beibehält, sich aber wie beschrieben beständig verbreitert.

Die Auswirkungen des Zerfließens von Wellenpaketen werden besonders deutlich, wenn man diesen Vorgang anhand eines Zahlenbeispiels konkret berechnet. Betrachtet man etwa ein Elektron als sich ausbreitendes Wellenpaket und geht von einer anfänglichen Lokalisierung von optimistischen 10^{-18} m aus (das ist die Obergrenze der räumlichen Ausdehnung, die man in der Hochenergiephysik bei Streuexperimenten für das Elektron findet⁶³), so stellt man fest, daß dieses Wellenpaket bereits nach einer guten Viertelstunde auf eine Breite von etwa $3,6 \cdot 10^{17}$ m auseinandergelaufen ist.

Die Pioniere der Quantenmechanik mußten daraus den Schluß ziehen, daß eine Beschreibung von Teilchen als sich ausbreitende Materiewellenpakete nicht möglich ist, und damit

⁶³Man beachte, daß es sich bei solchen Streuexperimenten um *Ortsmessungen* handelt.

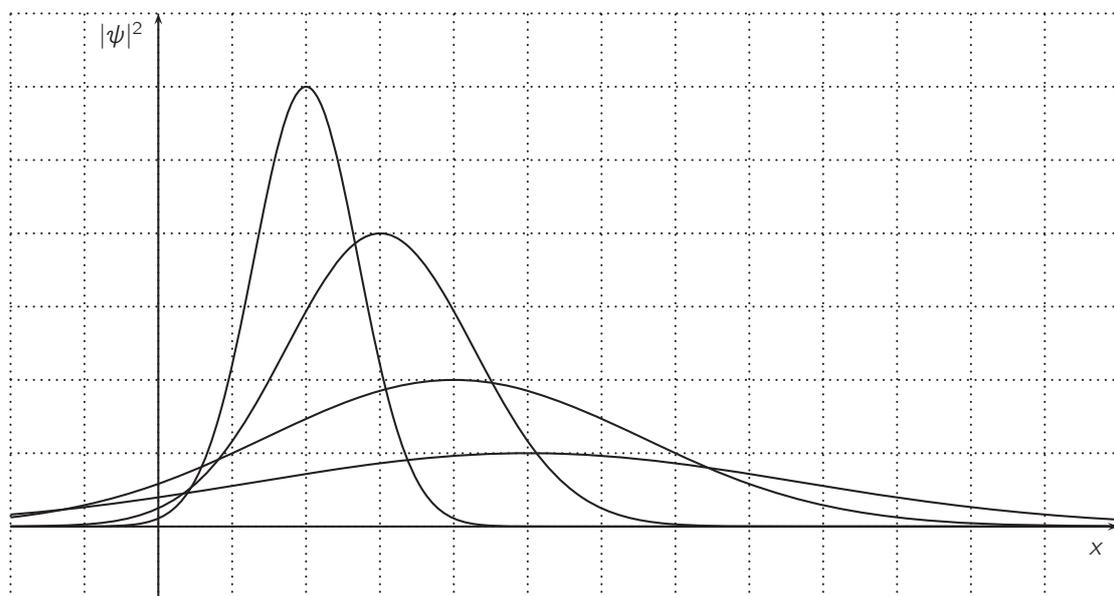


Abbildung 3.1: Betragssquadrate der Wellenfunktion für ein zerfließendes, sich ausbreitendes Wellenpaket

eine direkte physikalische Interpretation der Wellenfunktion als reales Wellenphänomen zumindest in dieser Weise auch nicht. Die Frage nach der tatsächlichen physikalischen Bedeutung quantenmechanischer Wellenfunktionen abgesehen von der Eigenschaft, ein Werkzeug zur Berechnung der Energieniveaus und -übergänge stationärer Zustände zu sein, blieb damit erst einmal weiter offen.

3.5 Sind Matrizenmechanik und Wellenmechanik äquivalent?

Die erste Phase der neueren Quantenmechanik gipfelte in einer völlig umgekrempelten, aber sehr erfolgreichen neuen physikalischen Beschreibung der Mikrowelt, allerdings zunächst mit zwei höchst unterschiedlichen Theorien, der Matrizenmechanik und der Wellenmechanik, die anfangs ganz allgemein als sich widersprechende Versuche zur Formulierung einer angemessenen Theorie mikrophysikalischer Vorgänge angesehen wurden. Um so erstaunlicher war es, daß beide in den wesentlichen Fragen exakt dieselben Resultate lieferten. Das konnte kein Zufall sein. In der Tat konnte nach einigen mehr oder weniger teilweise erfolgreichen Anläufen und insbesondere nach gewissen Ergänzungen beider Theorien schließlich gezeigt werden, daß die

weiterentwickelten Versionen von Matrizenmechanik und Wellenmechanik gleichwertig sind und mit geeigneten Mitteln ineinander übergeführt werden können⁶⁴.

Einer der ersten Anläufe dieser Art stammt von Schrödinger selbst [787], wobei Eckart [226]⁶⁵ und Pauli⁶⁶ wenig später beinahe identische Beweisversuche unternahmen. Auch wenn sie alle – entgegen in der Literatur verbreiteten anderen Behauptungen – nicht zum Ziel führten, wirkten sie dennoch als Katalysatoren für die weitere Entwicklung der Quantenmechanik; schon deshalb ist es die Mühe wert, sich ein wenig damit zu beschäftigen. Wir beschränken uns dabei auf die Version von Schrödinger und betrachten kurz, was dabei bewiesen wird und was nicht.

Die Voraussetzungen für einen Beweis der Äquivalenz von Matrizenmechanik und Wellenmechanik waren 1926 äußerst schwierig; zu unterschiedlich schienen die jeweiligen die Theorien konstituierenden mathematischen Objekte zu sein. Schrödingers Idee war es, einen solchen Beweis durch Konstruktion einer bijektiven Abbildung zwischen den Feldoperatoren der Wellenmechanik und den matrixwertigen Funktionen der Matrizenmechanik zu führen, also einer Abbildung, die jeden Feldoperator in eindeutiger Weise in eine unendliche Matrix überführt und umgekehrt. Die mathematischen Strukturen der beiden Theorien wären dann isomorph und sie selbst gleichwertig. Um Schrödingers Versuch, eine solche Abbildung zu konstruieren, nachzuvollziehen und zu verstehen, wo der Haken an der Sache ist, benötigen wir vorab zwei zusätzliche Begriffe aus der Wellenmechanik.

Die Gesamtheit $\{\varphi_n\}_{n \in \mathbb{N}^*}$ der Eigenfunktionen des Hamiltonoperators bildet stets ein vollständiges Funktionensystem, das heißt, man kann jede Wellenfunktion in Form einer unendlichen Potenzreihe nach ihnen entwickeln. Außerdem sind die Eigenfunktionen paarweise orthogonal und wie bereits erwähnt auf 1 zu normieren. Formal finden diese Eigenschaften in der *Vollständigkeitsrelation*

$$\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n^*(q) \varphi_n(q') = \delta(q - q')$$

und in der *Orthonormalitätsrelation*

$$(\varphi_n, \varphi_m) = \int_{\mathbb{R}^N} \varphi_n^*(q) \varphi_m(q) dq = \delta_{nm}, \quad m, n \in \mathbb{N}^*$$

ihren Ausdruck. Dabei ist $\delta(q - q')$ die Diracsche Delta-Funktion⁶⁷.

⁶⁴Hierzu gibt es nicht nur unterschiedliche, sondern sogar diametral auseinanderlaufende Ansichten. Erstaunlicherweise ist die Behauptung, die Äquivalenz der beiden Theorien sei schon kurz nach ihrer Entstehung bewiesen worden, in der Literatur weitverbreitet. Daß das unrichtig ist, konnte Muller in den späten 90er Jahren in allen Details nachweisen [633] – [636]; vergleiche auch [579]. Ein interessanter, aber problematischer Versuch, die Intentionen Schrödingers umzudeuten, stammt von Perovic [690].

⁶⁵Eckarts Arbeit stellt einen Spezialfall von Schrödingers Ausführungen dar.

⁶⁶Paulis Beweisversuch liegt nur im Rahmen eines Briefs an Jordan vor; dieser ist abgedruckt in [899].

⁶⁷Genaugenommen braucht man hier natürlich die N -dimensionale Variante der Delta-Funktion. Diese ist in kartesischen Koordinaten einfach als Produkt der Form

$$\delta^N(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(x_1 - x'_1) \delta(x_2 - x'_2) \cdots \delta(x_N - x'_N)$$

Als Startpunkt betrachte man nun ein solches auf 1 normiertes vollständiges Orthonormalsystem $\{\varphi_n\}_{n \in \mathbb{N}^*}$ aus Eigenfunktionen des Hamiltonoperators. Nun wird jedem Wellenoperator \hat{F} eine unendliche Matrix \mathbf{F} zugeordnet gemäß

$$\hat{F} \mapsto \mathbf{F} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & \cdots \\ \vdots & \ddots & \ddots \\ \vdots & \vdots & F_{mm} & \ddots \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad F_{mn} = \int_{\mathbb{R}^N} \varphi_m^*(q) \hat{F} \varphi_n(q) dq; \quad (3.57)$$

q steht hier abkürzend für (q_1, \dots, q_N) . Diese Definition leistet auf den ersten Blick genau das geforderte. Beispielsweise erhält man so aus den kanonischen Koordinaten q_1, \dots, q_N und Impulsen $-i\hbar \partial / \partial q_1, \dots, -i\hbar \partial / \partial q_N$ die Matrizen $\mathbf{Q}_1, \dots, \mathbf{Q}_N$ und $\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_N$ mit den Komponenten

$$Q_{j,mn} = \int_{\mathbb{R}^N} \varphi_m^*(q) q_j \varphi_n(q) dq, \quad P_{j,mn} = -i\hbar \int_{\mathbb{R}^N} \varphi_m^*(q) \frac{\partial \varphi_n(q)}{\partial q_j} dq,$$

und man überzeugt sich sofort, daß diese die kanonischen Vertauschungsrelationen erfüllen. Dazu hat man lediglich die Vorschrift (3.57) auf den Wellenoperator

$$\frac{\partial}{\partial q_i} q_j - q_i \frac{\partial}{\partial q_j} = -i\hbar \delta_{ij}$$

anzuwenden. Man erhält wie gewünscht

$$\mathbf{P}_i \mathbf{Q}_j - \mathbf{Q}_j \mathbf{P}_i = -i\hbar \int_{\mathbb{R}^N} \varphi_m^*(q) \delta_{ij} \varphi_n(q) dq = -i\hbar \delta_{ij}.$$

Vor allem aber liefert (3.57) für den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H} \left(q_1, \dots, q_N, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_N} \right)$$

die richtige Hamiltonsche Matrix

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{Q}_1, \dots, \mathbf{Q}_N, \mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_N)$$

definiert. In beliebigen krummlinigen Koordinaten $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N$ gilt

$$\delta^N(\vec{r} - \vec{r}') = \left[\left| \frac{\partial(x_1, x_2, \dots, x_N)}{\partial(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N)} \right|_{\vec{r}} \right]^{-1} \delta(\eta_1 - \eta'_1) \delta(\eta_2 - \eta'_2) \cdots \delta(\eta_N - \eta'_N),$$

wobei $\frac{\partial(x_1, x_2, \dots, x_N)}{\partial(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N)}$ die Funktionaldeterminante der Koordinatentransformation von (x_1, x_2, \dots, x_N) nach $(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N)$ ist.

und damit auch die richtigen Energieniveaus stationärer Zustände.

Das angestrebte Ziel wäre erreicht, wenn die durch die Vorschrift (3.57) definierte Abbildung von der Menge der Wellenoperatoren in die Menge der unendlichen Matrizen bijektiv, also ein Isomorphismus ist. Leider ist das jedoch nicht der Fall. Das sieht man am einfachsten an folgender Eigenschaft der den Wellenoperatoren zugeordneten Matrizen: Aus der – in heutiger Sprache formulierten – Zugehörigkeit der Wellenfunktionen zum Raum $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ der quadratintegriblen Funktionen einerseits und der Wellenoperatoren zur Menge der linearen Operatoren auf $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ andererseits folgt unmittelbar für jede gemäß (3.57) gewonnene Matrix \mathbf{F}

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^{\infty} |F_{mn}|^2 &= \sum_{m=1}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} \varphi_m(q) \varphi_m^*(q') \hat{F}^* \varphi_n^*(q) \hat{F} \varphi_n(q') dq dq' \\ &= \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} \delta(q - q') \hat{F}^* \varphi_n^*(q) \hat{F} \varphi_n(q') dq dq' \\ &= \int_{\mathbb{R}^N} |\hat{F} \varphi_n(q')|^2 dq < \infty \end{aligned}$$

und analog

$$\sum_{n=1}^{\infty} |F_{mn}|^2 = \int_{\mathbb{R}^N} |\hat{F} \varphi_m(q')|^2 dq < \infty,$$

das heißt, alle Zeilen und Spalten liefern jeweils konvergente Reihen, wenn man ihre Einträge quadriert und absummiert. Man sagt auch, die Matrizen \mathbf{F} sind *Wintner-Matrizen* [936]. Die Eigenschaft, Wintner-Matrizen zu sein, gilt jedoch keinesfalls generell für alle unendlichen Matrizen der Matrizenmechanik. Folglich wird durch (3.57) zwar jeder Wellenoperator eindeutig auf eine Matrix abgebildet, aber nicht jede Matrix der Wellenmechanik ist als Bild eines Wellenoperators unter dieser Abbildung darstellbar. Die Abbildung ist somit zwar injektiv, aber nicht surjektiv. Schrödinger hat folglich nicht, wie er selbst annahm, die Äquivalenz der beiden Theorien bewiesen, sondern stattdessen die Aussage, daß die Wellenmechanik in der Matrizenmechanik enthalten ist, ohne auch die umgekehrte Richtung gezeigt zu haben.

Es wäre indes unfair, ihm daraus einen Vorwurf zu machen, denn beim Stand der Quantenmechanik im März 1926 *konnte* er den angestrebten Beweis überhaupt nicht führen. Das hat mehrere Gründe⁶⁸, angefangen damit, daß die völlige empirische Gleichwertigkeit von Matrizenmechanik und Wellenmechanik auf der Grundlage des Zustands der beiden Theorien *zu dieser Zeit* gar nicht wirklich gegeben war. Völlige Übereinstimmung lag bei den Energieniveaus des Wasserstoffs und wasserstoffähnlicher Atome, des harmonischen Oszillators und anderer stationärer Systeme sowie bei Aussagen zum quantenmechanischen Drehimpuls vor. Die Intensitäten von Spektrallinien dagegen konnten anfangs überhaupt nur im Rahmen

⁶⁸Muller war 1997 und 1998 der erste, der das systematisch analysierte und die Gründe unter Verwendung modelltheoretischer Hilfsmittel ausführlich beschrieb [633] – [636].

der Matrizenmechanik berechnet werden. Diese lieferte für die Intensität der emittierten oder absorbierten elektromagnetischen Wellen des Übergangs vom n -ten zum m -ten Niveau oder umgekehrt die Relation

$$I_j(n, m) \propto |Q_{j, nm}|^2,$$

wobei j die Polarisationsrichtung angibt und die $Q_{j, nm}$ natürlich die Komponenten derjenigen Matrizen \mathbf{Q}_j sind, in denen die Hamiltonsche Matrix \mathbf{H} diagonal ist. Das war zwar ein Mangel, den die Wellenmechanik weniger später wettmachen konnte, allerdings unter Zuhilfenahme der Matrizenmechanik in Gestalt der Formel

$$I_j(n, m) \propto \left| \int_{\mathbb{R}^N} \varphi_m^*(q) q_j \varphi_n(q) dq \right|.$$

Unterschiede gab es auch bei Vorhersagen zur Ladungsverteilung, wo die Wellenmechanik aufgrund der fehlerhaften Deutung der Wellenfunktionen als Beschreibung verschmierter Teilchen Unsinn lieferte, denn Messungen der Elektronenladung ergeben immer genau den Wert e und niemals eine räumlich verteilte Elementarladung, sowie bei Streuexperimenten, die zwar durch die Wellenmechanik, nicht aber durch die Matrizenmechanik beschreibbar sind⁶⁹. Noch wichtiger sind die mathematischen Unterschiede. Einerseits gibt es in beiden Theorien grundlegende Elemente, die in der jeweils anderen nicht existieren. Beispielsweise kommen zeitabhängige Systeme in natürlicher Weise in der Matrizenmechanik vor, und ihre zeitliche Entwicklung wird durch die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen exakt beschrieben. In der Wellenmechanik gibt es zunächst nichts Vergleichbares; die zeitabhängige Schrödingergleichung taucht erst im Juni 1926 auf [789]. Umgekehrt enthält die Wellenmechanik neben den Wellenoperatoren mit den Wellenfunktionen und den dadurch beschriebenen Zuständen physikalischer Systeme eine zusätzliche Kategorie, die kein Gegenstück in der Matrizenmechanik hat. Dort gibt es nur die namengebenden Matrizen als einzige die Theorie konstituierende Größen. Mathematisch gesprochen sind es somit der Konfigurationsraum \mathbb{R}^N und der Raum $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ der Wellenfunktionen, die integrale Bestandteile der Wellenmechanik sind, in der Matrizenmechanik jedoch ersatzlos fehlen. Und selbst wenn man sich andererseits auf die Menge der Wellenoperatoren und die Menge der unendlichen Matrizen beschränkt, funktioniert es auch nicht. Der oben beschriebene unvollständige Beweis ihrer Isomorphie kann schon deshalb nicht vervollständigt werden, da die sie erzeugenden kanonischen Elemente in drastisch unterschiedlichen Anzahlen existieren. Während es genau $6N$ kanonische Wellenoperatoren gibt, sind es aufgrund von deren Zeitabhängigkeit überabzählbar viele kanonische Matrizen.

Die Situation änderte sich einige Jahre später grundlegend, als eine sehr viel allgemeinere Formulierung der Quantenmechanik gefunden wurde und sich modifizierte Varianten der Wellenmechanik und der Matrizenmechanik als Spezialfälle derselben erwiesen. Im nächsten Abschnitt betrachten wir das genauer, zuvor sollte jedoch der erste Schritt in diese Richtung

⁶⁹Siehe speziell dazu [106].

erwähnt werden. Diesen vollzogen Dirac [199] und Jordan [479] im Jahre 1927⁷⁰. Sie kümmerten sich dabei nicht um die vermeintliche mathematische Unmöglichkeit der Aufstellung einer Eins-zu-Eins-Beziehung zwischen der Menge der Wellenoperatoren und der Menge der unendlichen Matrizen, sondern konstruierten kurzerhand eine solche⁷¹. Es ist entsprechend wenig erstaunlich, daß sie dabei Hilfsmittel verwendeten, die aus damaliger Sicht als „nur unter mathematischen Vorsichtsmaßregeln anwendbar“ (Heisenberg [406]) bis „außerhalb des Rahmens der allgemein üblichen mathematischen Methoden liegend“ (von Neumann [655]) eingestuft wurden. Es dauerte über dreißig Jahre, bis die Sache auf solide mathematische Fundamente gestellt werden konnte, aber spätestens seitdem kann von dubiosen formalen Tricks keine Rede mehr sein. Trotz der windigen mathematischen Methoden kann die Tragweite dieses Konzepts und dessen Einfluß auf die weitere Entwicklung der Quantenmechanik gar nicht überschätzt werden.

Um den Dirac-Jordanschen Beweis der Gleichwertigkeit der beiden Theorien, der unter dem Begriff der *Transformationstheorie* bekannt geworden ist, kurz zu skizzieren, starten wir wieder bei der Matrizenmechanik und erinnern daran, daß deren zentrale Aufgabe darin besteht, zu der aus der Hamiltonfunktion des betrachteten Systems und irgendwelchen kanonischen Matrizen $\bar{\mathbf{Q}}_1, \dots, \bar{\mathbf{Q}}_k$ und $\bar{\mathbf{P}}_1, \dots, \bar{\mathbf{P}}_k$ zu bildenden Hamiltonschen Matrix $\bar{\mathbf{H}}$ eine unitäre Transformation \mathbf{S} zu finden, durch welche die im allgemeinen nichtdiagonale Matrix $\bar{\mathbf{H}}$ in die diagonale Matrix $\mathbf{H} = \mathbf{S}^{-1} \bar{\mathbf{H}} \mathbf{S}$ übergeht. Für die mittransformierten Matrizen $\mathbf{Q}_i = \mathbf{S}^{-1} \bar{\mathbf{Q}}_i \mathbf{S}$ und $\mathbf{P}_i = \mathbf{S}^{-1} \bar{\mathbf{P}}_i \mathbf{S}$ ($i = 1, \dots, k$) gelten dann weiterhin die kanonischen Gleichungen (3.6) sowie die Vertauschungsrelationen (3.13), und das Problem ist gelöst.

Um nun einen Zusammenhang zur Wellenmechanik herzustellen, formt man die Gleichung $\mathbf{H} = \mathbf{S}^{-1} \bar{\mathbf{H}} \mathbf{S}$ um in

$$\mathbf{S} \mathbf{H} = \bar{\mathbf{H}} \mathbf{S}$$

(Matrizenmultiplikation ist nicht kommutativ!), schreibt dies in Komponenten, also

$$\sum_{\nu} s_{\mu\nu} w_{\nu} \delta_{\nu\rho} = \sum_{\nu} h_{\mu\nu} s_{\nu\rho}$$

oder

$$\sum_{\nu} h_{\mu\nu} s_{\nu\rho} = w_{\rho} s_{\mu\rho} \quad (3.58)$$

und erkennt, daß dies ein System von unendlich vielen linearen Gleichungen mit unendlich vielen Unbekannten $s_{\mu\rho}$ (den Komponenten der Transformationsmatrix \mathbf{S}) und w_{ρ} (den Komponenten der Diagonalmatrix \mathbf{H}) ist. Diese sind folglich Lösungen von Gleichungen der Form

$$\sum_{\nu} h_{\mu\nu} x_{\nu} = \lambda x_{\mu}, \quad (3.59)$$

⁷⁰Ansatzweise wurde das im Jahr zuvor bereits von Lanczos vorweggenommen, aber nicht weiter ausgearbeitet. Siehe dazu Abschnitt 3.4.

⁷¹Zu Diracs Formulierung der Quantenmechanik siehe insbesondere auch seine Maßstäbe setzende, erstmals 1930 erschienene Monographie [206].

was schon stark an das Eigenwertproblem der Wellenmechanik erinnert, weswegen man hier auch vom Eigenwertproblem und den Eigenwerten der Matrix \mathbf{H} spricht. In der Matrizenmechanik werden dabei stets diskrete Eigenwerte vorausgesetzt; in der Wellenmechanik können die Eigenwerte jedoch diskret oder kontinuierlich sein, und wenn man Gleichung (3.59) mit der entsprechenden Eigenwertgleichung

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (3.60)$$

der Wellenmechanik vergleicht, die auf stetige Funktionen anzuwenden ist, wird deutlich, daß zum Übergang von der Matrizenmechanik zur Wellenmechanik gerade die Übertragung der diskreten Matrizenschreibweise auf den Fall kontinuierlicher Größen erforderlich ist. Dies war wie gesagt aus damaliger streng-mathematischer Sicht unmöglich, funktionierte dann nichtsdestoweniger aber hervorragend; außerdem konnten die verwendeten Methoden später solide mathematisch begründet werden, was zur Theorie der Distributionen und zu ungeahnten neuen Höhenflügen der Funktionalanalysis führte⁷².

Dirac bewerkstelligte die erforderliche Übertragung ins Kontinuum auf geniale, mathematisch rustikale Weise, indem er seine berühmte Delta-Funktion und die damit in Verbindung stehenden Begriffe und Methoden heranzog, ohne sich weiter darum zu kümmern, daß es sich dabei um Dinge handelte, die gemeinhin als mathematische Fiktionen und damit als völlig unmöglich betrachtet wurden. Damit gelingt der Übergang zu kontinuierlichen Größen ganz zwanglos [406]: Aus den diskreten Indizes μ, ν, \dots werden kontinuierliche Indizes l, m, \dots , Summen werden durch Integrale ersetzt, für die kontinuierliche Einheitsmatrix ergibt sich

$$(\mathbf{1})_{l'l''} = \delta(l' - l''),$$

und dazu kommen die kontinuierlichen Matrizen

$$(\mathbf{Q}_k)_{q'q''} = q'_k \delta(q'_1 - q''_1) \delta(q'_2 - q''_2) \cdot \dots \cdot \delta(q'_n - q''_n) \cdot \dots$$

und

$$\begin{aligned} (\mathbf{P}_k)_{q'q''} &= -i\hbar \delta'(q'_k - q''_k) \delta(q'_1 - q''_1) \cdot \dots \times \\ &\quad \times \delta(q'_{k-1} - q''_{k-1}) \delta(q'_{k+1} - q''_{k+1}) \cdot \dots \cdot \delta(q'_n - q''_n) \cdot \dots \end{aligned}$$

($\delta'(q)$ ist die Ableitung der Delta-Funktion), die wieder die Vertauschungsrelationen (3.13) erfüllen. Aus der diskreten Transformationsmatrix \mathbf{S} und der Bedingungsgleichung (3.58) zur

⁷²Die Begründer der mathematischen Theorie der Distributionen sind Sobolev [818], [819] und Schwartz [797]; von letzterem stammt auch ein klassisches zweibändiges Lehrbuch dazu [798], [799]. Gut lesbare, aber sehr knappe Einführungen in die Theorie der Distributionen sind die Bücher von Berz [60] und Walter [905], ausführlicher ist dasjenige von Constantinescu [167]. Diese drei gehen jedoch auf wesentliche uns hier interessierende Dinge nicht ein. Einen vollständigeren Überblick, insbesondere auch was für die Quantenmechanik relevante Aspekte betrifft, liefert nach wie vor das vierbändige Standardwerk von Gelfand und Schilow [317], [318], [319], [320]. Zur Geschichte der Distributionen in Mathematik und Physik siehe [691].

Diagonalisierung diskreter Matrizen werden nun die kontinuierliche Transformationsmatrix $S_{q'q''}$ und die zum Diagonalisieren einer beliebigen Funktion $F = F(p, q)$ zu lösende Gleichung

$$\int [F(p, q)]_{q'q''} S_{q''F'} dq'' = S_{q'F'} F' \quad (3.61)$$

mit den Eigenwerten F' von F . Verwendet man die für die Delta-Funktion gültigen Relationen

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x') \delta(x - x') dx' = f(x)$$

und

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x') \delta'(x - x') dx' = -f'(x),$$

so läßt sich das Integral auf der linken Seite von (3.61) ausführen und man erhält

$$\hat{F} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q'}, q' \right) S_{q'F'} = S_{q'F'} F'. \quad (3.62)$$

Hier geht es natürlich speziell um die Diagonalisierung der Hamiltonfunktion $H(p, q)$ des betrachteten physikalischen Systems; in der üblichen Weise setzt man hier für die kontinuierlichen Komponenten der Transformationsmatrix $S_{q'H'} \equiv \psi_E(q')$ und für die Eigenwerte $H' \equiv E$. Aus (3.62) wird dann genau die stationäre Schrödingergleichung

$$\hat{H} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q}, q \right) \psi_E(q) = E \psi_E(q),$$

und $\psi_E(q)$ ist natürlich nichts anderes als die zu bestimmende Wellenfunktion des beschriebenen Systems. Nach Diagonalisierung von H lauten die kontinuierlichen Matrizen für p und q dann entsprechend⁷³

$$p_{E'E''} = -i\hbar \int \psi_{E'}^* \frac{\partial}{\partial q} \psi_{E''} dq$$

und

$$q_{E'E''} = \int \psi_{E'}^* q \psi_{E''} dq.$$

Damit ist die Analogie der beiden Theorien modulo vernünftiger Grundlegung der Theorie der Distributionen gezeigt.

Aus konzeptioneller Sicht noch wesentlich wichtiger ist übrigens die in diesem Zusammenhang von Dirac erstmals ausdrücklich betonte Unterscheidung von *Zuständen* und *Observablen* eines quantenmechanischen Systems. Wir haben gesehen, daß ursprünglich nur in der

⁷³Die (kontinuierlichen) Diagonalelemente dieser Matrizen werden sich bald als die Erwartungswerte für Messungen von Ort und Impuls an Systemen im Zustand ψ_E erweisen.

Wellenmechanik beide auftauchten, in der Matrizenmechanik dagegen nur die letzteren. Das änderte sich nun, da sich im Rahmen der eben beschriebenen Überlegungen der Zustandsbegriff auch in der Matrizenmechanik etablieren ließ, und zwar in Form der Eigenvektoren der Hamiltonschen Matrix \mathbf{H} und damit der Spalten der Transformationsmatrix \mathbf{S} . Damit ergibt sich gleichzeitig eine eindeutige Zuordnung zwischen diesen Eigenvektoren und den Eigenfunktionen des Hamiltonoperators der Wellenmechanik, was die gegenseitige Gleichwertigkeit der Zustandsbegriffe der beiden Theorien belegt. Das wird im nächsten Abschnitt von Bedeutung sein.

Auch wenn bei Anlegen ernsthafter mathematischer Maßstäbe alles in allem wasserdichte Beweise der Äquivalenz von Wellenmechanik und Matrizenmechanik anfangs nicht vorlagen und auch nicht vorliegen konnten, ist an den geschilderten Überlegungen von Schrödinger, Dirac und Jordan dennoch erkennbar, daß trotz der grundlegenden strukturellen Unterschiede den beiden unterschiedlichen Formen der neueren Quantenmechanik wohl doch eine gemeinsame Struktur zugrundeliegen mußte, wenn auch eine solche in dieser frühen Phase noch ihrer Entdeckung harzte. Damit war gleichzeitig der weitere Weg zur Quantenmechanik in ihrer modernen Form vorgezeichnet.

3.6 Hilberträume und abstrakte Quantenmechanik

Sehr bald zeigte es sich, daß ein solcher gemeinsamer Formalismus tatsächlich existiert, und auch in mathematisch strenger Form aufgebaut werden kann. Es war wesentlich der Verdienst J. von Neumanns, hierfür den Anfang zu bereiten [649], [650], [651], [654]⁷⁴; in einem berühmt gewordenen, 1932 erstmals erschienenen Buch [655] präsentierte er mit beeindruckender formaler Präzision einen Abriß des damaligen Standes der Theorie. Es bildete den Grundstein für die Entwicklung der modernen funktionalanalytischen Formulierung der Quantenmechanik⁷⁵, die damit ein einheitliches Fundament erhalten hatte. Darunter ist insbesondere auch zu verstehen, daß diese abstrakte Form der Quantenmechanik nicht einfach eine weitere Formulierung darstellt, sondern gleich eine gesamte Menge von unendlich vielen, sich im Detail unterscheidenden, aber im Prinzip gleich aufgebauten mathematischen Strukturen darstellt.

Seit dieser Zeit steht beim formalen Aufbau der Quantenmechanik die Feststellung im Mittelpunkt, daß die Zustände eines physikalischen Systems einen *Hilbertraum* bilden⁷⁶. Hilberträume sind Vektorräume mit Skalarprodukt, die bezüglich der durch letzteres induzierten

⁷⁴Vergleiche auch [426], wo Hilbert, Nordheim und von Neumann einen ersten Versuch einer axiomatischen Beschreibung der Quantenmechanik unternahmen.

⁷⁵Präziser sollte man hier von der orthodoxen Teilchen-Quantenmechanik sprechen, da in Form der Quantenfeldtheorie ein sehr viel allgemeinerer Theorienrahmen existiert, der die elementare Quantenmechanik stark erweitert und im übrigen seinerseits wieder in mathematisch unterschiedlich streng formulierten Varianten zu finden ist.

⁷⁶Ob diese Hilbertraum-Struktur von fundamentalem Charakter und damit axiomatisch festzulegen ist oder aus noch tieferliegenden Axiomen abgeleitet werden kann, ist eine Frage für sich, die unterschiedlich beantwortet wird. Versuche, die in Richtung der zweiten dieser beiden Positionen gehen, wurden beispielsweise von Mackey [578] sowie von Jauch [469] und Piron [695] vorgestellt.

Norm vollständig sind, also abgeschlossen in dem Sinn, daß jede Cauchy-Folge konvergiert. Genauergesagt wird dabei der Begriff des Zustands stark verallgemeinert, indem man Zustände durch spezielle Operatoren auf dem betrachteten Hilbertraum beschreibt, den *statistischen Operatoren*. Die durch die Hilbertraumelemente repräsentierten Zustände bilden lediglich eine, wenn auch sehr wichtige Teilmenge der Menge aller möglichen Zustände. Insbesondere sind dabei *beliebige* Hilberträume zulässig, endlich- oder unendlichdimensionale, separable wie überseparable, sodaß auch beliebige Systeme beschreibbar sind. Physikalische Größen erweisen sich als darstellbar durch lineare selbstadjungierte Operatoren auf dem jeweiligen Hilbertraum, und die zugehörigen möglichen Meßwerte als die Elemente von deren Spektren. Damit können mächtige Hilfsmittel aus der Funktionalanalysis zum Einsatz kommen, insbesondere Maßtheorie und Spektraltheorie⁷⁷.

Matrizenmechanik und Wellenmechanik in ihrer entgültigen Form erweisen sich in diesem Rahmen jeweils als sehr spezielle Beispiele mathematischer Strukturen, die unter dem Sammelbegriff Quantenmechanik firmieren. Dabei gelten die Mengenrelationen⁷⁸

$$\begin{array}{ll} \text{Matrizenmechanik} & \subsetneq \text{Quantenmechanik,} \\ \text{Wellenmechanik} & \subsetneq \text{Quantenmechanik,} \\ \text{Matrizenmechanik} \cap \text{Wellenmechanik} & = \emptyset, \\ \text{Matrizenmechanik} \cup \text{Wellenmechanik} & \subsetneq \text{Quantenmechanik.} \end{array}$$

Ein bedeutender Nebeneffekt hiervon ist die nunmehr vorhandene Möglichkeit, die Äquivalenz und damit die physikalische Gleichwertigkeit von Matrizenmechanik und Wellenmechanik mathematisch streng zu beweisen, denn die hierbei zuvor aufgetretenen Hindernisse lassen sich im Rahmen der abstrakten Quantenmechanik aus dem Weg räumen. Zu diesen Hindernissen zählte wie gesehen zuvorderst der in der Matrizenmechanik ursprünglich fehlende, in der Wellenmechanik jedoch zentrale Begriff des Zustands. Im Rahmen von letzterer bildet der Hilbertraum

$$\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N) = \left\{ \psi : \mathbb{R}^N \longrightarrow \mathbb{C} \mid \psi \text{ Lebesgue-meßbar} \wedge \int_{\mathbb{R}^N} \psi^*(x) \psi(x) dx < \infty \right\}$$

der quadratisch Lebesgue-integrierbaren Funktionen den Raum der quantenmechanischen Zustände⁷⁹. Für die Matrizenmechanik tritt an dessen Stelle der Hilbertraum

$$l^2 = \left\{ (z_n)_{n \in \mathbb{N}} \mid \sum_{n=0}^{\infty} z_n^* z_n < \infty \right\}$$

⁷⁷Schon drei Jahre vor von Neumann legte A. Wintner in seinem bereits erwähnten Buch [936] dar, inwiefern die Spektraltheorie einen wesentlichen Bestandteil des grundlegenden mathematischen Gerüsts der Quantenmechanik bildet. Er verwendete allerdings unendliche Matrizen und machte noch nicht vom Hilbertraum-Formalismus Gebrauch.

⁷⁸Dieses sehr instruktive Bild stammt von Müller [634].

⁷⁹Genaugenommen sind die Elemente von $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ Klassen von Funktionen, die sich jeweils nur auf einer Menge vom Lebesgue-Maß Null unterscheiden, da nur so ein Hilbertraum dabei entsteht.

der komplexen Folgen, bei denen aus den Quadraten der Folgenglieder konvergente Reihen gebildet werden können. Faßt man diese Folgen als unendliche Vektoren auf, kann man mit ihnen und den unendlichen Matrizen der Matrizenmechanik in natürlicher Weise im Sinn der linearen Algebra rechnen und dafür insbesondere auch Skalarprodukte und Matrizenmultiplikation wie gewohnt definieren.

Diese beiden Räume scheinen zwar auf den ersten Blick grundverschieden zu sein. Von Neumann konnte jedoch nachweisen, daß man mit Hilfe einer beliebigen vollständigen orthonormalen Menge $\{\varphi_m\}_{m \in \mathbb{N}}$ von Funktionen aus $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ mit

$$\Phi_{\{\varphi_m\}} : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N) \longrightarrow l^2, \quad \psi \longmapsto \Phi_{\{\varphi_m\}}(\psi) = ((\psi, \varphi_m))_{m \in \mathbb{N}}$$

eine bijektive Abbildung zwischen $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ und l^2 konstruieren kann, die sich sogar als isometrischer Isomorphismus erweist, das heißt, sie ordnet in umkehrbar eindeutiger Weise jeder Funktion aus $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ eine Folge aus l^2 zu, wobei Skalarprodukte erhalten bleiben⁸⁰. Folglich enthalten $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ und l^2 zwar unterschiedliche Elemente, haben aber dieselben abstrakten Eigenschaften. Damit bedeutet die Isomorphie der beiden Hilberträume, daß die Matrizenmechanik und die Wellenmechanik stets dieselben numerischen Resultate erbringen *müssen*, da sie eigentlich nur verschiedene Realisierungen derselben abstrakten mathematischen Strukturen darstellen.

Selbstverständlich gab es seit den Dreißigerjahren des zwanzigsten Jahrhunderts Weiterentwicklungen des mathematischen Apparats der Quantenmechanik; die Hilbertraum-Formulierung bildet jedoch die Grundlage für sämtliche ihrer modernen Fassungen. Während damit der formale Rahmen zumindest der nichtrelativistischen Quantenmechanik heutzutage als im Großen und Ganzen abgeschlossen betrachtet werden kann, darf davon in Bezug auf die Interpretation dieses Formalismus nach wie vor keine Rede sein. Auch der Bereich der relativistischen Quantenmechanik kann einen solchen Anspruch noch lange nicht erheben. Hier sind im Rahmen der Quantenfeldtheorie zwar ebenfalls enorme Fortschritte erzielt worden, was sich unter anderem in spektakulär genauen Vorhersagen von Meßergebnissen äußert, doch bleibt dabei nicht nur im Hinblick auf die Interpretation des Formalismus, sondern auch im Hinblick auf den Formalismus selbst noch viel zu tun. Mit Interpretationsproblemen der nichtrelativistischen Quantenmechanik werden wir uns noch sehr ausführlich beschäftigen, mit der Quantenfeldtheorie allerdings nur ganz am Rand, da dies andernfalls problemlos mehrere weitere Bücher füllen würde.

3.7 Die Wahrscheinlichkeitsdeutung

Trotz der spektakulären quantitativen Erfolge der beiden prominenten Formulierungen der neueren Quantenmechanik mußte 1926 eine erste Bilanz aus naturphilosophischer Sicht insofern enttäuschend ausfallen, als man die Wahl zwischen völliger Ablehnung von und kompromißlosem, aber erfolglosem Festhalten an einer anschaulichen Deutung des mathematischen

⁸⁰Der Beweis erfolgt unter Verwendung des Satzes von Riesz-Fischer.

Apparates der Theorie zu haben schien⁸¹. Ein erster brauchbarer Ausweg aus dieser Schwierigkeit gelang Max Born im selben Jahr mit seiner berühmten *Wahrscheinlichkeitsinterpretation* eher beiläufig, als er nach Lösungen eines anderen, von ihm als schwerwiegender eingeschätzten Problems suchte, nämlich einer Ausdehnung der Anwendbarkeit der Quantenmechanik von nur stationären Zuständen auf Übergänge und Streuzustände⁸².

3.7.1 Eine Anmerkung mit Folgen

Den ersten Hinweis auf Borns Wahrscheinlichkeitsinterpretation findet man in einer Fußnote seiner Arbeit [105]. Die eigentliche Aufgabenstellung, der dieser Aufsatz gewidmet ist, betrifft wie angedeutet die Beantwortung der Frage, ob die neue Quantentheorie in der Schrödingerschen Formulierung nur auf stationäre Zustände oder auch auf, wie Born sich ausdrückt, „Quantensprünge“, also auf die physikalischen Vorgänge bei Übergängen zwischen unterschiedlichen Energieniveaus anwendbar sei. Gleichzeitig versucht er, die klassische Teilchenvorstellung doch noch irgendwie in die Quantenmechanik herüberzuretten. Born betrachtet dazu atomare Stoßvorgänge und speziell die Streuung eines freien Elektrons an einem Atom. Dabei beschreibt er freie Elektronen durch ebene Wellen

$$\varphi(\lambda) = \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} \vec{e} \vec{r} + \delta\right)$$

mit De Broglie-Wellenlänge $\lambda = h/p$ und Ausbreitungsrichtung $\vec{e} = \vec{p}/p$ und die ungestörten Atome durch eine diskrete Folge von Eigenfunktionen ψ_n^0 , definiert die Richtung des Impulses der freien Elektronen als z-Achse und findet für den Zustand des gesamten Systems vor der Streuung Wellenfunktionen der Form

$$\Psi_{n\lambda}^0 = \psi_n^0 \sin \frac{2\pi z}{\lambda}.$$

Für den Zustand, in den das System nach der Streuung im Unendlichen übergeht, erhält Born eine Superposition von Lösungen des ungestörten Vorgangs der Form

$$\psi_{n\lambda}^{(1)} = \sum_n \iint_{\vec{e} \vec{r} > 0} \Phi_{nm\lambda}(\vec{e}) \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} \vec{e} \vec{r} + \delta\right) \psi_m^0 d\Omega.$$

In seinem Bemühen um eine korpuskulare Deutung solcher Prozesse stellt Born nun fest, daß die einzige Möglichkeit für eine solche angesichts der offenkundig vorliegenden wellenhaften Beschreibung darin besteht, die Amplituden $\Phi_{nm\lambda}(\vec{e})$ wahrscheinlichkeitstheoretisch zu interpretieren. Zunächst geht er davon aus, daß es diese Größen selbst sind, welche die Wahrscheinlichkeit dafür bestimmen, daß ein aus der z-Richtung kommendes Elektron in die durch

⁸¹Die in Abschnitt 3.2 beschriebene dritte, weniger prominente Formulierung konnte diese Bilanz auch nicht verbessern, da sie ebenfalls keine anschauliche Deutung zuließ.

⁸²Interessanterweise taucht die Idee, de Brogliesche Materiewellen statistisch zu deuten, bei Einstein bereits 1925 und damit zu einem Zeitpunkt auf, als von quantenmechanischen Wellenfunktionen noch nirgends etwas bekannt war, allerdings ohne weiter ausgearbeitet zu werden [249].

den Einheitsvektor \vec{e} festgelegte Richtung gestreut wird, um dann in der erwähnten Fußnote zu bemerken, daß eine genauere Überlegung Anlaß dazu gibt, diese Wahrscheinlichkeit als proportional zum *Quadrat* von $\Phi_{nm\lambda}(\vec{e})$ anzunehmen.

Diese sehr vage Andeutung wird in Borns darauffolgenden Arbeiten [106] - [110] präzisiert, und zwar in zweierlei Hinsicht. Einerseits versucht Born, seine Wahrscheinlichkeitsinterpretation anschaulich zu deuten [106]. Er macht dabei von Vorstellungen Gebrauch, die Einstein in privaten Mitteilungen im Zusammenhang mit seiner Lichtquantenhypothese schilderte, aber nie veröffentlichte. Danach sollte man sich Licht in erster Linie korpuskular vorstellen; die Wellen wären dann nur dazu da, die Photonen auf ihrem Weg zu lenken, und man müßte sie daher als ein Gespensterfeld bezeichnen. Born überträgt diese Idee nun auf De Broglies Materiewellen und die Schrödingergleichung, indem er die Schrödingerschen Wellenfunktionen ebenfalls als Gespensterfeld deutet, um sogleich zu betonen, daß er den Begriff *Führungsfeld* für geeigneter hält. In diesem Bild breitet sich das Führungsfeld ψ gemäß der Schrödingergleichung aus, während Teilchen wie zum Beispiel Elektronen weiterhin als Korpuskeln „herumfliegen“ und dabei Impuls und Energie in klassischem Sinn übertragen. Allerdings sind für ihre Bahnen nur Wahrscheinlichkeitsaussagen möglich, nämlich diejenigen, welche durch die durch ψ oder genauer gesagt $|\psi|^2$ bestimmte Wahrscheinlichkeitsverteilung gegeben sind. Daraus geht klar hervor, daß Born in dieser frühen Phase Teilchen ganz klassisch und deren Orte und Impulse als sehr wohl real existierende Größen betrachtete. Letztere erklärte er lediglich insofern für unbestimmt, als für sie und damit für die Bahnen der Teilchen mit Hilfe der Quantenmechanik nur Wahrscheinlichkeitsaussagen möglich sind. Born faßt seine Auffassung zusammen, indem er schreibt: „Die Bewegung der Partikeln folgt Wahrscheinlichkeitsgesetzen, die Wahrscheinlichkeit selbst aber breitet sich im Einklang mit dem Kausalgesetz aus.“⁸³ Ähnlich wie Schrödinger stellt sich auch Born damit gegen die prinzipiell und gezielt unanschauliche Vorgehensweise der Matrizenmechanik. Das ist jedoch nicht das eigentliche Problem; dieses liegt vielmehr in unvermeidlichen Widersprüchen, die eine solche Führungsfeld-Interpretation heraufbeschwört. Quanteneffekte sind typischerweise unvereinbar mit klassischen lokalisierten Partikeln. Beispielsweise führen Elektronen, die sich auf tatsächlichen Bahnen in der Atomhülle bewegen sollen, stets zur selben, in Abschnitt 1.2.3.3 beschriebenen Problematik beschleunigter Ladungen, auch wenn für die Bahnen nur Wahrscheinlichkeitsaussagen möglich sind. In ähnlicher Weise sind Interferenzerscheinungen von Teilchen etwa an Gittern nicht erklärbar, wenn die interferierenden Objekte auf Bahnen durch einzelne Spalte hindurchtreten, ganz egal, ob die Bahnen deterministisch oder nur wahrscheinlichkeitstheoretisch beschreibbar sind.

Das darf jedoch keineswegs als Kritik an der Wahrscheinlichkeitsdeutung selbst verstanden werden. Diese ist vielmehr als einer der wesentlichen Schritte zur modernen Ausgestaltung der

⁸³Es ist interessant, daß diese Aussage gegenwärtig intensiv in der gymnasialen Schulbuchliteratur zitiert und in Abituraufgaben thematisiert wird. Dabei ist jedoch Vorsicht geboten, denn das Zitat ist in seiner wörtlichen Form natürlich nur von historischem Interesse; physikalisch korrekt wird es erst, wenn man das Wort „Bewegung“ durch „Verhalten“ ersetzt und sich darüber klar ist, daß man unter Partikeln Quantenobjekte aller Art zu verstehen hat.

Quantenmechanik zu betrachten⁸⁴. Das wird anhand von Borns zweiter Präzisierung deutlich, welche erstmals die technischen Details erläutert [106]. Hierzu betrachtet er ein physikalisches System mit der stationären Schrödingergleichung⁸⁵

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

und einer Folge $\{\psi_n(q) \mid n \in \mathbb{N}\}$ von Lösungen; q stehe für die freien Variablen, von welchen diese Funktionen abhängen. Diese seien auf 1 normiert und zueinander orthogonal, es gelte also

$$\int \psi_n(q) \psi_m^*(q) dq = \delta_{nm}.$$

In der Funktionalanalysis zeigt man, daß sich dann jede Funktion $\psi(q)$ nach den $\psi_n(q)$ entwickeln läßt gemäß

$$\psi(q) = \sum_n c_n \psi_n(q).$$

Daraus folgt

$$\int |\psi(q)|^2 dq = \sum_n \sum_m c_n c_m^* \int \psi_n(q) \psi_m^*(q) dq = \sum_n \sum_m c_n c_m^* \delta_{nm} = \sum_n |c_n|^2.$$

Born schlägt als Interpretation dieses Resultats zunächst vor, das Integral als die Anzahl der beteiligten Atome aufzufassen [106]; dann gibt $|c_n|^2$ jeweils die Häufigkeit des Zustandes n an. Summiert man diese über alle n , erhält man wieder die gesamte Anzahl. Etwas später ändert er seine Auffassung [109], [110]. Normiert man nämlich auch $\psi(q)$, indem man zu der neuen Wellenfunktion

$$\varphi(q) = \frac{\psi(q)}{\int \psi_n(q) \psi_m^*(q) dq}$$

übergeht, so folgt

$$\varphi(q) = \sum_n a_n \psi_n(q)$$

mit

$$a_n = \frac{c_n}{\int \psi_n(q) \psi_m^*(q) dq}$$

und außerdem

$$\int \varphi(q) \psi^*(q) dq = \sum_n |c_n|^2 = 1.$$

Das führt unmittelbar zur präzisen Form der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation: Die Größen $|a_1|^2, |a_2|^2, \dots, |a_n|^2, \dots$ sind die jeweiligen Wahrscheinlichkeiten dafür, daß sich das System im 1., 2., ..., n ., ... Zustand befindet.

⁸⁴Allerdings nicht der einzige, auch wenn das gelegentlich behauptet wird. Wir kommen darauf zurück.

⁸⁵Die Übertragung der genuin auf der Wellenmechanik aufbauenden Wahrscheinlichkeitsdeutung auf die Matrizenmechanik macht die in Abschnitt 3.3 erwähnte Erweiterung derselben um unendliche Spaltenvektoren und damit Zustände erforderlich; die zugehörigen Original-Veröffentlichungen sind [199], [400], [476], [477] und [677].

3.7.2 Die Lehrbuchfassung der Wahrscheinlichkeitsdeutung

Mit der zunehmenden Ausgestaltung des quantenmechanischen Formalismus ließ sich die Sache in der Folgezeit schnell weiter verallgemeinern. Um das nachzuvollziehen, nehmen wir wieder an, unser physikalisches System werde durch eine Wellenfunktion ψ beschrieben, und wir messen daran eine Größe A , die durch den linearen Operator \hat{A} repräsentiert wird. Um genaueres darüber zu erfahren, betrachten wir die Darstellung von ψ als Linearkombination aus Eigenfunktionen u_i von \hat{A} ,

$$\psi = \sum_i c_i u_i, \quad (3.63)$$

wobei wir auch hier annehmen, daß die u_i ein Orthonormalsystem bilden. ψ soll ebenfalls normiert sein, es gilt folglich

$$\begin{aligned} \int \psi(q) \psi^*(q) dq &= \sum_i \sum_j c_i^* c_j \int u_i(q) u_j(q) dq = \sum_i \sum_j c_i^* c_j \delta_{ij} \\ &= \sum_i c_i^* c_i = \sum_i |c_i|^2 = 1 \end{aligned} \quad (3.64)$$

Wenn außer einem einzigen c_i alle anderen verschwinden, hat man wieder den Fall einer Eigenfunktion von \hat{A} . Ist dies nicht der Fall, so sieht man an (3.64), daß nun die c_i die einzelnen Eigenwerte gewissermaßen gewichten, und zwar im Sinne einer *Wahrscheinlichkeitsverteilung*: Die $|c_i|^2$ sind sämtlich reell, liegen zwischen 0 und 1, und ihre Summe ist 1. Mit anderen Worten, die $|c_i|^2$ geben jeweils die Wahrscheinlichkeit an, mit der bei einer Messung von A der i -te Eigenwert a_i herauskommt.

Wir bemerken noch, daß für die Koeffizienten die Beziehung

$$c_i = \int u_i(q) \psi(q) dq \quad (3.65)$$

gilt, was man durch Nachrechnen sofort verifizieren kann:

$$\int u_i(q) \psi(q) dq = \int u_i(q) \sum_j c_j u_j(q) dq = \sum_j c_j \int u_i(q) u_j(q) dq = \sum_j c_j \delta_{ij} = c_i.$$

(3.63) kann daher auch in der Form

$$\psi = \sum_i \int u_i(q') \psi(q') dq' u_i(q)$$

geschrieben werden. Entsprechend kann obige Aussage auch wie folgt formuliert werden: Die Größen $|\int u_i(q) \psi(q) dq|^2$ geben jeweils die Wahrscheinlichkeit an, mit der bei einer Messung von A der i -te Eigenwert a_i herauskommt.

Ein wichtiger Sonderfall sollte eigens erwähnt werden, nämlich derjenige, bei dem der betrachtete Operator der Ortsoperator \hat{R} ist. Dessen Eigenfunktionen $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$ erfüllen die Eigenwertgleichung

$$\hat{R} \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \vec{r} \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}),$$

und da sie vom kontinuierlichen Parameter \vec{r}_0 abhängen, müssen wir beim Entwickeln von Wellenfunktionen nach ihnen Integrale anstelle von Summen verwenden und erhält Ausdrücke der Form

$$\psi(\vec{r}) = \int_{\mathbb{R}^3} c(\vec{r}') \xi_{\vec{r}'}(\vec{r}) d\vec{r}'. \quad (3.66)$$

Wir vergleichen das mit der Relation

$$\int_{\mathbb{R}^3} \psi(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}' = \psi(\vec{r}). \quad (3.67)$$

Hierbei ist $\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ die Diracsche Delta-Funktion; diese ist bekanntlich definiert durch

$$\delta(\vec{r}) = \begin{cases} \infty & \text{für } \vec{r} = 0, \\ 0 & \text{für } \vec{r} \neq 0, \end{cases}$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} \delta(\vec{r}) d\vec{r} = 1,$$

das heißt, sie verschwindet überall außer am Ursprung, wo sie nicht einfach nur singulär, sondern gleich so singulär ist, daß der unendlich schmale, unendlich hohe Peak den Inhalt 1 hat⁸⁶. Daß es sich hier um eine mathematisch ziemlich windige Angelegenheit handelt, ist unschwer zu erkennen, dennoch läßt sich der Formalismus in völliger Analogie zum diskreten Fall aufbauen. (3.66) und (3.67) legen es nahe, $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$ zu setzen, also Deltafunktionen als Ortseigenfunktionen zu verwenden. Letztere sind dann jedoch nicht mehr auf 1, sondern nur mehr wiederum auf Deltafunktionen normierbar, denn es gilt

$$\int_{\mathbb{R}^3} \xi_{\vec{r}'}(\vec{r}) \xi_{\vec{r}''}(\vec{r}) d\vec{r} = \int_{\mathbb{R}^3} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}'') d\vec{r} = \delta(\vec{r}' - \vec{r}'').$$

Berechnen wir wie oben die Koeffizienten $c(\vec{r})$ der Entwicklung (3.66), erhalten wir

$$\int_{\mathbb{R}^3} \xi_{\vec{r}'}(\vec{r}) \psi(\vec{r}') d\vec{r}' = \int_{\mathbb{R}^3} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \psi(\vec{r}') d\vec{r}' = \psi(\vec{r}),$$

⁸⁶Genaubesehen handelt es sich hier um die dreidimensionale Delta-Funktion. Siehe dazu Anmerkung 67 in Abschnitt 3.5.

das heißt, ortsabhängige Wellenfunktionen sind bereits ihre eigenen Entwicklungskoeffizienten⁸⁷. Die Größe $\rho = |\psi|^2$ muß demnach etwas mit der Wahrscheinlichkeit zu tun haben, bei Ortsmessungen des durch ψ beschriebenen Systems bestimmte Resultate zu erhalten; allerdings muß hierzu die bei kontinuierlichen Wahrscheinlichkeitsverteilungen angebrachte Sorgfalt gewahrt werden. Bekanntlich ist bei solchen die Wahrscheinlichkeit für Einzelergebnisse, also für einelementige Elemente des betrachteten Wahrscheinlichkeitsraumes, stets exakt Null⁸⁸, sodaß man zur Berechnung von Wahrscheinlichkeiten hier über meßbare Mengen integrieren muß. $|\psi|^2$ ist folglich die *Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte* des physikalischen Systems und $\psi(\vec{r})$ die zugehörige *Wahrscheinlichkeitsamplitude*. Die Größe

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

ist die entsprechende *Wahrscheinlichkeitsstromdichte*. In diese Sprache übersetzt bedeutet die Kontinuitätsgleichung⁸⁹

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0,$$

daß sich die Wahrscheinlichkeit, das betrachtete System (das aus einem oder mehreren Teilchen bestehen darf) in einem bestimmten Gebiet anzutreffen, nur ändern kann, wenn es einen Wahrscheinlichkeitstrom aus dem Gebiet heraus oder in das Gebiet hinein gibt, oder anders ausgedrückt, die Teilchenzahl innerhalb eines Gebietes kann sich nur ändern, wenn es einen Teilchenstrom aus dem Gebiet heraus oder in das Gebiet hinein gibt. Die Kontinuitätsgleichung ist damit ein Ausdruck für die *Wahrscheinlichkeitserhaltung* in der Quantenmechanik.

Die Wahrscheinlichkeit, das System in einem infinitesimalen Raumelement $d\vec{r}$ am Ort \vec{r} vorzufinden, ist folglich gegeben durch⁹⁰

$$d\mathfrak{P} = |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r},$$

die Wahrscheinlichkeit, es im Gebiet $\mathcal{G} \subset \mathbb{R}^3$ anzutreffen, ist

$$\mathfrak{P}(\mathcal{G}) = \int_{\mathcal{G}} |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r},$$

⁸⁷Dahinter verbirgt sich der Sachverhalt, daß man Wellenfunktionen in unterschiedlichen Darstellungen schreiben kann. Die Entwicklung einer Zustandsfunktion nach Ortseigenfunktionen bewirkt die Transformation derselben in die Ortsdarstellung, in der sich Schrödingersche Wellenfunktionen nach Konstruktion bereits befinden. Zu jedem eine physikalische Größe beschreibenden Operator gibt es eine eigene Darstellung, in die man beliebige Zustandsfunktionen transformieren kann, indem man sie nach den Eigenfunktionen dieses Operators entwickelt. Die im vorigen Abschnitt beschriebene Bildung von Wellenpaketen gehört ebenfalls zu dieser Thematik. – Details dazu findet man in physikalisch robuster Ausführung in jedem Standard-Lehrbuch der Quantenmechanik, in mathematisch exakter Form beispielsweise in [361] oder [631].

⁸⁸Ein unterhaltsames Beispiel hierfür erhält man, wenn man Zufallszahlen aus einer beliebigen Teilmenge der reellen Zahlen zieht. Die Wahrscheinlichkeit, hierbei eine rationale Zahl zu erwischen, ist ebenfalls exakt Null und die Wahrscheinlichkeit, eine irrationale Zahl zu erhalten, entsprechend exakt 1, wie man mit ein wenig Maßtheorie leicht zeigen kann.

⁸⁹Vergleiche Abschnitt 3.4.4.

⁹⁰Das taucht zum erstenmal 1926 in einem Brief Paulis an Heisenberg auf [675], von dem in Abschnitt 3.8.1 erneut die Rede sein wird.

und weil die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen überhaupt irgendwo anzutreffen, gleich 1 sein muß, folgt wieder die Normierungsbedingung

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 1.$$

Das bestätigt zusätzlich die Interpretation von $|\psi(\vec{r})|^2$ als einer kontinuierlichen Wahrscheinlichkeitsdichte⁹¹.

Wahrscheinlichkeitsaussagen lassen sich behelfsweise als Aussagen über relative Häufigkeiten bei sehr vielen, aus mathematischer Sicht genaugenommen bei unendlich vielen Einzelergebnissen deuten⁹². Hat man viele Messungen gemacht, so interessiert man sich im allgemeinen für den *Mittelwert* dieser Messungen. Da man mit Gleichung (3.64) über die statistische Verteilung der einzelnen Eigenwerte und damit der möglichen Meßwerte Bescheid weiß, kann man nun *Voraussagen über Mittelwerte* machen. Solche Voraussagen nennt man *Erwartungswerte*. Wir schreiben dabei $\langle \hat{A} \rangle_\psi$ für den Erwartungswert der Meßwerte, die man bei Messung der Größe A an einem durch die Wellenfunktion ψ beschriebenen System erhält. Gemäß den Gesetzen der Wahrscheinlichkeitsrechnung kann man solche Erwartungswerte durch gewichtete Summen über die möglichen Ereignisse berechnen. Diese erhalten wir bekanntlich über die Wirkung des Operators \hat{A} auf seine Eigenfunktionen

$$\hat{A} u_i = \lambda_i u_i$$

in Form der Eigenwerte λ_i . Für den Erwartungswert der Meßergebnisse für A an ψ gilt also

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_i \lambda_i |c_i|^2 = \sum_i \lambda_i |(u_i, \psi)|^2.$$

⁹¹In der Sprache der Maßtheorie handelt es sich bei $d\mu(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r}$ um ein *Wahrscheinlichkeitsmaß*.

⁹²Die Definition von Wahrscheinlichkeiten als Grenzwerte relativer Häufigkeiten im Grenzfall unendlich vieler Durchgänge des betrachteten Zufallsexperiments ist die gängigste Interpretation dieses Begriffs. Sie geht zurück auf die Häufigkeitsinterpretation von R. von Mises [613], [614], [615], der darüberhinaus als erster versuchte, eine axiomatische Grundlage der Wahrscheinlichkeitstheorie zu schaffen – ein Unterfangen, das erst A. Kolmogorov einige Jahre später gelang [511]. Die Interpretation der relativen Häufigkeiten ist jedoch keineswegs die einzige in der Mathematik vorkommende; es gibt etliche andere Auffassungen, darunter insbesondere auch subjektivistische wie beispielsweise diejenige von B. de Finetti, wonach Wahrscheinlichkeiten über die Bereitschaft von Individuen, auf das Eintreten der einzelnen Möglichkeiten zu wetten, zu definieren sind [295], [296]. Einen kurzen Überblick über die Thematik liefert [117], ausführliches dazu steht beispielsweise in [41], [815], [837], [855] und [856]. Die innermathematische Debatte darüber hält weiter an. Das liegt daran, daß der Wahrscheinlichkeitsbegriff zwar formal mathematisch wohlverstanden ist, seine Interpretation bei genauer Betrachtung jedoch unklar bleibt. Sehr deutlich wird das an den unterschiedlichen Varianten, in welche die beiden eben erwähnten Deutungen ihrerseits wieder gespalten sind. Insbesondere haben sämtliche „Interpretationen“ einschließlich derjenigen der relativen Häufigkeiten eines gemeinsam: Sie sind aus mathematischer Sicht völlig nutzlos. Es spricht vieles dafür, daß man sich für das Verständnis des Wahrscheinlichkeitsbegriffs auf mathematische Modellierung beschränken muß und vernünftige, das heißt, wirklich dessen tatsächliche Natur (was immer das heißen soll) beleuchtende Interpretationen nicht möglich sind. Näheres dazu steht in [857].

Man kann auch die Wirkung von \hat{A} auf ψ berechnen, erhält dabei

$$\hat{A}\psi = \hat{A} \sum_i c_i u_i = \sum_i c_i \hat{A} u_i = \sum_i c_i \lambda_i u_i,$$

und damit lassen sich Erwartungswerte in besonders übersichtlicher Form schreiben⁹³. Es gilt nämlich

$$(\psi, \hat{A}\psi) = \left(\sum_i c_i u_i, \sum_j c_j \lambda_j u_j \right) = \sum_i \sum_j \lambda_j c_i^* c_j = \sum_i \lambda_i |c_i|^2.$$

Wir haben damit das folgende fundamentale Resultat: Wird an einem durch die Wellenfunktion ψ beschriebenen physikalischen System die durch den linearen Operator \hat{A} repräsentierte Größe A gemessen, so gilt für den Erwartungswert

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = (\psi, \hat{A}\psi)$$

oder ausführlicher geschrieben

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi(t) = \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{A} \psi(\vec{r}, t) d\vec{r}.$$

Als Erwartungswert kann natürlich auch ein Zahlenwert herauskommen, der bei einer einzelnen Messung nicht erreicht werden kann.

Analog kann man nun auch höhere Momente von Observablen betrachten; für $n \in \mathbb{N}$ ist das n -te Moment der Observablen A im Zustand ψ definiert durch

$$\langle \hat{A}^n \rangle_\psi = (\psi, \hat{A}^n \psi).$$

Für die Quantenmechanik von ganz besonderer Bedeutung sind die zweiten Momente

$$\langle \hat{A}^2 \rangle_\psi = (\psi, \hat{A}^2 \psi). \quad (3.68)$$

Mit ihnen definiert man wie in der Statistik üblich die *Streuung*, *Varianz* oder *Unschärfe* der Observablen A im Zustand ψ durch

$$\Delta \hat{A}_\psi = \langle \hat{A}^2 \rangle_\psi - \langle \hat{A} \rangle_\psi^2;$$

sie läßt sich als Maß dafür interpretieren, wie stark bei vielen Messungen der Observablen A am Zustand ψ die Meßwerte im Mittel vom Erwartungswert abweichen. Von Neumann konnte zeigen, daß es keine Zustände gibt, die für beliebige Observable streuungsfrei sind [655], womit die Quantenmechanik ein unvermeidliches, grundlegendes *Element des Zufalls* enthält. Das rechtfertigt nachdrücklich die wahrscheinlichkeitstheoretische Deutung eines Teils ihres Formalismus. Ein wichtiger Aspekt dieses stochastischen Charakters sind Unschärferelationen; wir kommen in Abschnitt 3.8 ausführlich darauf zurück.

⁹³Dieser Formalismus taucht erstmals 1927 bei von Neumann auf [650].

1957 bewies Andrew Gleason ein Theorem, aus dem die Eindeutigkeit der formalen Gestalt der Bornschen Regel folgt [335]⁹⁴. Die Bedeutung dieses Resultats liegt insbesondere darin, daß es zeigt, wie die probabilistische Struktur der Quantenmechanik aus ihrem mathematischen Aufbau folgt. Alternative Herleitungen der Bornschen Regel wurden von Deutsch [187], Saunders [763], Zurek [961]⁹⁵ sowie in neuester Zeit von Goyal, Knuth und Skilling [346], [347], [348] vorgeschlagen.

Der Vollständigkeit halber sei an dieser Stelle noch kurz ein Sachverhalt erwähnt, der unter der Bezeichnung *Ehrenfestsches Theorem* bekannt geworden und nicht nur aus historischer Sicht von Interesse ist. Ehrenfest betrachtet die zeitliche Entwicklung des Erwartungswerts eines selbstadjungierten Operators [230] und findet dabei zunächst mit Hilfe der Produktregel

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \int \psi^* \hat{A} \psi d\vec{r} = \int \left[\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \hat{A} \psi + \psi^* \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right) \psi + \psi^* \hat{A} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \right] d\vec{r}.$$

Verwenden der Schrödingergleichung in gewöhnlicher und komplex konjugierter Form liefert weiter

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} &= \int \left[\frac{i}{\hbar} \psi^* \hat{H} \hat{A} \psi - \frac{i}{\hbar} \psi^* \hat{A} \hat{H} \psi + \psi^* \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right) \psi \right] d\vec{r} \\ &= \frac{i}{\hbar} \int \psi^* [\hat{H}, \hat{A}] \psi d\vec{r} + \int \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi d\vec{r} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle \end{aligned}$$

als Bewegungsgleichung für Erwartungswerte von Observablen. Wendet man dies auf die Wellenfunktion eines Teilchens in einem Potential $V(r)$, also einem Hamiltonoperator der Form

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(r),$$

sowie den Orts- und den Impulsoperator an, dann erhält man

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{r}] &= [\hat{p}^2/2m, \hat{r}] = \hat{p} [\hat{p}/2m, \hat{r}] + [\hat{p}/2m, \hat{r}] \hat{p} = -i\hbar \hat{p}/m, \\ [\hat{H}, \hat{p}] &= [\hat{V}(r), \hat{p}] = \hat{V}(r) \hat{p} - \hat{p} \hat{V}(r) - \hat{V}(r) \hat{p} = i\hbar \vec{\nabla} \hat{V}(r), \end{aligned}$$

⁹⁴Der genaue Inhalt von Gleasons Theorem lautet folgendermaßen:

Sei μ ein Maß auf den abgeschlossenen Unterräumen eines reellen oder komplexen Hilbertraums \mathcal{H} mit Dimension 3 oder mehr. Dann gibt es einen positiv-semidefiniten selbstadjungierten Operator \hat{T} der Spurklasse, so daß für alle abgeschlossenen Unterräume \mathcal{A} von \mathcal{H}

$$\mu(\mathcal{A}) = \text{tr}(\hat{T} \hat{P}_{\mathcal{A}})$$

gilt, wobei $\hat{P}_{\mathcal{A}}$ der orthogonale Projektionsoperator von \mathcal{H} auf \mathcal{A} ist.

Daraus läßt sich unmittelbar die Bornsche Regel ableiten, wenn man \hat{T} als statistischen Operator des betrachteten Systems interpretiert. Eine ausführliche Darstellung von Gleasons Theorem nebst Anwendungen findet man in [223].

⁹⁵Vergleiche [776]; kritisches dazu in [620].

und damit und wegen

$$\frac{\partial \hat{r}}{\partial t} = \frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = 0$$

die Resultate

$$\frac{d\langle \hat{r} \rangle}{dt} = \langle \hat{p} \rangle / m$$

$$\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = -\langle \vec{\nabla} \hat{V}(r) \rangle.$$

Diese beiden Relationen bilden den Inhalt des *Ehrenfestschen Theorems*, wonach sich die Erwartungswerte von Ort und Impuls eines quantenmechanischen Systems formal nach den Gesetzen der klassischen Mechanik verhalten [230]. Das erklärt jedoch trotz vielfacher gegenteiliger Aussagen keineswegs den Übergang von der Quantenmechanik zur klassischen Physik; es wird lediglich erkennbar, daß und wie klassische Systeme innerhalb der Quantenmechanik beschrieben werden können. Insbesondere liefert das Ehrenfestsche Theorem keinerlei Begründung dafür, daß klassisches Verhalten in der Natur überhaupt aufzutreten scheint⁹⁶.

3.7.3 Zwei Arten von Wahrscheinlichkeiten

Auf den ersten Blick sehen die Bornsche Regel und ihre Anwendungen aus wie gewöhnliche Wahrscheinlichkeitstheorie – ein Eindruck, der jedoch über wesentliche Unterschiede zwischen klassischen und quantenmechanischen Wahrscheinlichkeiten hinwegtäuscht. Das liegt einerseits an der Natur der letzteren selbst und andererseits an der Quelle, aus der sie beziehungsweise ihre Verteilungsfunktionen abzuleiten sind und damit wieder einmal am Superpositionsprinzip.

Was die Wahrscheinlichkeitsbegriffe selbst betrifft, besteht der Unterschied in der Struktur der jeweils betrachteten Zufallsgrößen; während das im klassischen Fall gewöhnliche reelle Funktionen sind, handelt es sich im quantenmechanischen Fall um *nichtkommutierende Größen*. Die Folge ist unter anderem, daß es in der Quantenmechanik nicht mehr für beliebige Paare von Observablen gemeinsame Wahrscheinlichkeitsverteilungen gibt⁹⁷. Der tiefere mathematische Grund dafür liegt an den Strukturen, die man vorfindet, wenn man versucht, quantenmechanische Wahrscheinlichkeiten als Funktionswerte von Wahrscheinlichkeitsmaßen

⁹⁶Zu diesem Rätsel dürfte inzwischen mit der Theorie der Dekohärenz erstmals ein erfolgversprechender Lösungsversuch vorliegen. Interessanterweise tauchen bereits vor dem ersten Auftreten dieses Begriffs in der Literatur gewisse Vorahnungen davon auf, beispielsweise bei Feyerabend [283], Heisenberg [404], [408], Jauch [468] oder Wigner [934]. Pionier bei der Entdeckung der Dekohärenz war Zeh, später kamen Joos und Zurek dazu; die wichtigsten wegweisenden Arbeiten sind [474], [516], [944] sowie [957] - [960]. Ausführliche Informationen findet man beispielsweise in [73], [475], [771] und [773]. Wir kommen in den Abschnitten 3.9.4 und 3.9.4.1 sowie im vierten Kapitel auf die Dekohärenztheorie zurück.

⁹⁷Das wurde für den speziellen Fall von Ort und Impuls erstmals von Suppes gezeigt [850], Cohen [161] und Nelson [643] lieferten etwas später entsprechende Beweise für beliebige Paare von konjugierten Observablen.

zu deuten [68], [577], [578]. Man erhält als Definitionsmengen orthokomplementäre Verbände, während man es bei klassischen Wahrscheinlichkeitsmaßen mit Booleschen Verbänden zu tun hat. Auf dieser Grundlage konnte Varadarajan ganz allgemein zeigen, daß es unmöglich ist, für beliebige solche nichtklassische Wahrscheinlichkeitsmaße gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichten zu konstruieren [896].

Dieser Sachverhalt wurde zunächst unter anderem von Suppes [850], [851], [858] als Bestätigung einer bereits von Birkhoff [67] und Moyal [622] vermuteten Inkompatibilität der Quantenmechanik mit der klassischen Wahrscheinlichkeitstheorie gewertet und zum Anlaß genommen, von einer „probabilistischen Unvollständigkeit der Quantenmechanik“ zu sprechen und daraus zu folgern, der quantenmechanische Formalismus sei nicht im Sinn der klassischen Wahrscheinlichkeitsrechnung interpretierbar, sondern erfordere stattdessen eine nichtklassische Logik. Suppes entwickelte auch einen Vorschlag für eine solche, aufbauend auf dem Verzicht auf eines der klassischen Axiome, nämlich auf dasjenige, wonach Konjunktionen beliebiger Ereignisse wieder mögliche Ereignisse sind [852], [853]⁹⁸. Wenig später zeigte Sneed, daß man gar nicht zu solch drastischen Mitteln greifen muß [817]. Die zentrale Idee ist dabei die Verwendung *bedingter Wahrscheinlichkeiten*⁹⁹, genauer gesagt, die Interpretation quantenmechanischer Wahrscheinlichkeiten als Wahrscheinlichkeiten für das Auffinden gewisser Meßresultate *unter der Bedingung, daß die zugehörige Observable gemessen wird*. Dann kann man die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten bei nichtkommutierenden Observablen als Wahrscheinlichkeiten mit unterschiedlichen Bedingungen auffassen, passend zur Tatsache, daß solche Observablen mit unterschiedlichen, im allgemeinen sogar sich gegenseitig ausschließenden Versuchsanordnungen gemessen werden, und es entfällt die Notwendigkeit, solche Wahrscheinlichkeiten aus gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsverteilungen herleiten zu können. Das Problem von deren Nichtexistenz stellt sich dadurch gar nicht erst.

Der quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsbegriff erweist sich somit nicht als eine Abwandlung, sondern als eine *Verallgemeinerung* des klassischen¹⁰⁰. Mit einer Argumentation von Streater kann man das auch ganz direkt sehen [840], [841]. Quantenmechanische Observablen werden bekanntlich durch lineare selbstadjungierte Operatoren auf dem zum System

⁹⁸Siehe hierzu auch [836]. Vorschläge zur Einführung einer Quantenlogik auf Basis nichtprobabilistischer Argumentationen gab es bereits zuvor, beispielsweise bei Birkhoff und von Neumann [68] oder Reichenbach [731], [732], und auch später wieder, insbesondere bei Mittelstaedt [616], [617]. Deren Gemeinsamkeit lag unter anderem auch darin, im Gegensatz zur Variante von Suppes nicht zu funktionieren; kritisches zu Reichenbach in [638], [639] und allgemein in [836].

⁹⁹Wie Sneed selbst ausdrücklich erwähnt, tauchen bedingte Wahrscheinlichkeiten im Kontext der Quantenmechanik auch schon früher auf; er nennt Poppers Aufsatz [715] als Beispiel, kann jedoch mit Recht für sich in Anspruch nehmen, als erster deren Bedeutung im Zusammenhang mit dem Verhältnis von Quantenmechanik und klassischer Wahrscheinlichkeitstheorie erkannt zu haben.

¹⁰⁰Streater geht noch einen Schritt weiter und bezeichnet gleich die Quantenmechanik insgesamt als eine Verallgemeinerung der Wahrscheinlichkeitsrechnung. Das ist eine Konsequenz der von ihm vertretenen Auffassung, wonach quantenmechanische Wellenfunktionen ausschließlich Aussagen zum menschliche Wissen über physikalische Systeme machen. Diese verbreitete Ansicht findet man unter anderem auch bei Heisenberg und von Weizsäcker. Vergleiche die Abschnitte 3.9.3.2 und 3.9.3.3; kritisches dazu steht in Abschnitt 3.9.4.2 und in Kapitel 4.

gehörenden Hilbertraum repräsentiert, und die Elemente von deren Spektren sind die möglichen Meßwerte. Ist \hat{A} ein solcher Operator und φ ein normierter eigentlicher oder verallgemeinerter Eigenvektor zum eigentlichen oder verallgemeinerten Eigenwert λ , dann erhält man diesen über

$$(\varphi, \hat{A}\varphi) = (\varphi, \lambda\varphi) = \lambda(\varphi, \varphi) = \lambda. \quad (3.69)$$

Eine spezielle Unterklasse dieser Operatoren bilden die Diagonalmatrizen mit reellen Einträgen, wobei es sich im allgemeinen um unendliche oder sogar unendliche kontinuierliche Matrizen handelt. In jedem Fall sind deren Eigenwerte und damit die Elemente ihrer Spektren genau die jeweiligen Diagonalelemente, und je zwei solche Matrizen kommutieren stets. Sie lassen sich folglich vermöge (3.69) als eine spezielle Darstellung klassischer Zufallsgrößen betrachten, und beliebige selbstadjungierte Operatoren stellen entsprechend eine nichtklassische Verallgemeinerung derselben dar. Das ganze läßt sich natürlich mathematisch sehr viel subtiler ausarbeiten; für Details verweisen wir auf Spezialliteratur¹⁰¹.

Eine weitere Folge der Nichtkommutativität ist ebenfalls von wahrscheinlichkeitstheoretischer Bedeutung; auch wenn sie nicht mehr unmittelbar in die Anfangsphase der neueren Quantenmechanik gehört, soll sie hier kurz zur Sprache kommen, da sie die Unterschiedlichkeit klassischer und quantenmechanischer Wahrscheinlichkeiten zusätzlich untermauert. Es geht um die Zerlegung gemischter Zustände in reine Zustände, die in der klassischen Wahrscheinlichkeitstheorie stets eindeutig ist, während in der Quantenmechanik im allgemeinen mehrere Zerlegungen möglich sind. Man sagt auch, daß ein Zustandsraum in ersterer ein Simplex bildet, während ein solcher bei letzterer kein Simplex ist. Das bedeutet auch, daß für quantenmechanische gemischte Zustände nicht in jedem Fall eine Ignoranzinterpretation möglich ist, beispielsweise dann, wenn es sich um einen gemischten Zustand handelt, der eines der Teilsysteme eines größeren Systems repräsentiert, wenn diese Teilsysteme miteinander verschränkt sind. Das ist unter anderem in der Theorie der Dekohärenz von großer Wichtigkeit.

Die Konsequenzen des Superpositionsprinzips für quantenmechanische Wahrscheinlichkeiten sind noch schwerwiegender. Die Bedeutung, die ersteres für letztere erlangt, erklärt sich dadurch, daß mit den als Wahrscheinlichkeitsamplituden gedeuteten Wellenfunktionen in der Quantenmechanik den Wahrscheinlichkeitsdichten vorgeordnete Größen auftauchen, die es in dieser Form für klassische Wahrscheinlichkeiten nicht gibt; die Bornsche Regel oder genauer gesagt Gleasons Theorem sorgt dann dafür, daß sich das Superpositionsprinzip in klassisch ungekannter Weise probabilistisch bemerkbar macht. Um das zu sehen, betrachten wir beispielsweise ein Teilchen, das an einem Gitter mit N Spalten gestreut und dahinter auf einem Leuchtschirm nachgewiesen wird. Die gemessene Größe ist der Ort des Teilchens auf dem Schirm. Klassisch könnte man die Wahrscheinlichkeitsdichte $p_j(x)$ für den Auftreffpunkt des Teilchens auf dem Schirm ermitteln, indem man nur den j -ten Spalt offen läßt und alle anderen verschließt. Die Wahrscheinlichkeitsdichte für das Gitter ist dann gegeben durch

¹⁰¹Genauer findet man beispielsweise bei [571], [729] oder [841].

$$p(x) = \sum_{j=1}^N p_j(x), \quad (3.70)$$

das heißt, die Gesamtverteilung auf dem Schirm ergibt sich als Summe der Einzelverteilungen.

In der Quantenmechanik läuft die Sache bekanntlich etwas anders. Man startet mit einer gegebenen Anfangswellenfunktion $\Psi(x, t = 0)$, stellt die Schrödingergleichung für das Gesamtsystem Teilchen + Gitter auf und löst diese. Die Lösung $\Psi(x, t)$ ist als Superposition der Zustände $\psi_j(x, t)$ darstellbar, welche das System beschreiben, wenn jeweils nur der j -te Spalt offen und die anderen verschlossen sind; es gilt also

$$\Psi(x, t) = \sum_{j=1}^N \psi_j(x, t).$$

ψ_j ist dann die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsamplitude und $|\psi_j|^2$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte für das Teilchen auf dem Schirm, wenn nur der j -te Spalt offen ist. Die Bornsche Regel verlangt nun jedoch, zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsdichte bei N offenen Spalten, nicht die Wahrscheinlichkeitsdichten, sondern die Wahrscheinlichkeitsamplituden zu addieren. Man muß kurz gesagt nicht erst quadrieren und dann addieren, sondern erst addieren und dann quadrieren, und das hat Folgen. Denn während man im ersten Fall analog zu (3.70)

$$p_{kl}(x, t) = \sum_{j=1}^N |\psi_j(x, t)|^2 \quad (3.71)$$

findet, erhält man im zweiten

$$p_{qm}(x, t) = \left| \sum_{j=1}^N \psi_j(x, t) \right|^2 = \sum_{j=1}^N |\psi_j(x, t)|^2 + 2 \Re \left[\sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \psi_i^*(x, t) \psi_j(x, t) \right], \quad (3.72)$$

das heißt, es kommen bei der Wahrscheinlichkeitsdichte weitere Summanden hinzu. Diese beschreiben natürlich gerade die quantenmechanischen Interferenzerscheinungen, weswegen der in (3.71) fehlende, in (3.72) jedoch auftauchende Term *Interferenzterm* genannt wird¹⁰². Hier macht sich einer der beiden entscheidenden Unterschiede gegenüber der klassischen Physik bemerkbar, nämlich die *Existenz interferenzfähiger Superpositionen in der Quantenmechanik*¹⁰³.

Jordan war der erste, der diesen Sachverhalt „Interferenz der Wahrscheinlichkeiten“ nannte [478], eine Sprechweise, der sich Heisenberg nach anfänglichem Widerstand [402] und wohl

¹⁰²Dieser Aspekt taucht erstmals im Beitrag von Born und Heisenberg bei der fünften Solvay-Konferenz 1927 auf [114], von dem in Abschnitt 3.9.3.2 ausführlicher die Rede sein wird.

¹⁰³Der zweite ist die Existenz verschränkter Zustände.

unter Paulis Einfluß kurz danach gemeinsam mit Born auf der Solvay-Konferenz 1927 anschloß [114]. Diese Formulierung ist im günstigsten Fall unpräzise¹⁰⁴. Wahrscheinlichkeiten sind reelle Zahlen, die nicht interferieren können; insbesondere sind es aber nicht letztere selbst, sondern die Wahrscheinlichkeitsamplituden, die überlagert werden. Das läßt keinen anderen Schluß zu, als daß tatsächlich reale, klassisch sich widersprechende Zustände des Systems zur Interferenz gebracht werden und daher dieses *mit sich selbst interferiert*. Man kommt der Sache noch am nächsten, wenn man akzeptiert, daß ein System in einem quantenmechanischen Superpositionszustand zwei oder mehrere oder sogar unendlich viele klassisch sich widersprechende Eigenschaften gleichzeitig aufweist. Daß sich so etwas niemand anschaulich vorstellen kann, tut der Realität solcher Vorgänge keinen Abbruch; sich etwas vorzustellen bedeutet, sich klassische Bilder davon zu machen, und die Tatsache, daß die Vorstellung hier versagt, zeigt nur einmal mehr, daß die Quantenmechanik keine Rückkehr zur klassischen Physik erlaubt.

Offensichtlich verfolgten Born und Heisenberg bei ihrem Solvay-Konferenz-Aufsatz eine sowohl von Borns ursprünglicher als auch der heute üblichen Auffassung der Wahrscheinlichkeitsinterpretation abweichende Linie, bei der quantenmechanische Wellenfunktionen eher als statistische Verteilungsfunktionen stationärer Zustände denn als Zustandsfunktionen aufgefaßt werden. Dahinter steckt Heisenbergs an den Aristotelischen Potentialitäten orientierte Vorstellung quantenmechanischer Wahrscheinlichkeiten, wie wir sie in Abschnitt 3.9.3.2 betrachten werden¹⁰⁵.

Ein wichtiges Detail der Bornschen Wahrscheinlichkeitsdeutung trat gerade in jüngster Zeit wieder in das Bewußtsein der physikalischen Öffentlichkeit. Es handelt sich dabei um eine Konsequenz des Quadrats in der Bornschen Regel, wodurch in (3.72) stets nur Produkte aus zwei, aber keine solche aus drei oder mehr Faktoren auftreten. Für Beugungsexperimente an Interferometern mit mehr als zwei Wegen wie zum Beispiel Dreifach- und Vierfachspalte oder Gitter bedeutet das, daß das Interferenzmuster einfach eine Kombination der Verteilungen aller bei der Anordnung möglicher Einfach- und Doppelspaltmuster ist, die man erhält, wenn bei der Durchführung des Experiments alle Spalte bis auf einen beziehungsweise zwei verschlossen sind und das mit jeder möglichen Kombination durchgeführt wird. Bei einem N -fachspalt setzt sich das Interferenzmuster demnach aus N Einfachspalt- und $\binom{N}{2}$ Doppelspaltmustern zusammen. Wenn die Bornsche Regel exakt richtig ist, muß sich das in den beobachteten Interferenzmustern widerspiegeln; hätte das Gesetz irgendeine andere als die beschriebene rein quadratische Gestalt, so müßten zusätzliche Anteile mit drei- oder mehrfachen Produkten im Interferenzterm und damit Abweichungen in den Interferenzmustern auftauchen, die im Prinzip beobachtbar wären.

¹⁰⁴Sehr ärgerlich ist, daß auch hiervon, sei es wissentlich oder unwissentlich, aktuell in der Schulphysik unsachlich Gebrauch gemacht wird, wenn dort ebenfalls von interferierenden Wahrscheinlichkeiten oder – genauso irreführend – interferierenden Möglichkeiten die Rede ist. Das, was da interferiert, sind keineswegs nur Möglichkeiten, sondern sehr reale Sachverhalte, nämlich Zustände quantenmechanischer Systeme.

¹⁰⁵Ausführliche Diskussionen des Beitrags von Born und Heisenberg zum Kongreßband der fünften Solvay-Konferenz findet man in [26] und [28].

Auf dieser Grundlage konnten U. Sinha, C. Couteau, T. Jennewein, R. Laflamme und G. Weihs die Gültigkeit der Bornschen Regel experimentell überprüfen [813]. Sie verwendeten dazu einen Dreifachspalt mit einzeln verschließbaren Spalten und eine Quelle, die einzelne Photonen liefert. Damit wurden die Interferenzmuster bei drei offenen Spalten, bei allen drei Kombinationen zweier offener Spalten und bei den drei je alleine offenen Spalten sehr präzise vermessen. Sind ψ_1, ψ_2 und ψ_3 die Wellenfunktionen für ein Photon¹⁰⁶, wenn jeweils nur Spalt 1, Spalt 2 oder Spalt 3 offen und die anderen beiden abgedeckt sind, dann liefert die Bornsche Regel für die Wahrscheinlichkeitsdichte der Auftreffpunkte für die Photonen auf dem Schirm den Ausdruck

$$\begin{aligned} |\Psi|^2 &= |\psi_1 + \psi_2 + \psi_3|^2 = (\psi_1^* + \psi_2^* + \psi_3^*)(\psi_1 + \psi_2 + \psi_3) \\ &= |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + 2\Re(\psi_1^* \psi_2) + 2\Re(\psi_1^* \psi_3) + 2\Re(\psi_2^* \psi_3). \end{aligned}$$

Das ist eine Kombination aus allen möglichen Einfach- und Zweifachinterferenztermen. Wenn die Regel stimmt, muß folglich das Dreifachspalt-Interferenzmuster und die Überlagerung aller Einfach- und Zweifachspalt-Interferenzmuster identisch sein, was sich in dem oben erwähnten Experiment mit großer Genauigkeit bestätigen ließ.

Das alles zeigt, daß wir es in der Quantenmechanik mit einer grundsätzlich anderen Art von Wahrscheinlichkeiten zu tun haben als in der klassischen statistischen Mechanik. Scheinbar nur formal ist das an der Verwendung von Wahrscheinlichkeits*amplituden* anstelle von Wahrscheinlichkeits*dichten* erkennbar, was aber die gar nicht formale, sondern vielmehr unmittelbar physikalische Konsequenz der oben beschriebenen Interferenzfähigkeit quantenmechanischer Systeme nach sich zieht. Ganz direkt wird der Unterschied anhand der jeweiligen Ursache des probabilistischen Charakters deutlich. In der klassischen statistischen Mechanik ist man auf Wahrscheinlichkeitsaussagen beschränkt, weil man nicht genügend über die betrachteten Systeme weiß, beziehungsweise weil diese zu kompliziert sind, um eine exakte klassische Beschreibung durch Lösen der Bewegungsgleichungen für alle Teilchen, aus denen das System zusammengesetzt ist, zu erreichen. Dabei wird jedoch stillschweigend vorausgesetzt, daß eine solche exakte Beschreibung *theoretisch sehr wohl möglich wäre*, wenn man nur genug über das System wüßte und besser rechnen könnte. Der Wahrscheinlichkeitscharakter der Gesetze der statistischen Mechanik ist somit zurückführbar auf die Komplexität der beschriebenen Systeme und hat nichts mit der Natur selbst zu tun. Ganz anders sieht es in der Quantenmechanik aus. Hier ist die Beschränkung auf Wahrscheinlichkeitsaussagen eine prinzipielle

¹⁰⁶Das wirft zwar eigentlich ein Problem auf, da die Beschreibung von Photonen mit Hilfe von Wellenfunktionen vorsichtig formuliert zumindest problematisch ist. Der Grund liegt in der relativistischen Natur der Photonen, die es genaugenommen unmöglich macht, für sie Wellenfunktionen im Rahmen der elementaren nichtrelativistischen Quantenmechanik aufzustellen [530]. Es gibt jedoch im Rahmen der Quantenfeldtheorie mehr als vollwertigen Ersatz hierfür, folglich soll uns das hier nicht weiter stören. Für Leser, die sich damit nicht zufrieden geben wollen, beschreiben Kuhn und Strnad in [519], wie man eine Näherung finden kann, die für die Diskussion von Interferenzerscheinungen und damit für die Anforderungen dieses Kapitels völlig ausreicht. Geeignet gewählte Matrixelemente aus der Quantenelektrodynamik verhalten sich nämlich weitestgehend wie nichtrelativistische Wellenfunktionen; man kann damit sogar eine formale Schrödingergleichung für Photonen angeben [937]. Näheres dazu findet man auch in [62], [63], [721], [814] und [880] sowie speziell in Bezug auf die Behandlung von Doppelspaltexperimenten mit Photonen in Lehrbüchern in [601] und [849].

Beschränkung der Möglichkeiten der Naturbeschreibung. Man kann deshalb nur statistische Aussagen über das Verhalten physikalischer Systeme machen, *weil es nichts genaueres darüber zu sagen gibt*. Der Wahrscheinlichkeitscharakter der Gesetze der Quantenmechanik ist damit auf keinen anderen Sachverhalt zurückführbar, sondern vielmehr mit einer grundlegenden Eigenschaft der Natur selbst gleichzusetzen. Die Vorstellung, physikalische Systeme würden durch Größen beschrieben, die man grundsätzlich und theoretisch beliebig genau voraussagen könne, stimmt nicht. Lediglich im Rahmen der klassischen Physik kann das als mehr oder weniger gute Näherung beibehalten werden. Im Sinne dieser Näherung ist auch obige Aussage zu verstehen, die durch die klassische statistische Mechanik beschriebenen Systeme seien im Prinzip exakt berechenbar und nur zu kompliziert. In Wirklichkeit gelten auch für sämtliche makroskopischen Systeme die probabilistischen Gesetze der Quantenmechanik. Allerdings führen diese probabilistischen Gesetze normalerweise erst im Rahmen der Mikrophysik zu signifikant anderen Aussagen als die klassische Mechanik.

3.7.4 Wahrscheinlichkeitsdeutung und Vollständigkeit der Quantenmechanik

Die Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation erwies sich schnell als überaus alltagstauglich, einerseits, weil sie der praktischen Tätigkeit der Experimentalphysiker insbesondere im mikroskopischen Bereich entspricht, da diese wesentlich aus Meßreihen und deren statistischer Auswertung besteht, andererseits und insbesondere, weil sie experimentelle statistische Resultate ausnahmslos richtig voraussagte und auch weiterhin voraussagt. Sie entwickelte sich so zur Grundlage jeder praktischen physikalischen Arbeit im Zusammenhang mit der Quantenmechanik und wird seither von der großen Mehrheit der Physiker und Physikerinnen als eine Art kleinster gemeinsamer Nenner akzeptiert. Es handelt sich dabei jedoch um eine metaphysisch minimalistische Auffassung, die in ihrer reinen Form auf *jegliche anschauliche Vorstellung der verwendeten theoretischen Begriffe verzichtet*. In diesem Sinn erfüllt sie die Rolle einer *Minimalinterpretation*, wonach die Quantenmechanik eine statistische Theorie ist, die in der beschriebenen Art und Weise Wahrscheinlichkeitsaussagen liefert. Damit soll zum Ausdruck gebracht werden, daß eine im Hinblick auf die physikalische Bedeutung der Wellenfunktion auf die Wahrscheinlichkeitsdeutung reduzierte Quantenmechanik gerade ausreicht, um die Resultate von beliebig vorstellbaren Messungen an physikalischen Systemen, die stets in der Form von Meßreihen, also vielfachen Wiederholungen an identisch präparierten Exemplaren des betrachteten Systems durchzuführen sind, (im Prinzip) vorherzusagen zu können, aber kein Stück darüber hinaus geht. Der Name ist genaugenommen irreführend, da die Wahrscheinlichkeits*interpretation* entgegen weitverbreiteter Ansichten keineswegs einfach eine spezielle Interpretation der Wellenfunktion darstellt, sondern den mathematischen Apparat der Wellenmechanik *strukturell erweitert*. Sie ist somit ein Bestandteil der Theorie selbst und strikt von naturphilosophischen Deutungen derselben zu unterscheiden. Die statistische Interpretation lehnt solche weitergehende Auslegungen nicht etwa ab, sondern sie äußert sich in keiner Weise dazu, weil sie dafür nicht zuständig ist. Sie ist als Ausgangspunkt aufzufassen,

der zunächst Klarheit über die rechnerischen Resultate verschafft, danach jedoch womöglich weitergehende philosophischen Aussagen erforderlich macht.

Die ursprüngliche Haltung Borns zur Frage der naturphilosophischen Bedeutung seiner Wahrscheinlichkeitsregel war ein wenig ambivalent; er äußerte zwar die Vermutung, die Beschränkung der Quantenmechanik auf Wahrscheinlichkeitsaussagen sei unvermeidlich, begründete dies jedoch im wesentlichen damit, daß man über die betrachteten Mikrosysteme nicht genügend wisse und wohl prinzipiell auch nicht wissen könne, um darüberhinaus zu gelangen und eine deterministische Beschreibung zu erreichen. Das fügt sich voll und ganz in Borns bereits erwähnte Vorstellung von tatsächlich existierenden, aber experimentell unzugänglichen Bahnen der Quantenobjekte. Er räumt an derselben Stelle auch ein, daß es jedem freisteht, die Existenz weiterer innerer Eigenschaften¹⁰⁷ der Mikroobjekte anzunehmen, die deren Verhalten in völlig klassischer Weise determinieren, aber unbeobachtbar sind oder zumindest bis auf weiteres bleiben [105], [106]. Das ist die erste Erwähnung sogenannter *verborgener Variablen*, womit der schon länger, insbesondere und zuerst von Einstein geäußerten Vermutung, die Quantenmechanik sei eine unvollständige Theorie, die irgendwann durch eine doch wieder völlig deterministische, klassische Theorie abgelöst wäre, eine Gestalt gegeben wurde¹⁰⁸. Das beinhaltet auch die Forderung, daß sich nur Systeme an zeitartig getrennten Raumzeit-Punkten gegenseitig beeinflussen können dürfen, nicht aber an raumartig getrennten, mithin also keine Wechselwirkungen mit Überlichtgeschwindigkeit erlaubt sein sollen. Theorien mit in diesem Sinn lokalen verborgenen Parametern wurden verbreitet diskutiert, insbesondere natürlich bei Zeitgenossen, die den unanschaulichen und vermeintlich akasualen Charakter der Quantenmechanik nicht akzeptieren wollten und lieber zu einer klassischen Theorie zurückgekehrt wären.

Die Debatte darüber, ob so etwas überhaupt möglich sei und damit darüber, ob die Quantenmechanik eine vollständige Theorie sei oder nicht¹⁰⁹, brach so richtig los, als Einstein, Podolsky und Rosen 1935 ihren berühmten, seither nach ihren Initialen benannten EPR-Aufsatz veröffentlichten [253] und Bohr wenig später mit einem identisch betitelten Artikel antwortete [92]¹¹⁰. Das EPR-Argument weist dabei aus damaliger Sicht völlig zu Recht darauf hin, daß bei einer speziellen Klasse von Zuständen, die nach Schrödinger *verschränkte Zustände* („entangled States“) genannt wurden und unter dieser Bezeichnung Berühmtheit er-

¹⁰⁷Born spricht hier von „Phasen“.

¹⁰⁸Einstein versuchte 1927 vergeblich, eine solche Theorie verborgener Variablen zu entwickeln. Er verwarf sie selbst wieder und zog ein bereits fertiggestelltes Manuskript unmittelbar vor der Veröffentlichung zurück. Näheres dazu findet man bei [53] und [438].

¹⁰⁹Vollständig bedeutet hierbei vollständig in Bezug auf Beschreibung der betrachteten Freiheitsgrade, nicht in Bezug auf alle Freiheitsgrade, die es bei dem beschriebenen System gibt. Das wäre eine für eine physikalische Theorie vermessene und unerfüllbare Aufgabenstellung.

¹¹⁰„Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality be considered complete?“– Übrigens gibt es auch eine Antwort von Heisenberg; sie wurde allerdings nicht veröffentlicht, obwohl sie als druckfertiges Manuskript vorliegt [403]. In öffentlich zugänglicher Form erschien sie erst in Band 2 von Paulis gesammelten wissenschaftlichen Briefwechseln [604]. In gewisser Weise nimmt Heisenberg dabei Einzelheiten des unten erwähnten Bellschen Theorems ein wenig vorweg. Näheres dazu steht in [27]. Wir kommen in Abschnitt 3.9.3.2 kurz darauf zurück.

langen sollten¹¹¹, die zugewhörigen physikalischen Systeme offensichtlich über Eigenschaften verfügen sollten, die von der Quantenmechanik nicht vollständig beschreibbar zu sein scheinen, sofern man nicht doch bereit ist, instantan erfolgende Wechselwirkungen über beliebige Entfernungen anzunehmen¹¹². Entgegen verbreiteter Ansicht löste Bohrs Arbeit das Problem keineswegs; sie besteht aus knapp sechseinhalb Seiten kryptischer Argumentation, auf welchen ihr Autor einmal mehr und ausführlich seinen vielleicht meistzitierten Begriff erläutert, nämlich den der *Komplementarität*¹¹³, aber nahezu nichts konkretes zum Argument von Einstein, Podolsky und Rosen verlauten läßt. Der Aufsatz besteht weitgehend aus einer Darstellung und Rechtfertigung von Bohrs eigener spezieller Interpretation der Quantenmechanik¹¹⁴, ist aber in keiner Weise in der Lage, das EPR-Argument tatsächlich zu entkräften; in der Tat wird hierzu darin trotz in der Literatur verbreiteter Behauptung des Gegenteils nirgends wirklich konkret Stellung genommen. Bohr beschränkt sich darauf, die von Einstein, Podolski und Rosen vorgestellte, einem konsequenten erkenntnistheoretischen Realismus verpflichtete Definition der *Realität einer physikalischen Größe* wiederholt als „mehrdeutig“ zu bezeichnen, ohne das konkret zu erklären. Kurz gesagt und von seiner nebelhaften, unklaren Formulierung befreit, läuft Bohrs Gegenargument vermutlich darauf hinaus, die Realität einer Größe als vom Beobachter abhängig zu deklarieren, weil die Beobachtung mit ihrer Festlegung der experimentellen Voraus- und Zielsetzungen, der tatsächlichen Durchführung der Messung und der konkreten Feststellung von Meßresultaten erst die Bedingungen für das wirkliche Vorliegen und damit die Realität einer Größe schaffe. Beim EPR-Argument, so erklärt Bohr umständlich und auf viele undeutliche Erklärungen verteilt, würden unterschiedliche Situationen zusammengepackt, die nicht gleichzeitig Bestandteil ein- und derselben Beobachtungssituation sein und damit auch nicht gleichzeitig real sein könnten – womit das EPR-Argument jedoch nicht widerlegt, sondern ganz einfach jeglicher erkenntnistheoretischer Realismus aufgegeben wird. Keinesfalls jedoch wird damit irgendetwas über die Vollständigkeit oder Nichtvollständigkeit der Quantenmechanik ausgesagt¹¹⁵. Ein erster Schritt in diese Richtung und damit tatsächlich ein Schlag gegen diejenige Form des erkenntnistheoretischen Realismus, wie sie insbesondere Einstein vorschwebte, gelang erst in den 60er Jahren, als zuerst J. Bell [48], [49] und einige Jahre später F. Clauser, M. A. Horne, A. Shimony und R. A. Holt [159] jeweils spezielle Ungleichungen für Meßreihen an verschränkten Zuständen herleiteten, die von beliebigen Theorien mit lokalen verborgenen Parametern erfüllt, von der Quantenmechanik jedoch signifikant übertreten werden¹¹⁶. Das ist Inhalt des *Bellschen Theorems*, wonach generell keine Theorie lokaler verborgener Variablen sämtliche Voraussagen der Quantenmechanik repro-

¹¹¹Inzwischen liegt mit [21] ein einführendes Lehrbuch zu dieser Thematik vor. Als erste Lektüre sehr geeignet ist die Aufsatzsammlung [20].

¹¹²„Spukhafte Fernwirkungen“, wie Einstein sich ausdrückte.

¹¹³Siehe Abschnitt 3.9.3.1.

¹¹⁴Auch hierzu sei auf Abschnitt 3.9.3.1 verwiesen.

¹¹⁵Henning Genz formuliert es sehr treffend, wenn er sagt, Bohr habe seine Komplementarität nur dadurch gerettet, daß er auf die Argumente von Einstein, Podolsky und Rosen *nicht* einging [321].

¹¹⁶Man kann zeigen, daß die von Einstein, Podolsky und Rosen in ihrer EPR-Arbeit vorgestellten Zustände die Bellschen Ungleichungen maximal übertreten [378]. Es gibt inzwischen weitreichende Verallgemeinerungen dieser Ungleichungen; siehe beispielsweise [859].

duzieren kann¹¹⁷. Insbesondere macht das die Sache experimentell überprüfbar. Das wurde seit den frühen 80er Jahren und wird weiterhin an inzwischen zahllosen realen Experimenten durchgeführt, wobei die Resultate die Bellschen beziehungsweise CHSH-Ungleichungen¹¹⁸ und viele verwandte Relationen ausnahmslos verletzen und damit ganz klar für die Quantenmechanik sprechen¹¹⁹. Ein weitere Klasse von Entscheidungsexperimenten stammt von Greenberger, Horne und Zeilinger [356], [357], [358]. Dabei werden spezielle verschränkte Systeme in sogenannten GHZ-Zuständen¹²⁰ betrachtet¹²¹; es verdient besondere Erwähnung, denn während bei Versuchen, die zur Verletzung von Bell- oder CHSH-Ungleichungen führen, prinzipiell stets Meßreihen erforderlich sind, kommen GHZ-Experimente mit *einzelnen Messungen* aus¹²². Auch sie wurden bereits real durchgeführt [663], wobei natürlich ebenfalls eine Bestätigung der Quantenmechanik herauskam. Das bedeutet, daß nicht nur statistische, sondern auch deterministische Aussagen der Quantenmechanik nicht durch Theorien lokaler verborgener Variablen nachgebaut werden können.

Der Versuch eines Beweises, der auf formaler Ebene dasselbe leistet wie das Bellsche Theorem auf experimenteller, wurde von John von Neumann bereits 1932 im Rahmen seiner berühmten mathematischen Einführung in die Quantenmechanik veröffentlicht [655]. Es stellte sich zwar heraus, daß dieser Beweis nicht allgemein genug war und zudem an entscheidender Stelle einen Zirkelschluß enthielt¹²³, doch Gleason [335] und insbesondere Kochen und Specker [507] konnten das später reparieren. Letztere bewiesen einen Satz, der unter sehr allgemeinen Voraussetzungen die Existenz von Theorien lokaler verborgener Variablen ausschließt, welche genau dieselben Vorhersagen wie die Quantenmechanik liefern können¹²⁴.

¹¹⁷Theorien mit *nichtlokalen* verborgenen Parametern, wie beispielsweise die Pilotwellentheorie von Louis de Broglie [125] oder die daraus hervorgegangene Theorie des Quantenpotentials von David Bohm [81], [82] und deren Weiterentwicklungen [64], [214], [437] werden vom Bellschen Theorem nicht erfaßt. Vergleiche hierzu auch [83], [279], [907], [908] und [909]. Der Versuch, deterministische Teilchenbahnen auf diese Weise in die Mikrophysik hinüberzuretten, erfreut sich derzeit zunehmender Beliebtheit, funktioniert aber nicht, denn die Behauptung, solche Theorien seien völlig gleichwertig zur Standard-Quantenmechanik, da formal völlig äquivalent zu und empirisch nicht unterscheidbar von letzterer, *trifft nicht zu*. Sehr fundierte Kritik zur Bohmschen Mechanik und ähnlichem findet man bei [186], [262], [326], [327], [374], [647], [648] und [841].

¹¹⁸Nach den Initialen ihrer Entdecker.

¹¹⁹Einen nicht mehr ganz aktuellen, aber sehr ausführlichen Überblick liefert [59].

¹²⁰Die Verwendung von Abkürzungen dieser Art ist sehr verbreitet.

¹²¹Während das in der ursprünglichen EPR-Arbeit betrachtete System mit kontinuierlichen Variablen arbeitet, nämlich mit Ort und Impuls, verwenden spätere Betrachtungen überwiegend diskrete Variablen wie Spins und dergleichen. Das gilt im allgemeinen auch für GHZ-Zustände, es wurden inzwischen jedoch auch solche mit kontinuierlichen Variablen hergestellt, nämlich ebenfalls Ort und Impuls [586].

¹²²In [322] findet man eine sehr einfach gehaltene und dennoch wissenschaftlich exakte Darstellung hiervon; vergleiche auch [21]. Man kann im übrigen auch Ungleichungen vom Bell-Typ herleiten, die von GHZ-Zuständen übertreten werden [3].

¹²³Darauf hat zuerst Grete Hermann 1935 hingewiesen [416]. Ausführliche Darstellungen dazu findet man in [806] und [807]; die zweite dieser beiden Monographien ist eine ausführlichere, aber englischsprachige Version der ersten.

¹²⁴Eine sehr lesbare Einführung in diese Thematik und verwandte philosophische Fragestellungen der Quantenmechanik liefert [730].

3.8 Unschärferelationen

Den Abschluß der Anfangsphase der Quantenmechanik bildet die Entdeckung eines Naturgesetzes, das zwar nicht das wichtigste, wohl aber das populärste der neuen Theorie werden sollte und das auch nach wie vor ist. Allerdings wird die Heisenbergsche Unschärferelation oder Unbestimmtheitsrelation, wie sie auch sehr oft genannt wird, annähernd so häufig, wie sie bei populärwissenschaftlichen und unterrichtlichen Gelegenheiten diskutiert wird, falsch diskutiert. Das ist sicher neben ihrer historischen und damit hier in erster Linie interessierenden Bedeutung ein weiterer Grund, ihr einen Abschnitt zu widmen.

3.8.1 Unschärferelation für Ort und Impuls

Unschärferelationen lassen sich für ganz unterschiedliche Paare von meßbaren Größen finden; dabei läßt sich exakt angeben, unter welchen Voraussetzungen genau das möglich ist, wie wir noch sehen werden. Die weitaus prominenteste und meistzitierte Variante ist dabei diejenige für Ort und Impuls. Das läßt sich auf verallgemeinerte Orts- und Impulskoordinaten und generell auf beliebige konjugierte Größen erweitern, und auf dieser Basis wurden Unschärferelationen auch zuerst formuliert. Eine noch weitergehende Verallgemeinerung erfolgte wenig später, und diese hatte den Nebeneffekt, die tatsächliche physikalische Interpretation der Unschärferelationen erst offenzulegen. Deswegen ist es nicht wirklich verwunderlich und auch verzeihlich, daß die Pioniere der Quantenmechanik in ihren Deutungsversuchen hier zunächst ziemlich daneben lagen.

3.8.1.1 Heisenbergs ursprüngliche Version

Auch wenn alle Versuche, die auf den ersten Blick vorhandene Anschaulichkeit der Schrödingerschen Wellenmechanik physikalisch wasserdicht zu etablieren, schon frühzeitig scheiterten¹²⁵, sah sich Heisenberg dennoch angespornt, seine zunächst prinzipiell unanschaulich entworfene Matrizenmechanik ebenfalls mit einer anschaulichen Deutung zu versehen. Er blieb dabei allerdings der positivistischen Grundhaltung der Anfangsphase treu und bestand weiterhin darauf, daß es nur Sinn habe, von solchen Dingen wie dem Ort oder der Geschwindigkeit etwa eines Elektrons zu sprechen, wenn man gleichzeitig Experimente angebe, mit denen man diese Größen messen kann.

Auf dieser philosophischen Basis postuliert Heisenberg in einer berühmt gewordenen Arbeit von 1927 folgendes [402]¹²⁶: *Bei der simultanen Bestimmung zweier kanonisch konjugierter quantenmechanischer Größen p und q tragen beliebige hierfür geeignete Experimente stets*

¹²⁵Vergleiche Abschnitt 3.4.4.

¹²⁶In dieser Arbeit taucht übrigens auch erstmals die vage Idee der modernen Fassung des Welle-Teilchen-Dualismus auf, im Sinne des Dualismus zwischen Welcher-Weg-Information und Interferenzfähigkeit, veranschaulicht anhand der Streuung eines Elektronenstroms an einem Gitter. Die Idee wird hier jedoch nicht näher ausgearbeitet.

eine Unbestimmtheit in sich; die hierbei auftretenden Ungenauigkeiten p_1 und q_1 dieser beiden Größen erfüllen die Relation

$$p_1 q_1 \approx h. \quad (3.73)$$

Das ist der allererste Auftritt der *Heisenbergschen Unschärferelation*¹²⁷. Das ganze klingt selbst noch etwas unscharf, und es ist nicht auf Anhieb klar, was diese Aussage sowie die in ihr auftretenden Größen p_1 und q_1 exakt bedeuten sollen. Sorgfältige Lektüre der Arbeit [402] führt zum Schluß, daß Heisenberg damit eine merkwürdig subjektivistische Interpretation verbindet. Danach ist die Unschärferelation auf einzelne Quantenobjekte anzuwenden und bezieht sich auf die gegenwärtige Kenntnis des Experimentators über das System, an welchem die betrachteten Experimente durchgeführt werden. Insbesondere sagen so verstandene Unschärferelationen nichts über tatsächliche Eigenschaften des betrachteten Systems aus. Die Ursache der erwähnten Unbestimmtheiten ist darin zu suchen, daß das System durch die Messungen gestört wird, und zwar in einem unmittelbaren, physikalischen Sinn. Genauer gesagt ist die Störung der durch q beschriebenen Eigenschaft und damit die Unbestimmtheit der q -Werte durch die Messung der Größe p umso größer, je genauer diese Messung erfolgt und je kleiner damit die Unbestimmtheit der Werte von p ist, und umgekehrt.

Bevor wir uns mit dieser Auffassung der Unschärferelation kritisch auseinandersetzen, müssen wir zuerst einmal sehen, wie man überhaupt darauf kommt. Eine wirkliche Herleitung wird von Heisenberg noch nicht geliefert, stattdessen präsentiert er einige Argumente, mit denen er die Sache plausibel zu machen gedenkt. Beispielsweise betrachtet er ein Gaußsches Wellenpaket der Halbwertsbreite q und einer Wellenfunktion der Form

$$\psi(q) \propto \exp\left[-\frac{(q - q')^2}{2 q_1^2} - \frac{2\pi i}{h} p' (q - q')\right].$$

Transformiert man dies in die p -Darstellung, erhält man

$$\hat{\psi}(p) \propto \int_{-\infty}^{\infty} \psi(q) e^{2\pi i p q / h} dq,$$

also mit Hilfe quadratischer Ergänzung

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(p) &\propto e^{2\pi i p' q' / h} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{(q - q')^2}{2 q_1^2} - \frac{2\pi i q (p - p')}{h}\right] dq \\ &\propto \exp\left[-\frac{2\pi i q' p}{h} - \frac{2\pi^2 q_1^2 (p - p')^2}{h^2}\right] \times \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{(q - q')^2}{2 q_1^2} - \frac{2\pi i (q - q') (p - p')}{h} + \frac{2\pi^2 q_1^2 (p - p')^2}{h^2}\right] dq \end{aligned}$$

¹²⁷Eine gewisse Vorahnung dieses Sachverhalts, allerdings ohne präzisere Ausarbeitung, findet sich bereits 1923 bei Bohr [88].

$$\begin{aligned} &\propto \exp\left[-\frac{2\pi^2 q_1^2 (p-p')^2}{h^2} - \frac{2\pi i q' (p-p')}{h}\right] \times \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\left[\frac{(q-q')}{\sqrt{2} q_1} + \frac{\sqrt{2} q_1 (p-p')}{h}\right]^2\right\} dq \\ &\propto \exp\left[-\frac{2\pi^2 q_1^2 (p-p')^2}{h^2} - \frac{2\pi i q' (p-p')}{h}\right], \end{aligned}$$

und da andererseits die Wellenfunktion auch in der p -Darstellung ein Gaußsches Wellenpaket der Form

$$\hat{\psi}(p) \propto \exp\left[-\frac{(p-p')^2}{2\rho_1^2} - \frac{2\pi i}{h} q' (p-p')\right]$$

sein muß, liest man für die Halbwertsbreiten ρ_1 und q_1 unmittelbar die Relation

$$\rho_1 q_1 = \frac{h}{2\pi}$$

ab. Das ist zumindest größenordnungsmäßig das selbe wie (3.73).

Heisenberg ergänzt dieses formale Argument durch eine Reihe anschaulicher Beispiele zur Rechtfertigung der Relation (3.73), die im Gegensatz zu ersterem sehr gut verdeutlichen, welcher physikalischen Vorstellungen er sich dabei bedient. In seinen University of Chicago-Vorträgen sind sie alle beschrieben [406]; zwei davon seien hier wiedergegeben, auch weil sie sehr oft in der Schul- und Hochschulbuchliteratur auftauchen.

So betrachtet Heisenberg beispielsweise ein Mikroskop, mit dem der Ort eines vorbeifliegenden Elektrons gemessen werden soll¹²⁸. Ist λ die Wellenlänge des verwendeten Lichts und ε der Öffnungswinkel, unter dem das Objektiv des Mikroskops vom Elektron aus erscheint, dann liefert das Auflösungsvermögen des Mikroskops für die Genauigkeit der Ortsmessung in x -Richtung den Wert

$$\delta x \approx \frac{\lambda}{\sin \varepsilon}.$$

Soll das Elektron beobachtet werden, muß mindestens ein Photon daran gestreut werden und in das Mikroskop gelangen; dadurch erhält das Elektron einen Compton-Rückstoß in Form eines Impulsübertrags der Größe

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}.$$

Die Rückstoßrichtung ist jedoch nicht genau bekannt, man weiß lediglich, daß das Photon das Objektiv des Mikroskops trifft. Daher besteht eine Unsicherheit des Rückstoßes in x -Richtung vom Betrag

$$\delta p_x = \frac{h}{\lambda} \sin \varepsilon.$$

¹²⁸Dieses Gedankenexperiment ist unter der Bezeichnung „Heisenberg-Mikroskop“ bekannt geworden.

Für das Produkt der Unbestimmtheiten gilt somit

$$\delta p_x \delta x \approx h,$$

und man landet wieder bei (3.73). Heisenberg wehrt anschließend gleich noch etwaige Versuche ab, die Beugungsbegrenzung des Mikroskops auszutricksen, indem man das Maximum des vom Mikroskop erzeugten Beugungsbildes ausmißt. Um tatsächlich ein Beugungsmuster zu erhalten, muß man viele gestreute Photonen betrachten. Heisenberg schätzt nun die Genauigkeit, mit der das Maximum eines Beugungsbildes der Breite δx aus m Lichtquanten festgelegt werden kann, durch den Ausdruck

$$\delta x' = \frac{\delta x}{\sqrt{m}}$$

ab. Jedes der m Lichtquanten liefert zur Impulsungenauigkeit einen Beitrag

$$\delta p_x = \frac{h}{\lambda} \sin \varepsilon,$$

sodaß man für die Gesamtungenauigkeit des Querimpulses

$$\delta p_x' = \sqrt{\sum (\delta p_x)^2} = \sqrt{m (\delta p_x)^2} = \sqrt{m} \delta p_x$$

findet und wieder ein Unschärfeprodukt der Gestalt

$$\delta p_x' \delta x' = h$$

erhält.

Ein weiteres Argument von Heisenberg taucht 1935 auch bei Bohr in dessen EPR-Entgegnung [92] auf; es ist seit 1927 die wohl verbreitetste vermeintliche Herleitung der Unschärferelation, insbesondere auch im physikdidaktischen Bereich. Man betrachtet dazu einen kohärenten Strahl von Elektronen oder Photonen mit Wellenlänge beziehungsweise De Broglie-Wellenlänge λ , der auf einen geeignet dimensionierten Einfachspalt der Breite d trifft. Die Unschärfe der Orte der Teilchen – was immer das genau sein soll – werde durch $\delta x \approx d$ abgeschätzt. Offensichtlich läßt sich diese Ortsunschärfe durch Verengung des Spaltes beliebig verkleinern. Das bleibt jedoch nicht ohne Folgen, denn am Einzelspalt findet Beugung statt, und zwar um so stärker, je enger der Spalt ist. Das wird mit dem Auftreten von Querimpulsen p_x erklärt, deren Unschärfe δp_x nach Heisenberg durch die Lage der ersten Minima des Beugungsmusters abgeschätzt werden sollen. Nehmen wir an, der Ablenkungswinkel der ersten Minima sei α , dann folgt daraus

$$\delta p_x \approx p \sin \alpha$$

und wegen $p = h/\lambda$ weiter

$$\delta p_x \approx \frac{h}{\lambda} \sin \alpha.$$

Für den Ablenkungswinkel der ersten Minima gilt beim Einzelspalt jedoch bekanntlich

$$\sin \alpha = \frac{\lambda}{\delta x},$$

und Einsetzen liefert

$$\delta p_x \approx \frac{h}{\delta x}$$

oder

$$\delta p_x \delta x \approx h,$$

also wieder die Relation (3.73).

Die wesentlichen Gemeinsamkeiten dieser und ähnlicher Beispiele für das Auftreten eines Unschärfeproduktes der Form (3.73) liegen in der Annahme, daß die Unbestimmtheiten jeweils durch Störungen der betrachteten Systeme bei der Messung in Gestalt physikalischer Prozesse wie etwa Impulsüberträge vom Meßgerät auf das Meßobjekt verursacht werden, sowie in der Auffassung, daß diese Unbestimmtheiten ein Maß für unser begrenztes Wissen über die Systeme darstellen. Sie sind daher für Heisenberg insbesondere keine Eigenschaften der Systeme selbst.

Es sollte erwähnt werden, daß Niels Bohr das von Anfang an ganz anders sah, was häufig Anlaß für heftige Auseinandersetzungen zwischen den beiden war. Für Bohr stellen Unschärferelationen zwar auch Aussagen über einzelne Quantensysteme dar, er versteht sie jedoch nicht im Sinne einer Begrenzung unser Wissens, sondern als objektiv geltende Naturgesetze und damit sehr wohl als Eigenschaften der betrachteten Systeme selbst. Diese Deutung wird zu einem wesentlichen Bestandteil seiner frühen Interpretation der neueren Quantenmechanik; wir kommen in Abschnitt 3.9.3.1 ausführlich darauf zurück.

3.8.1.2 Erste Herleitungen

Auf die Frage nach der ersten formal strengen Herleitung der Unschärferelation aus den Prinzipien der Quantenmechanik wird im allgemeinen auf eine Arbeit von E. H. Kennard ebenfalls aus dem Jahr 1927 verwiesen [492]¹²⁹. Das ist nicht ganz korrekt, was jedoch erst viel später von John Marburger bemerkt wurde [582].

In jedem Fall ist Kennard der erste, der eine präzise und, wie erst etwas später deutlich werden wird, korrekte Definition der bis dahin auch begrifflich unscharfen Unschärfen von Ort und Impuls angibt, indem er dafür

$$(\Delta q)^2 = 2 \int (q - \langle q \rangle)^2 \psi(q) \psi^*(q) dq,$$

¹²⁹Heisenberg selbst erwähnt sie in seinen Chicagoer Vorträgen von 1929 [406]. In seiner Arbeit liefert Kennard abgesehen von der erwähnten Betrachtung der Unschärferelation eine Beschreibung des Formalismus der neuen Quantenmechanik, in welcher der Zusammenhang zwischen Matrixtheorie und Wellenmechanik verdeutlicht wird, sowie Anwendungen der Quantenmechanik auf einige einfache physikalische Systeme. Nebenbei nimmt er bei der Diskussion des harmonischen Oszillators die Entdeckung der *Squeezed States* vorweg, wie M. M. Nieto 1998 bemerkte [657]. Die Entdeckung dieser vor allen Dingen in der Quantenoptik wichtigen Zustände erfolgte mehrfach unabhängig voneinander; frühe Arbeiten hierzu sind unter anderem [152] und [903]. Näheres über Squeezed States findet der Leser beispielsweise in [412] oder [904].

$$(\Delta p)^2 = 2 \int (p - \langle p \rangle)^2 \hat{\psi}(p) \hat{\psi}^*(p) dp$$

schreibt¹³⁰; dabei sind

$$\langle q \rangle = \int q \psi(q) \psi^*(q) dq$$

und

$$\langle p \rangle = \int p \hat{\psi}(p) \hat{\psi}^*(p) dp$$

die Erwartungswerte von q und p im durch die Wellenfunktion $\psi(q)$ beziehungsweise ihrer Impulsdarstellung $\hat{\psi}(p)$ beschriebenen Zustand des betrachteten Systems. Kennard interpretiert somit die Quadrate quantenmechanischer Unschärfen von Meßgrößen bis auf einen Faktor 2 als Mittelwerte der Quadrate der Abweichungen der Größen von ihren Mittelwerten, das heißt als *Varianz* dieser Größen, und die Unschärfen selbst folglich bis auf einen Faktor $\sqrt{2}$ als deren *Standardabweichung*. Die Tatsache, daß es sich bei Varianzen und Standardabweichungen um *statistische Begriffe* handelt, wird uns im nächsten Abschnitt noch beschäftigen¹³¹.

Zur Herleitung der Unschärferelation verwendet Kennard nun neben der Wellenfunktion $\psi(q)$ ebenfalls deren Fouriertransformierte

$$\hat{\psi}(p) = \frac{1}{h} \int \psi(q) e^{2\pi i p q / h} dq,$$

wobei er der Einfachheit wegen alles eindimensional schreibt. Damit leitet er analog zur oben beschriebenen Rechnung Heisenbergs zunächst für ein Gaußsches Wellenpaket der Form

$$\psi(q) = C_0 \exp \left\{ -\frac{(q - \langle q \rangle)^2}{2(\Delta q)^2} + i \left[b^2 (q - \langle q \rangle)^2 + \frac{2\pi}{h} \langle p \rangle (q - \langle q \rangle) \right] \right\}$$

¹³⁰Kennard spricht hierbei von „Präzisionsmaßen“ oder „Unbestimmtheitsmaßen“.

¹³¹Die Varianz $\text{Var}(X)$ einer Zufallsvariable X mit Erwartungswert $E(X) = \mu$ ist definiert durch

$$\text{Var}(X) = E((X - \mu)^2);$$

die Standardabweichung $\sigma(X)$ ist die positive Quadratwurzel der Varianz,

$$\sigma(X) = \sqrt{\text{Var}(X)} = \sqrt{E((X - \mu)^2)}.$$

Ist die dabei betrachtete Wahrscheinlichkeitsverteilung f stetig, dann kann die Varianz gemäß

$$\text{Var}(X) = \int_{-\infty}^{\infty} (X - \mu)^2 f(x) dx$$

berechnet werden, mit

$$\mu = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx.$$

das Unschärfeprodukt

$$(\Delta p)^2 (\Delta q)^2 = \frac{h^2}{4\pi^2} + \frac{h^2}{\pi^2} b^2 \Delta q^2$$

her, das offensichtlich für $b = 0$ das bereits von Heisenberg gefundene Minimum annimmt. Als nächstes betrachtet Kennard die Unschärfen Δp und Δq für beliebige Wellenfunktionen $\psi(q)$ etwas genauer und findet mit Hilfe von

$$\begin{aligned} (\Delta p)^2 &= 2 \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = 2 \langle p^2 - 2p \langle p \rangle - \langle p \rangle^2 \rangle = 2(\langle p^2 \rangle - 2\langle p \rangle \langle p \rangle + \langle p \rangle^2) \\ &= 2(\langle p^2 \rangle - 2\langle p \rangle^2 + \langle p \rangle^2) = 2(\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2) \end{aligned}$$

sowie der Ortsdarstellung des Impulsoperators durch partielle Integration die Relationen¹³²

$$\begin{aligned} (\Delta p)^2 + 2 \langle p \rangle^2 &= \langle p^2 \rangle = \int \psi^*(q) p^2 \psi(q) dq \\ &= \int \psi(q) \left(-\frac{ih}{2\pi} \frac{\partial}{\partial q} \right)^2 \psi^*(q) dq \\ &= \frac{h^2}{2\pi^2} \int \psi'(q) \psi^{*'}(q) dq \end{aligned} \quad (3.74)$$

und

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int \psi^*(q) p \psi(q) dq \\ &= \int \psi(q) \left(-\frac{ih}{2\pi} \frac{\partial}{\partial q} \right) \psi^*(q) dq \\ &= -\frac{ih}{2\pi} \int \psi^{*'}(q) \psi(q) dq = \frac{ih}{2\pi} \int \psi^*(q) \psi'(q) dq, \end{aligned}$$

also

$$2 \langle p \rangle = \frac{ih}{2\pi} \int [\psi^*(q) \psi'(q) - \psi^{*'}(q) \psi(q)] dq. \quad (3.75)$$

Nun sei $\psi(q)$ eine beliebige normierte Wellenfunktion; Kennard schreibt dafür

$$\psi(q) = f(q) \psi_0(q)$$

mit

$$\psi_0(q) = C \exp \left[-\frac{(q - \langle q \rangle)^2}{2(\Delta q)^2} - \frac{2\pi i}{h} \langle p \rangle q \right].$$

Daraus folgt

$$\psi'(q) = f'(q) \psi_0(q) - \left[\frac{q - \langle q \rangle}{(\Delta q)^2} + \frac{2\pi i}{h} \langle p \rangle \right] \psi(q),$$

¹³²Kennard rechnet hier im Originaltext in der Impulsdarstellung, in der Ortsdarstellung geht es jedoch schneller [582].

$$\psi^{*'}(q) = f^{*'}(q) \psi_0^*(q) - \left[\frac{q - \langle q \rangle}{(\Delta q)^2} - \frac{2\pi i}{h} \langle p \rangle \right] \psi^*(q),$$

also weiter

$$\begin{aligned} \psi'(q) \psi^{*'}(q) &= f'(q) f^{*'}(q) \psi_0(q) \psi_0^*(q) \\ &\quad - \left[\frac{q - \langle q \rangle}{(\Delta q)^2} + \frac{2\pi i}{h} \langle p \rangle \right] f(q) \psi_0(q) f^{*'}(q) \psi_0^*(q) \\ &\quad - \left[\frac{q - \langle q \rangle}{(\Delta q)^2} - \frac{2\pi i}{h} \langle p \rangle \right] f^{*'}(q) \psi_0^*(q) f'(q) \psi_0(q) \\ &\quad + \left[\frac{(q - \langle q \rangle)^2}{(\Delta q)^4} + \frac{4\pi^2}{h^2} \langle p \rangle^2 \right] \psi(q) \psi^*(q) \\ &= f'(q) f^{*'}(q) \psi_0(q) \psi_0^*(q) - \frac{q - \langle q \rangle}{(\Delta q)^2} \frac{d}{dq} [f(q) f^*(q)] \psi_0(q) \psi_0^*(q) \\ &\quad - \frac{2\pi i}{h} \langle p \rangle [f(q) f^{*'}(q) - f^*(q) f'(q)] \psi_0(q) \psi_0^*(q) \\ &\quad + \left[\frac{(q - \langle q \rangle)^2}{(\Delta q)^4} + \frac{4\pi^2}{h^2} \langle p \rangle^2 \right] \psi(q) \psi^*(q) \end{aligned}$$

und damit aus (3.74) aufgrund der Normierung, wieder mit partieller Integration,

$$\begin{aligned} (\Delta p)^2 + 2 \langle p \rangle^2 &= \frac{h^2}{2\pi^2} \left[\int f'(q) f^{*'}(q) \psi_0(q) \psi_0^*(q) dq \right. \\ &\quad - \int \frac{q - \langle q \rangle}{(\Delta q)^2} \frac{d}{dq} [f(q) f^*(q)] \psi_0(q) \psi_0^*(q) dq \\ &\quad - \frac{2\pi i}{h} \langle p \rangle \int [f(q) f^{*'}(q) - f^*(q) f'(q)] \psi_0(q) \psi_0^*(q) dq \\ &\quad \left. + \frac{1}{(\Delta q)^2} \int (q - \langle q \rangle)^2 \psi(q) \psi^*(q) dq + \frac{4\pi^2}{h^2} \langle p \rangle^2 \right] \\ &= \frac{h^2}{2\pi^2} \left[\frac{1}{2(\Delta q)^2} + \frac{4\pi^2}{h^2} \langle p \rangle^2 + \int f'(q) f^{*'}(q) \psi_0(q) \psi_0^*(q) dq \right. \\ &\quad \left. - \frac{2\pi i}{h} \langle p \rangle \int [f(q) f^{*'}(q) - f^*(q) f'(q)] \psi_0(q) \psi_0^*(q) dq \right]. \end{aligned}$$

Außerdem ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \psi^*(q) \psi'(q) - \psi^{*'}(q) \psi(q) &= [f^*(q) f(q) - f^{*'}(q) f'(q)] \psi_0(q) \psi_0^*(q) \\
 &\quad - \left[\frac{q - \langle q \rangle}{(\Delta q)^2} + \frac{2\pi i}{h} \langle p \rangle \right] \psi(q) \psi^*(q) \\
 &\quad + \left[\frac{q - \langle q \rangle}{(\Delta q)^2} - \frac{2\pi i}{h} \langle p \rangle \right] \psi^*(q) \psi(q) \\
 &= [f^*(q) f(q) - f^{*'}(q) f'(q)] \psi_0(q) \psi_0^*(q) \\
 &\quad - \frac{4\pi i}{h} \langle p \rangle \psi(q) \psi^*(q)
 \end{aligned}$$

und folglich mit (3.75)

$$\begin{aligned}
 2 \langle p \rangle &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int \left\{ [f^*(q) f(q) - f^{*'}(q) f'(q)] \psi_0(q) \psi_0^*(q) - \frac{4\pi i}{h} \langle p \rangle \psi(q) \psi^*(q) \right\} dq \\
 &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int \{ [f^*(q) f(q) - f^{*'}(q) f'(q)] \psi_0(q) \psi_0^*(q) \} dq + 2 \langle p \rangle,
 \end{aligned}$$

woraus

$$\int \{ [f^*(q) f(q) - f^{*'}(q) f'(q)] \psi_0(q) \psi_0^*(q) \} dq = 0$$

folgt. Insgesamt findet man damit

$$(\Delta p)^2 + 2 \langle p \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{2\pi^2} \left[\frac{1}{2(\Delta q)^2} + \int f'(q) f^{*'}(q) \psi_0(q) \psi_0^*(q) dq \right] + 2 \langle p \rangle^2$$

oder

$$(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{2\pi^2} \left[\frac{1}{2(\Delta q)^2} + \int f'(q) f^{*'}(q) \psi_0(q) \psi_0^*(q) dq \right],$$

und wegen

$$\int f'(q) f^{*'}(q) \psi_0(q) \psi_0^*(q) dq = \int |f'(q)|^2 |\psi_0(q)|^2 dq \geq 0$$

erhält man schließlich

$$\Delta p \Delta q \geq \frac{\hbar}{2\pi}. \quad (3.76)$$

Marburger konnte 2008 zeigen, daß Kennards Herleitung nicht die von ihrem Urheber erhoffte Allgemeinheit beanspruchen kann [582]. Entweder man beharrt auf deren Gültigkeit für beliebige Wellenfunktionen und deren Darstellbarkeit in der Form $\psi(q) = f(q) \psi_0(q)$, dann läßt sich das Minimum des Unschärfeprodukts in (3.76) durch geschickte Wahl von ψ_0 unterbieten, oder man beharrt auf genau diesem Minimum, dann funktioniert die Herleitung jedoch nur noch für eine sehr spezielle Klasse von Wellenfunktionen und verliert damit ihre

Allgemeinheit. Für Kennard bleibt jedoch der Verdienst, als erster die allein richtige Definition des Begriffs der quantenmechanischen Unschärfen angegeben zu haben.

Ein Jahr später veröffentlichte Hermann Weyl ein Buch mit dem Titel „Gruppentheorie und Quantenmechanik“, in welchem er ebenfalls eine Herleitung der Unschärferelation vorstellt, wobei er eine unveröffentlichte Bemerkung von Pauli zitiert [923]¹³³. Sie ist vollständig korrekt, sodaß tatsächlich Weyl und Pauli die Ehre zukommt, als erste eine solche Herleitung in mathematisch sauberer Form gefunden zu haben – was jedoch erst durch Marburgers Arbeit deutlich wurde.

Weyl startet mit der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung und findet so zunächst die Relation

$$\left| \int_{-\infty}^{\infty} (q - \langle q \rangle) |\psi(q)| \frac{d}{dq} |\psi(q)| dq \right|^2 \leq \int_{-\infty}^{\infty} (q - \langle q \rangle)^2 |\psi(q)|^2 dq \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{d}{dq} |\psi(q)| \right|^2 dq.$$

Das Integral links läßt sich mit Hilfe der Kettenregel und partieller Integration umformen zu

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} (q - \langle q \rangle) |\psi(q)| \frac{d}{dq} |\psi(q)| dq &= \int_{-\infty}^{\infty} (q - \langle q \rangle) \frac{d}{dq} \frac{|\psi(q)|^2}{2} dq \\ &= \left[(q - \langle q \rangle) \frac{|\psi(q)|^2}{2} \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\psi(q)|^2}{2} dq = -\frac{1}{2}, \end{aligned}$$

denn der ausintegrierte Teil verschwindet aufgrund der Quadratintegrabilität der Wellenfunktion $\psi(q)$. Zusätzlich gilt für diese und deren Impulsdarstellung $\hat{\psi}(p)$

$$\frac{d\psi(q)}{dq} = i \int_{-\infty}^{\infty} e^{2\pi i p q / h} p \hat{\psi}(p) dp,$$

und da $\hat{\psi}(p)$ gleichzeitig die Fouriertransformierte von $\psi(q)$ ist, liefert das Parsevalsche Theorem dafür

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{d}{dq} |\psi(q)| \right|^2 dq = \frac{2\pi}{h} \int_{-\infty}^{\infty} (p - \langle p \rangle)^2 |\hat{\psi}(p)|^2 dp.$$

Einsetzen in obige Ungleichung ergibt nun

$$\int_{-\infty}^{\infty} (q - \langle q \rangle)^2 |\psi(q)|^2 dq \frac{2\pi}{h} \int_{-\infty}^{\infty} (p - \langle p \rangle)^2 |\hat{\psi}(p)|^2 dp \geq \frac{1}{2},$$

¹³³Vergleiche auch [301].

und mit den um den Faktor 2 korrigierten Unschärfe-Quadraten¹³⁴

$$(\Delta q)^2 = \int (q - \langle q \rangle)^2 |\psi(q)|^2 dq, \quad (3.77)$$

$$(\Delta p)^2 = \int (p - \langle p \rangle)^2 |\hat{\psi}(p)|^2 dp \quad (3.78)$$

erhält man

$$\Delta p \Delta q \geq \frac{h}{4\pi}. \quad (3.79)$$

Die in diesem Abschnitt verwendeten Definitionen der Unschärfen einer Meßgröße deuten bereits an, daß an der Interpretation dieser Größen, wie sie Heisenberg in [402], [406] und anderen Publikationen aus dieser Ära vertritt, etwas nicht stimmen kann. Das bestätigt sich bei der Betrachtung der mathematisch strengen Herleitung der Unschärferelation auf Basis des Hilbertraum-Formalismus der Quantenmechanik, wie er sich kurze Zeit später durchsetzte¹³⁵.

3.8.2 Die exakte Form der Unschärferelationen

3.8.2.1 Unschärferelationen korrekt interpretiert

Die erwähnte korrekte Definition des Begriffs einer quantenmechanischen Unschärfe läßt keinen Spielraum bei der physikalischen Deutung von Unschärferelationen. Daß es sich hierbei in der Tat um die allein zulässige Deutung sowohl von Unschärfen als auch von Unschärferelationen handelt, wird sofort klar, wenn man die Sache in der funktionalanalytischen Version der Quantenmechanik formuliert. Die Unschärfe der durch den Operator \hat{A} repräsentierten Observable A am Zustand ψ eines physikalischen Systems ist definitionsgemäß die Größe

$$\Delta A = \|\hat{A}\psi - (\psi, \hat{A}\psi)\psi\|. \quad (3.80)$$

Diese Definition läßt sich ganz einfach dadurch rechtfertigen, daß genau für Größen der Gestalt (3.80) auf Basis der Vertauschungsrelation der beteiligten Operatoren Unschärferelationen streng mathematisch bewiesen werden können. Insbesondere sind Unschärferelationen damit *Theoreme der mathematischen Physik* und keine Postulate. Wir kommen im nächsten Abschnitt darauf zurück.

¹³⁴Der erste, der explizit auf den numerischen Zusammenhang zwischen den Heisenbergschen Größen δp und δq und den exakt definierten Unschärfen Δp und Δq aufmerksam machte, war R. W. Ditchburn in einer Arbeit von 1930 [207].

¹³⁵Da bei der Weyl-Paulischen Herleitung von Fouriertransformationen und damit zusammenhängenden Begriffen Gebrauch gemacht wird, kann man vermuten, daß es formale Beziehungen zwischen quantenmechanischen Unschärferelationen und Sachverhalten aus der Signalverarbeitung gibt. Das ist in der Tat der Fall; man kann hier in völlig analoger Weise eine Ungleichung für die Unschärfen der Zeitdauer und der Frequenz eines Signals herleiten. Die Interpretation ist aber natürlich eine völlig andere als in der Quantenmechanik; siehe beispielsweise [599]. Es lassen sich im übrigen auch verwandte Ungleichungen für beliebig höhere Momente beweisen [724], [725].

Was das aus physikalischer Sicht bedeutet, erkennt man am besten, wenn man (3.80) in der Ortsdarstellung schreibt. Man erhält

$$(\Delta A)^2 = \int_{\mathbb{R}^n} \left| \left[\hat{A}\psi(q) - \int_{\mathbb{R}^n} \psi^*(q') \hat{A}\psi(q') dq' \psi(q) \right] \right|^2 dq = \int_{\mathbb{R}^n} |(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \psi(q)|^2 dq, \quad (3.81)$$

wobei

$$\langle \hat{A} \rangle = (\psi, \hat{A}\psi) = \int_{\mathbb{R}^n} \psi^*(q) \hat{A}\psi(q) dq$$

der Erwartungswert von \hat{A} im Zustand ψ ist, und damit speziell für Ort und Impuls wieder die Ausdrücke (3.77) und (3.78). Unschärfen sind demnach ein Maß dafür, wie stark die Meßwerte im Mittel vom Erwartungswert abweichen, wenn die durch \hat{A} repräsentierte physikalische Größe *sehr häufig* an identisch präparierten Systemen, die sich in einem durch ψ beschriebenen Zustand befinden, gemessen wird. Genauer gesagt ist das Quadrat der Unschärfe einer Größe der Mittelwert der Quadrate der Abweichungen der Meßwerte vom Erwartungswert der Größe im Grenzfall unendlich vieler Messungen dieser Größe an identisch präparierten Systemen – und damit genau die *Varianz* dieser Größe, wovon man sich auch direkt überzeugen kann, denn es gilt

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^n} |(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \psi(q)|^2 dq &= \int_{\mathbb{R}^n} \psi^*(q) (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \psi(q) dq = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle \hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \rangle^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2. \end{aligned}$$

Die Unschärfe selbst ist damit nichts anderes als die *Standardabweichung* der Größe. Sie ist also ein *Maß für die Streuung der Meßwerte*. Damit stellt sie insbesondere niemals bei einzelnen Messungen, sondern nur bei Meßreihen eine sinnvolle Größe dar. Außerdem haben Unschärfen nichts mit ungenauen Messungen, unvollständiger Kenntnis physikalischer Größen oder prinzipiellen Grenzen, wie genau man eine Größe messen kann, zu tun. Die Unschärfe einer einzelnen Messung ist stets exakt gleich Null, da eine solche natürlich nicht streuen kann. Erst wenn man viele Messungen derselben Größe an identischen Systemen gemacht hat, ist dafür eine Unschärfe im obigen Sinn angebbar.

Das führt zur Schlußfolgerung, daß eine Deutung, wie sie Heisenberg selbst anfangs vertrat, nicht haltbar ist¹³⁶. Die Unschärferelation ist definitiv nicht auf Einzelmessungen, sondern nur auf Meßreihen anwendbar und hat vor allen Dingen auch nichts mit irgendwelchen unvermeidlichen Meßungenauigkeiten bei simultanen Messungen von Ort und Impuls oder den Grenzen dessen, was wir über Ort und Impuls des betrachteten Quantensystems herausfinden

¹³⁶Der erste, der ausdrücklich hierauf hinwies, war C. R. von Liechtenstern, der 1955 bemerkte, daß bei Heisenbergs Interpretation der Ortsmessung eines Elektrons mit Hilfe eines Gammastrahlenmikroskops unzulässigerweise davon ausgegangen wird, daß das Elektron vor der Messung einen klassischen, wohlbestimmten Impuls besitzt, da andernfalls durch die Messung nichts gestört werden könnte [550].

können, zu tun. Auch die heuristischen Herleitungen der Unschärferelation, die ihr Entdecker verbreitet präsentierte¹³⁷, sind unrichtig, und das nicht nur aufgrund der unzulässigen Anwendung auf Einzelmessungen¹³⁸. Denn Grundlage ist dabei stets die Vorstellung, daß das beobachtete Quantenobjekt durch die Messung gestört wird, und zwar gestört im Sinne einer physikalischen Wechselwirkung, die es gewissermaßen aus der ansonsten ungestörten Bahn wirft. Das würde einerseits bedeuten, daß das ungestörte Objekt tatsächlich eine Bahn und damit definierte Werte für Ort und Impuls hätte; andererseits müßte man solche das System störenden Wechselwirkungen zumindest im Prinzip zurückverfolgen und damit eine über die Quantenmechanik hinausgehende Beschreibung des Objekts zustande bringen können. Beides darf inzwischen als empirisch widerlegt gelten¹³⁹. Man sieht das exemplarisch an der oben beschriebenen, auch heute noch sehr populären Argumentation mithilfe der Beugung am Einzelspalt. Es entsteht hierbei der Eindruck, die Elektronen bewegten sich auf irgendwelchen Bahnen und würden durch den Spalt unkontrollierbar abgelenkt. Von Bahnen der Elektronen kann aber in diesem Zusammenhang selbstverständlich keine Rede sein. Die Impulsunschärfe kommt keineswegs durch einen wie auch immer stattfindenden Impulsübertrag des Spaltes auf die Elektronen zustande¹⁴⁰.

Die korrekte Formulierung der Unschärferelation für Ort und Impuls lautet somit folgendermaßen:

Es ist unmöglich, ein physikalisches System in einen Zustand zu bringen, so daß bei vielen Messungen einer Ortskomponente q_j und vielen Messungen der zugehörigen Impulskomponente p_j an identischen solchen Systemen die Ungleichung

$$\Delta q_j \Delta p_j \geq \frac{\hbar}{2}$$

verletzt wird.

Insbesondere handelt es sich hierbei *nicht* um eine Interpretation, sondern um einen mathematisch beweisbaren Satz der Quantenmechanik, über den es nichts zu diskutieren gibt.

Diese Formulierung bringt deutlich zum Ausdruck, daß Unschärferelationen statistische Aussagen sind. Sie zeigt außerdem, inwiefern Präparationen des Systems, welche die Streuung

¹³⁷Siehe Abschnitt 3.8.1.1.

¹³⁸Es gibt Vorschläge zur Anwendung von Ungleichungen der Gestalt der Heisenbergschen Unschärferelation auf einzelne Quantenobjekte [336], [795]. Dabei handelt es sich jedoch um einen anderen Sachverhalt als den hier diskutierten; insbesondere ist dann die Herleitung eine völlig andere als die weiter unten beschriebene formal-allgemeine im Rahmen der Standard-Quantenmechanik.

¹³⁹Wir kommen in Abschnitt 3.9.4.2 darauf zurück.

¹⁴⁰Darüberhinaus ist es natürlich vollkommen willkürlich, die Unschärfe der Querimpulse mit Hilfe der Lage der Minima erster Ordnung abzuschätzen. Insbesondere könnte man so zu der falschen Annahme gelangen, die Impulsunschärfe sei durch den Gesamtimpuls jedes einzelnen Elektrons nach oben beschränkt. Im übrigen ist es möglich, durch raffinierte experimentelle Anordnungen mit materiellen Quantenobjekten Interferenzphänomene zu produzieren, bei denen nachweislich überhaupt kein Impulsübertrag stattfindet, wie Dürr, Nonn und Rempe als erste gezeigt haben [215], [216], [217]. Damit erweist sich auch die jahrzehntelang in vielen Lehrbüchern verbreitete Auffassung, der Welle-Teilchen-Dualismus sei eine Folge der Unschärferelation für Ort und Impuls, als falsch; beide Sachverhalte sind voneinander unabhängig.

der Meßwerte einer der beiden Größen beeinflussen, das stets auch bei derjenigen der anderen tun; je kleiner die Streuung der Meßwerte der einen Größe wird, desto größer ist diejenige der Meßwerte der anderen Größe und umgekehrt. „Simultane Messung beider Größen“ ist dabei so zu verstehen, daß die Messungen sowohl von p als auch von q sehr oft wiederholt werden, wobei man das jeweils an immer wieder gleich präparierten Exemplaren des betrachteten Quantenobjekts durchzuführen hat. Es handelt sich dabei *nicht* um das gleichzeitige Messen beider Größen an ein und demselben Objekt; das ist bei komplementären Größen prinzipiell nicht möglich.

Condon war wohl der erste, der schon kurz nach ihrer Entdeckung mit dem Hinweis, es müsse auch Größen geben, für die keine Unschärferelation besteht, die Notwendigkeit einer allgemeineren Fassung derselben hervorhob, sowohl was ihre Formulierung, als auch was ihre Herleitung betrifft [166]. Schon zuvor hatte Heisenberg über einen Bezug zwischen Unschärferelationen und nichtverschwindenden Kommutatoren konjugierter quantenmechanischer Größen spekuliert. Daß er damit richtig lag, zeigte sich wenig später.

3.8.2.2 Funktionalanalytische Herleitung

Die gewünschte Verallgemeinerung der Unschärferelation im Zusammenhang mit deren Herleitung unter Verwendung von Kommutatoren wurde erstmals 1929 von Robertson bewerkstelligt [738]. Ein solcher Zusammenhang wurde bereits zwei Jahre vorher von Heisenberg in seiner Pionierarbeit [402]¹⁴¹ angedeutet, wo er die Unschärferelation für Ort und Impuls als „direkte anschauliche Erläuterung“ der Relation

$$\mathbf{p} \mathbf{q} - \mathbf{q} \mathbf{p} = \frac{h}{2\pi i}$$

bezeichnet und von einer „direkten mathematischen Verbindung“ zwischen der Unschärferelation und dieser Vertauschungsrelation spricht, ohne das in irgendeiner Weise näher zu präzisieren. Auch wenn Heisenberg zu dieser Zeit noch nicht über eine korrekte Deutung seiner Unschärferelation verfügt, erkennt er doch den beschriebenen Zusammenhang wieder einmal mit gewohnt zielsicherer Intuition. Ausgangspunkt bei Robertson ist dann in der Tat der Kommutator zweier beliebiger selbstadjungierter Operatoren \hat{A} und \hat{B} auf einem Hilbertraum \mathcal{H} ,

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.$$

Dazu betrachtet man einen normierten Zustandsvektor $\psi \in \mathcal{H}$ sowie die zugehörigen, gemäß (3.81) definierten Unschärfen

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \int |(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \psi(q)|^2 dq, \\ (\Delta B)^2 &= \int |(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \psi(q)|^2 dq \end{aligned}$$

¹⁴¹Vergleiche auch [406].

der beiden Operatoren. Wendet man nun die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung in der Gestalt

$$\int (f_1 f_1^* + f_2 f_2^*) dq \cdot \int (g_1 g_1^* + g_2 g_2^*) dq \geq \left| \int (f_1 g_1 + f_2 g_2) dq \right|^2$$

auf

$$f_1^* = f_2 = (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \psi, \quad g_1 = -g_2^* = (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \psi$$

an, erhält man für die linke Seite

$$\begin{aligned} & \int [\psi^* (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \psi + (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \psi \psi^* (\hat{A}^+ - \langle \hat{A} \rangle)] dq \times \\ & \times \int [(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \psi \psi^* (\hat{B}^+ - \langle \hat{B} \rangle) + \psi^* (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \psi] dq \\ & = 2 \cdot \int |(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \psi(q)|^2 dq \cdot \int |(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \psi(q)|^2 dq = 4(\Delta \hat{A})^2 (\Delta \hat{B})^2 \end{aligned}$$

und für die rechte

$$\begin{aligned} & \left| \int [\psi^* (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \psi - (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \psi \psi^* (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)] dq \right|^2 \\ & = \left| \int [\psi^* (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \psi - \psi^* (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \psi] dq \right|^2 \\ & = \left| \int \psi^* (\hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}) \psi dq \right. \\ & \quad \left. + \int \psi^* (\langle \hat{B} \rangle \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \hat{B} + \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \hat{B} + \langle \hat{B} \rangle \hat{A} - \langle \hat{B} \rangle \langle \hat{A} \rangle) \psi dq \right|^2 \\ & = \left| \int \psi^* [\hat{A}, \hat{B}] \psi dq \right|^2 = |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2, \end{aligned}$$

insgesamt also

$$4(\Delta \hat{A})^2 (\Delta \hat{B})^2 \geq |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2$$

oder

$$\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|. \quad (3.82)$$

Das ist die *allgemeine Form der Unschärferelation*.

Man erkennt an (3.82), daß ganz allgemein für zwei beliebige selbstadjungierte Operatoren mit nichtverschwindendem Kommutator stets eine Unschärferelation aufgestellt werden kann. Mit anderen Worten: *Wenn der Kommutator zweier Operatoren nicht verschwindet, dann können die von den Operatoren repräsentierten physikalischen Größen nicht simultan*

streuungsfrei gemessen werden. Diese etwas unpräzise formulierte Aussage bedeutet, daß kein quantenmechanisches System sich in einem Zustand befinden kann, sodaß bei sehr vielen Messungen der Größen A und B an sehr vielen identischen solchen Systemen das Produkt der Streuungen der Meßwerte die durch die Unschärferelation (3.82) festgelegte Untergrenze unterschreitet. Das ist die korrekte Interpretation einer jeden Unschärferelation.

Setzt man in (3.82) den Kommutator

$$[\hat{Q}_j, \hat{P}_j] = i\hbar$$

des Orts- und des Impulsoperators ein, so landet man bei

$$\Delta\hat{P}_j \Delta\hat{Q}_j \geq \frac{\hbar}{2}$$

und damit gerade wieder bei der Heisenbergschen Unschärferelation (3.79). Das unterstreicht erneut nachdrücklich die Richtigkeit ihrer im vorigen Abschnitt formulierten statistischen Interpretation.

Das Gleichheitszeichen gilt in (3.79) übrigens nur, wenn die Wellenfunktion des betrachteten Systems die Gestalt einer Gauß-Verteilung hat. Das wurde von Heisenberg bereits vermutet [402] und in der in Anmerkung 134 in Abschnitt 3.8.1.2 erwähnten Arbeit [207] von Ditchburn erstmals bewiesen, wobei dieser dort J. L. Synge als Urheber bezeichnet¹⁴². Physikalisch bedeutet das, daß die Zustände mit minimaler Orts-Impuls-Unschärfe genau die kohärenten Zustände sind¹⁴³. Das ist unter anderem in der Quantenoptik von fundamentaler Bedeutung.

Es sollte nicht unerwähnt bleiben, daß die hier verwendete Form der Kommutatorrelation genaugenommen mathematisch nicht korrekt ist, denn sowohl der Orts- als auch der Impulsoperator sind unbeschränkt. Unbeschränkte Operatoren sind grundsätzlich nur auf echten Teilmengen des verwendeten Hilbertraums definiert, und folglich ist die Frage nach dem Definitionsbereich entsprechender Kommutatoren nichttrivial; er wird durch die Definitionsmengen der beteiligten Operatoren festgelegt¹⁴⁴. Ein Blick auf die Definition des Operators $[\hat{A}, \hat{B}]$ zeigt, daß seine Definitionsmenge

$$\mathcal{D}([\hat{A}, \hat{B}]) = \mathcal{D}(\hat{A}\hat{B}) \cap \mathcal{D}(\hat{B}\hat{A})$$

ist; das kann irgendeine dichte echte Teilmenge des Hilbertraumes sein und im Extremfall auch die Menge, die nur den Nullvektor enthält. Kommutatorrelationen sind daher genaugenommen nur unter Angabe der Definitionsmenge sinnvoll. Entsprechend lautet die mathematisch korrekte Form der Vertauschungsrelation für Ort und Impuls

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar \mathbf{1}_{\mathcal{D}([\hat{A}, \hat{B}])},$$

¹⁴²Vergleiche auch [208].

¹⁴³Vergleiche Anmerkung 58 in Abschnitt 3.4.5.

¹⁴⁴Mathematische Details über Kommutatorrelationen in Hilberträumen findet man ausführlich in [722].

wobei $\mathbf{1}_{\mathcal{D}([\hat{A}, \hat{B}])}$ der Einheitsoperator auf $\mathcal{D}([\hat{A}, \hat{B}])$ ist, oder auch

$$[\hat{Q}, \hat{P}] \subset i\hbar \mathbf{1};$$

jetzt ist $\mathbf{1}$ der Einheitsoperator auf ganz \mathcal{H} . Ausführlicher bedeutet das

$$[\hat{Q}, \hat{P}] \psi = i\hbar \psi \quad \text{für alle } \psi \in \mathcal{D}(\hat{Q}\hat{P}) \cap \mathcal{D}(\hat{P}\hat{Q}).$$

Für die Herleitung der Unschärferelationen für Ort und Impuls und deren universelle Gültigkeit hat das natürlich keine Bedeutung.

Die beschriebenen historischen Arbeiten zur Herleitung der Unschärferelation von Kennard, Weyl und Robertson zeigen, daß der beschriebene Sachverhalt nach der üblichen Orientierungssuchenden Anfangsphase bei den Pionieren durchaus wohlverstanden war; gleichwohl blieb die korrekte Deutung erst einmal exklusives, auf die mathematische Physik beschränktes Spezialwissen, während sich anderswo, von der Lehrbuchliteratur bis zur Naturphilosophie, eine diffuse „Standardinterpretation“ breit machte, die mehr oder weniger Heisenbergs ursprünglicher Auffassung entsprach und ungefähr beinhaltete, daß die Messung des Impulses eines Teilchens umso ungenauer ausfallen müsse, je genauer der Ort dieses Teilchens gemessen werde und umgekehrt und entsprechend eine gleichzeitige exakte Messung beider Größen nicht möglich sei. Diese Deutung ist *nachweislich falsch*; abgesehen davon sucht man in diesem Zusammenhang eine wirklich präzise Definition des Begriffs der Unschärfe meist vergeblich. Der korrekte Sachverhalt geriet vorübergehend und verbreitet in Vergessenheit, nur vereinzelt wurde nachdrücklich auf diesen Mißstand hingewiesen¹⁴⁵, und eine flächendeckend positive Entwicklung in der Lehrbuchliteratur zeigte sich erst seit den neunziger Jahren¹⁴⁶.

3.8.3 Die Schrödingersche Unschärferelation

Die Heisenbergsche Unschärfereation ist mit ihren unterschiedlichen Erscheinungsformen allgegenwärtig in Physikergehirnen und Lehrbüchern. Für eine von Schrödinger entdeckte Weiterentwicklung dieses Resultats trifft erstaunlicherweise so ungefähr das Gegenteil zu; sie wurde schon wenige Jahre später veröffentlicht [793], blieb danach jedoch jahrzehntelang vergessen und taucht auch heutzutage nur vereinzelt in staubigen Winkeln der Spezialliteratur auf. Das allein, ganz abgesehen von ihrer physikalischen Bedeutung, ist Grund genug, diese verschärfte Unschärfebeziehung hier ebenfalls zu betrachten.

¹⁴⁵Der erste, der nach längerer Zeit wieder darauf aufmerksam machte, war Patrick Suppes [850] [851], später kamen beispielsweise auch Mario Bunge [138] und Wolfgang Stegmüller [835], [836] dazu.

¹⁴⁶Um so erstaunlicher ist es, wie wenig sich das nach wie vor insbesondere in der Schulphysik herumgesprochen hat. In Baden-Württemberg zum Beispiel gehört die Unschärferelation zwar zum Pflichtprogramm des schriftlichen Abiturs in Physik – worüber man für sich genommen bereits zumindest diskutieren kann –, dennoch findet man kaum Schulbücher, in denen sie richtig wiedergegeben wird. Ausführliches zu dieser Problematik sowie eine gleichzeitig elementare und präzise Einführung in das Thema insgesamt liefern [627], [628] und [629].

Auch Schrödinger startet zur Herleitung seiner Unschärferelation mit der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung

$$\int f f^* dq \cdot \int g g^* dq \geq \left| \int f g dq \right|^2,$$

wendet diese auf die selbstadjungierten Operatoren \hat{A} und \hat{B} und den normierten Zustandsvektor ψ beziehungsweise auf die hieraus gebildeten Funktionen

$$f = \hat{B}\psi, \quad g = \hat{A}\psi$$

an und findet unter Verwendung der Selbstadjungiertheit von \hat{A} und \hat{B}

$$\int \psi^* \hat{B}^2 \psi dq \cdot \int \psi^* \hat{A}^2 \psi dq \geq \left| \int \psi^* \hat{A} \hat{B} \psi dq \right|^2$$

oder kurz

$$\langle \hat{A}^2 \rangle \langle \hat{B}^2 \rangle \geq |\langle \hat{A} \hat{B} \rangle|^2.$$

Zerlegt man hier die rechte Seite gemäß

$$\hat{A} \hat{B} = \frac{\hat{A} \hat{B} + \hat{B} \hat{A}}{2} + \frac{\hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}}{2}$$

in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Teil, gelangt man mit Hilfe der Dreiecksungleichung zu

$$\langle \hat{A}^2 \rangle \langle \hat{B}^2 \rangle \geq \left| \left\langle \frac{\hat{A} \hat{B} + \hat{B} \hat{A}}{2} + \frac{\hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}}{2} \right\rangle \right|^2 \geq \left(\left\langle \frac{\hat{A} \hat{B} + \hat{B} \hat{A}}{2} \right\rangle \right)^2 + \left| \left\langle \frac{\hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}}{2} \right\rangle \right|^2.$$

Um nun dafür zu sorgen, daß auf der linken Seite anstelle der Erwartungswerte der Quadrate der Operatoren \hat{A} und \hat{B} deren Unschärfen stehen, ersetzt Schrödinger in obiger Rechnung als nächstes diese Operatoren durch

$$\hat{A}' = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle, \quad \hat{B}' = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle.$$

Man erhält

$$\begin{aligned} \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle \langle (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)^2 \rangle &\geq \left[\frac{\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) + (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \rangle}{2} \right]^2 \\ &+ \left| \frac{\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) - (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \rangle}{2} \right|^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \left(\frac{\langle \hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle\hat{B}\rangle - \langle\hat{A}\rangle\hat{B} + \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle + \hat{B}\hat{A} - \hat{B}\langle\hat{A}\rangle - \langle\hat{B}\rangle\hat{A} + \langle\hat{B}\rangle\langle\hat{A}\rangle \rangle}{2} \right)^2 \\
 &\quad + \left| \frac{\langle \hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle\hat{B}\rangle - \langle\hat{A}\rangle\hat{B} + \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle - \hat{B}\hat{A} + \hat{B}\langle\hat{A}\rangle + \langle\hat{B}\rangle\hat{A} - \langle\hat{B}\rangle\langle\hat{A}\rangle \rangle}{2} \right|^2 \\
 &= \left(\frac{\langle \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} - 2\langle\hat{B}\rangle\hat{A} - 2\hat{A}\langle\hat{B}\rangle + 2\langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle \rangle}{2} \right)^2 + \left| \frac{\langle \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \rangle}{2} \right|^2
 \end{aligned}$$

und folglich

$$(\Delta\hat{A})^2 (\Delta\hat{B})^2 \geq \left(\frac{\langle \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \rangle}{2} - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle \right)^2 + \frac{|\langle \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \rangle|^2}{4}.$$

Verwendet man den Kommutator $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ und den Antikommutator $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ der Operatoren \hat{A} und \hat{B} , dann lautet das Resultat

$$(\Delta\hat{A})^2 (\Delta\hat{B})^2 \geq \left(\frac{\langle \{\hat{A}, \hat{B}\} \rangle}{2} - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle \right)^2 + \frac{|\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2}{4}. \quad (3.83)$$

Das ist die *Schrödingersche Unschärferelation*.

Ein Vergleich mit der Heisenbergschen Relation zeigt, daß die Schrödinger-Version stärker ist, denn hier ist die untere Schranke für das Produkt der Unschärfen größer als bei ersterer. Folglich enthält die Schrödingersche Unschärferelation die Heisenbergsche als Spezialfall; für Zustände, in welchen der zusätzliche additive Term verschwindet, sind beide identisch.

Die Bedeutung der Relation (3.83) zeigt sich, wenn man einige Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitstheorie zu Hilfe nimmt. Die auf der linken Seite stehenden Varianzen

$$\text{Var}(\hat{A}) = (\Delta\hat{A})^2, \quad \text{Var}(\hat{B}) = (\Delta\hat{B})^2$$

der Operatoren \hat{A} und \hat{B} stellen Sonderfälle einer allgemeineren Größe dar, der *Kovarianz* von \hat{A} und \hat{B} . Diese ist definiert als

$$\text{Cov}(\hat{A}, \hat{B}) = \text{Cov}(\hat{B}, \hat{A}) = \frac{\langle \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \rangle}{2} - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle,$$

und offensichtlich gilt

$$\text{Cov}(\hat{B}, \hat{B}) = \text{Var}(\hat{B}) = (\Delta\hat{B})^2.$$

Verbreitet findet man auch die Schreibweise

$$\text{Cov}(\hat{A}, \hat{B}) = \Delta\hat{A}\hat{B};$$

die Schrödingersche Unschärferelation lautet hiermit

$$(\Delta\hat{A})^2 (\Delta\hat{B})^2 - (\Delta\hat{A}\hat{B})^2 \geq \frac{|\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2}{4}.$$

Die Heisenbergsche Unschärferelation ist offensichtlich genau die Schrödingersche Unschärferelation für den Spezialfall verschwindender Kovarianz der beiden betrachteten Observablen.

Für zwei statistische Größen A und B ist die Kovarianz $\text{Cov}(A, B)$ ein Maß für deren Korreliertheit¹⁴⁷; Die Gültigkeit der Gleichung $\text{Cov}(A, B) = 0$ ist eine notwendige, aber nicht hinreichende Bedingung für die statistische Unabhängigkeit dieser beiden Größen. Die Heisenbergsche Unschärferelation zeigt, daß auch bei verschwindender Kovarianz zweier Größen diese statistisch korreliert sein können. Entsprechend stellt die Schrödingersche Unschärferelation eine genauere Beschreibung solcher Korrelationen dar, wobei insbesondere auch nicht-lineare Beziehungen zwischen den beiden betrachteten Größen gesonderte Berücksichtigung finden.

Die Relation (3.83) blieb zunächst lange Zeit in Forschung und Lehre völlig unberücksichtigt. Das erste und bis heute wohl auch einzige Quantenmechanik-Lehrbuch, in welchem sie erwähnt wird – im übrigen auch nur sehr beiläufig – ist das 1961 erstmals erschienene Buch von Merzbacher [600]. Auch in Zeitschriftenartikeln ließ ihr Auftreten auf sich warten und erfolgte dann zunächst nur sehr vereinzelt, beispielsweise 1980 bei Dodonov, Kurmishev und Man'ko in einer Arbeit über Korrelationen bei kohärenten Zuständen [210] und 1989 in einem Aufsatz von de la Torre, Catuogno und Ferrando, in welchem der Zusammenhang der Schrödingerschen Unschärferelation mit Nichtseparabilität und dem EPR-Argument diskutiert wird [889]. Aus experimenteller Sicht ist die Schrödingersche Unschärferelation in der nichtlinearen Optik von Bedeutung, beispielsweise im Zusammenhang mit Resonanzfluoreszenz-Effekten und Squeezed States [18], [723], [883] - [887]. Letztere spielen hier dieselbe Rolle wie die kohärenten Zustände bei der Heisenbergschen Unschärferelation; Squeezed States sind diejenigen Zustände, für welche die rechte Seite der Schrödingerschen Unschärferelation in Bezug auf Ort und Impuls minimal wird [8] - [11], [886].

In allen Standard-Unschärferelationen sind die darin auftretenden Unschärfen natürlich auf jeweils denselben Zustand zu beziehen. Trifonov war wohl der erste, der die Frage aufwarf, ob man hier auch für zwei unterschiedliche Zustände etwas sinnvolles erhält. Das führt auf eine Verallgemeinerung der Schrödingerschen Unschärferelation, welche die Unschärfen zweier Observablen A und B in zwei *unterschiedlichen* Zuständen ψ und φ miteinander koppelt [884]. Diese verallgemeinerte Unschärferelation hat die naheliegende Form

$$\frac{1}{2} [(\Delta_{\psi}\hat{A})^2 (\Delta_{\varphi}\hat{B})^2 + (\Delta_{\varphi}\hat{A})^2 (\Delta_{\psi}\hat{B})^2] - \Delta_{\psi}\hat{A}\hat{B} \Delta_{\varphi}\hat{A}\hat{B} \geq \frac{1}{4} (\psi, [\hat{A}, \hat{B}] \varphi) (\varphi, [\hat{A}, \hat{B}] \psi)^*.$$

Für Ort und Impuls wird daraus

$$\frac{1}{2} [(\Delta_{\psi}\hat{P})^2 (\Delta_{\varphi}\hat{Q})^2 + (\Delta_{\varphi}\hat{P})^2 (\Delta_{\psi}\hat{Q})^2] - \Delta_{\psi}\hat{P}\hat{Q} \Delta_{\varphi}\hat{P}\hat{Q} \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

¹⁴⁷Allerdings nur der Richtung nach. Möchte man quantitative Aussagen machen, verwendet man den *Korrelationskoeffizienten*

$$\text{Kor}(A, B) = \frac{\text{Cov}(A, B)}{\sqrt{\text{Var}(A)} \sqrt{\text{Var}(B)}}.$$

Für $\psi = \varphi$ gehen diese Beziehungen in die entsprechenden, oben beschriebenen gewöhnlichen Varianten über. Die verallgemeinerten Unschärferelationen beschreiben globale statistische Korrelationen, die bei der Messung von Observablen an unterschiedlichen Zuständen auftreten. Insbesondere stellen sie ein Maß für die Verschränkung dieser Zustände dar¹⁴⁸.

3.8.4 Unschärferelationen für n Observable

Ein andere Verallgemeinerung drängt sich mindestens genauso auf wie die soeben beschriebene, nämlich die Betrachtung von mehr als zwei Observablen gleichzeitig. Eine solche wurde bereits 1934 von Robertson vorgestellt [739]¹⁴⁹, wobei er auf seine eigene und die Vorarbeit von Schrödinger aufbaute.

Zur Formulierung der verallgemeinerten Unschärferelation für n Observablen betrachten wir n selbstadjungierte Operatoren $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \dots, \hat{A}_n$ sowie die Matrizen ξ und η mit

$$\xi_{ij} = \frac{1}{2} \langle \{\hat{A}_i, \hat{A}_j\} \rangle - \langle \hat{A}_i \rangle \langle \hat{A}_j \rangle = \Delta \hat{A}_i \hat{A}_j,$$

$$\eta_{ij} = -\frac{i}{2} \langle [\hat{A}_i, \hat{A}_j] \rangle;$$

die Mittelwerte seien dabei mit einem vorgegebenen quantenmechanischen Zustand ψ gebildet. Dann lautet die verallgemeinerte Unschärferelation

$$\det \xi \geq \det \eta. \quad (3.84)$$

Um Robertsons Herleitung dieses Resultats nachzuvollziehen [739], stellen wir zunächst fest, daß ξ symmetrisch und η antisymmetrisch ist. Damit ist (3.84) für *ungerade* n trivialerweise richtig, da die Determinante einer symmetrischen Matrix positiv ist oder identisch verschwindet und diejenige einer antisymmetrischen Matrix mit einer ungeraden Anzahl von Spalten stets identisch verschwindet. Es genügt also, die Sache für *gerade* $n = 2N$ zu betrachten.

Die beiden Matrizen ξ und η bilden den Real- beziehungsweise Imaginärteil einer weiteren Matrix \mathbf{S} , definiert durch

$$S_{ij} = (\psi, (\hat{A}_i - \langle \hat{A}_i \rangle) (\hat{A}_j - \langle \hat{A}_j \rangle) \psi),$$

¹⁴⁸Wir sollten der Vollständigkeit wegen auch erwähnen, daß es einen Zusammenhang zwischen der Schrödingerschen Unschärferelation und einer anderen prominenten Ungleichung der Quantenmechanik gibt, der in Abschnitt 2.3.2 bereits erwähnten Englertschen Dualitätsrelation

$$\mathcal{D}^2 + \mathcal{V}^2 \leq 1.$$

Einen solchen leiteten Björk et al. 1999 her, wobei sie gleichzeitig Englerts Ungleichung sehr weitgehend verallgemeinern konnten [70]. Das bedeutet jedoch nicht, daß etwa eine der beiden Relationen aus der anderen herleitbar wäre; es ist lediglich möglich, eine spezielle Kombination der beiden Größen \mathcal{D} und \mathcal{V} als Unschärfeprodukt zweier geeignet konstruierter Operatoren auszudrücken.

¹⁴⁹Vergleiche auch [885].

wie man sich leicht durch nachrechnen überzeugen kann. Man findet nämlich

$$\begin{aligned}
 S_{ij} &= (\psi, (\widehat{A}_i \widehat{A}_j - \langle \widehat{A}_j \rangle \widehat{A}_i - \widehat{A}_j \langle \widehat{A}_i \rangle + \langle \widehat{A}_j \rangle \langle \widehat{A}_i \rangle) \psi) \\
 &= \langle \widehat{A}_i \widehat{A}_j \rangle - \langle \widehat{A}_j \rangle \langle \widehat{A}_i \rangle \\
 &= \frac{1}{2} ((\widehat{A}_i \widehat{A}_j + \widehat{A}_j \widehat{A}_i) + \langle \widehat{A}_i \widehat{A}_j - \widehat{A}_j \widehat{A}_i \rangle) - \langle \widehat{A}_j \rangle \langle \widehat{A}_i \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \langle \{\widehat{A}_i, \widehat{A}_j\} \rangle - \langle \widehat{A}_i \rangle \langle \widehat{A}_j \rangle + \frac{1}{2} [\langle \widehat{A}_i, \widehat{A}_j \rangle] = \xi_{ij} + i \eta_{ij}
 \end{aligned}$$

und damit

$$\mathbf{S} = \boldsymbol{\xi} + i \boldsymbol{\eta}.$$

Außerdem taucht die Matrix \mathbf{S} als Koeffizientenmatrix einer quadratischen Form \mathcal{S} auf, die man erhält, wenn man das Quadrat der Norm des Superpositionszustands

$$\Psi = \sum_{j=1}^n x_j (\widehat{A}_j - \langle \widehat{A}_j \rangle) \psi$$

bildet, mit n beliebigen reellen Zahlen x_j . Hier ergibt sich

$$(\Psi, \Psi) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_j^* x_i (\psi, (\widehat{A}_i - \langle \widehat{A}_i \rangle) (\widehat{A}_j - \langle \widehat{A}_j \rangle) \psi) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_j^* x_i S_{ij} \equiv \mathcal{S}.$$

Diese quadratische Form ist ersichtlicherweise hermitesch und positiv semidefinit. Ebenso ersichtlich ist, daß

$$\Xi = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_j^* x_i \xi_{ij}$$

hermitesch und positiv definit und

$$\mathbf{H} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_j^* x_i \eta_{ij}$$

immerhin positiv definit ist; damit gibt es eine affine Abbildung

$$\mathbf{T} : (x_1, x_2, \dots, x_n) \mapsto (y_1, y_2, \dots, y_n),$$

welche simultan die Matrix $\boldsymbol{\xi}$ auf die Einheitsmatrix $\mathbf{1}$ und die Matrix $i\boldsymbol{\eta}$ auf die Diagonalmatrix $i\boldsymbol{\eta}' = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{2N})$ transformiert, wobei die reellen Zahlen λ_j die $2N$ Wurzeln der Säkulargleichung

$$\det(i\boldsymbol{\eta} - \lambda \boldsymbol{\xi}) = 0 \quad (3.85)$$

sind. Wegen $\boldsymbol{\eta}^T = -\boldsymbol{\eta}$ gilt hierfür

$$\det(\boldsymbol{\eta} - \lambda \boldsymbol{\xi}) = \det(\boldsymbol{\eta} - \lambda \boldsymbol{\xi})^T = \det(-\boldsymbol{\eta} - \lambda \boldsymbol{\xi}^T) = \det(\boldsymbol{\eta} + \lambda \boldsymbol{\xi}),$$

und da $n = 2N$ gerade ist, enthält dieses Polynom nur gerade Potenzen von λ . Aus (3.85) wird somit

$$\det \boldsymbol{\eta} + \dots + \lambda^{2N} \det \boldsymbol{\xi} = 0.$$

Folglich sind die λ_j paarweise Zahl und Gegenzahl, und durch Umnummerierung der λ_j ergibt sich $\lambda_k > 0$ und $\lambda_{k+N} = -\lambda_k$ für $k = 1, 2, \dots, N$. Das zieht einerseits für deren Produkt

$$\lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \dots \cdot \lambda_{2N} = (-1)^N (\lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \dots \cdot \lambda_N)^2$$

nach sich, andererseits kann man nun \mathcal{S} in der Form

$$\mathcal{S} = \sum_{j=1}^N [|y_j|^2 (1 + \lambda_j) + |y_{N+j}|^2 (1 - \lambda_j)].$$

schreiben. Da \mathcal{S} positiv definit ist, muß außerdem $\lambda_j < 1$ gelten für alle $j = 1, 2, \dots, N$. Für das Produkt aller Wurzeln der Säkulargleichung gilt

$$\prod_{j=1}^{2N} \lambda_j = (-1)^N \frac{\det \boldsymbol{\eta}}{\det \boldsymbol{\xi}},$$

und damit erhält man

$$\frac{\det \boldsymbol{\eta}}{\det \boldsymbol{\xi}} = (\lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \dots \cdot \lambda_N)^2 \geq 1$$

oder

$$\det \boldsymbol{\xi} \geq \det \boldsymbol{\eta},$$

also das gewünschte Resultat.

Diverse Sonderfälle sind hier unmittelbar abzulesen. So findet man beispielsweise für $2N$ kanonisch konjugierte Variable $\hat{P}_1, \hat{P}_2, \dots, \hat{P}_N, \hat{Q}_1, \hat{Q}_2, \dots, \hat{Q}_N$ die Relation

$$\det \boldsymbol{\xi}(\hat{P}_i, \hat{Q}_j) = \frac{\hbar^{2N}}{4^N},$$

was sich für $N = 1$ natürlich auf die Heisenbergsche Unschärferelation in ihrer ursprünglichen speziellen Fassung reduziert. Genauso wird aus (3.84) für $n = 2$ die Schrödingersche Unschärferelation (3.83). Umgekehrt veröffentlichte Trifonov einige Arbeiten, in denen er weitere Verallgemeinerungen der Unschärferelationen beschreibt, für die (3.84) einen Spezialfall darstellt [884], [887], [888]. Von ihm stammt auch ein Konzept zur Konstruktion verallgemeinerter Squeezed States, welche die Zustände minimaler Unschärfe bezüglich der Unschärferelationen für n Observable darstellen [881], [882].

3.8.5 Was ist mit Energie und Zeit?

3.8.5.1 Ein Phantom geht um

In der Literatur geistert, ebenfalls unter der Bezeichnung „Unschärferelation“, eine weitere Ungleichung herum, die konsequenter- aber auch fälschlicherweise häufig mit den oben diskutierten Heisenbergschen Unschärferelationen in einen Topf geworfen wird. Es handelt sich um die sogenannte „Energie-Zeit-Unschärferelation“, die zum Beispiel in der Form

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (3.86)$$

vorgefunden werden kann. Der Ausgangspunkt dieser Überlegungen dürfte darin liegen, daß die in der Heisenbergschen Unschärferelation auftauchenden Größen Ort und Impuls kanonisch konjugierte Variablen darstellen, und in der klassischen Mechanik ist in gewissem Sinn die zur Variable der Zeit kanonisch konjugierte Variable die Energie. In der Tat weist (3.86) zumindest äußerlich eine starke Ähnlichkeit mit der Heisenbergschen Unschärferelation auf. Dabei sollte einen bei obiger Relation der fehlende Faktor $1/2$ zwar von vorneherein stutzig machen, was aber zahlreiche Autoren nicht zu stören scheint. Die Ähnlichkeit täuscht jedoch, denn *es gibt keine Energie-Zeit-Unschärferelation*, zumindest keine, die eine auch nur ähnlich universelle Bedeutung wie diejenige für Ort und Impuls hätte oder gar aus dieser herleitbar wäre. Alles, was (3.86) gleicht oder auch nur ähnelt, ist entweder falsch oder steht auf einer völlig anderen Grundlage als die Unschärferelation für Ort und Impuls. Das liegt einfach daran, daß es in der Standard-Quantenmechanik *keinen Zeit-Operator gibt*.

Ursache der Verwirrungen, die in diesem Zusammenhang in der Literatur zu finden sind, ist im allgemeinen die Verwechslung von internen und externen Koordinaten, das heißt, der kanonischen Variablen $q_j(t)$, welche den Ort eines Systems beschreiben, mit den Koordinaten x, y, z, t , mit welchen die Punkte der Raumzeit gekennzeichnet werden¹⁵⁰. Erstere sind dynamische Variable, vom betrachteten System und damit von dessen Hamiltonoperator abhängig und in der Quantenmechanik gemäß den Regeln der kanonischen Quantisierung durch Operatoren zu ersetzen; letztere dagegen sind vom betrachteten System unabhängig; sie und nicht die dynamischen Variablen sind es auch, auf die sich diejenigen Symmetrien beziehen, welche die Erhaltungssätze des Impulses, des Drehimpulses und der Energie zur Folge haben. Insbesondere werden sie in der Quantenmechanik prinzipiell nicht durch Operatoren dargestellt, sondern bleiben ganz normale reelle Zahlen. Folglich ist es *sinnlos*, für sie irgendwelche Unschärferelationen aufstellen zu wollen. Sie haben die Funktion von Parametern, deren Streuung natürlich grundsätzlich *identisch verschwindet*.

Damit kommt der Relation (3.86), wie auch immer sie interpretiert werden soll, *keinerlei allgemeine Bedeutung zu*; insbesondere ist sie *keine Unschärferelation*. Der Ausdruck (3.86) ist keine fundamentale Gesetzmäßigkeit, sondern bestenfalls „ein Stück zweifelhafte Heuristik“¹⁵¹. Entsprechend sind Ableitungen dieser Relation, die man häufig und in verschiedenen Varianten

¹⁵⁰Vergleiche Abschnitt 1.1.2.1. Ausführliche Diskussionen dieses Sachverhalts im Zusammenhang mit der Quantentheorie findet man bei [427] - [430] sowie [948].

¹⁵¹Diese treffende Bezeichnung stammt von Bunge [141].

antrifft, wie etwa durch Rückführung auf die Dauer von Energiemessungen oder auf die Orts-Impuls-Unschärferelation, schlicht und einfach falsch. Im ersten Fall handelt es sich um rein heuristische Abschätzungen, im zweiten setzt man die aus $p = h/\lambda = h\nu/c = E/c$ gewonnene Relation $\Delta p = \Delta E/c$ sowie die (nicht weiter begründbare) Relation $\Delta x = c \Delta t$ in die Unschärferelation

$$\Delta p \Delta x \cong \frac{\hbar}{2}$$

ein und erhält so ungefähr

$$\Delta E \Delta t \cong \hbar.$$

Eine solche „Herleitung“ von (3.86) ist nicht nur zahlenmäßig fehlerhaft, sondern insbesondere schon vom Ansatz her unhaltbar, weil sie in unzulässiger Weise die Streuung Δx , eine rein statistische Größe, mit einem realen Zeitintervall Δt verknüpft, das nicht in allgemeinem Sinn und schon gar nicht als Unschärfe der Zeit definiert werden kann. In beiden Fällen hat das nicht nur nichts mit der streng mathematisch durchzuführenden Herleitung echter quantenmechanischer Unschärferelationen zu tun, sondern ist auch physikalisch nicht begründbar.

Die oben erwähnte erste Variante beruft sich auf einen bekannten empirischen Sachverhalt, wonach die Streuung der Meßergebnisse bei Energiemessungen umso größer ist, je kürzer die Meßzeit ist. Das ist jedoch kein quantenmechanisches Grundprinzip und kann zumindest prinzipiell unterlaufen werden, wie Aharonov und Bohm gezeigt haben, indem sie ein Beispiel für einen Meßprozeß angegeben haben, bei dem eine beliebig genaue Energiemessung in einer beliebig kurzen Zeit möglich ist [5].

Wenn man die Relation (3.86) überhaupt mit einer vernünftigen Interpretation ausstatten kann, dann ist es eine, die man erhält, wenn man exponentiell zerfallende physikalische Systeme wie etwa angeregte Atome oder instabile Elementarteilchen betrachtet. Diese Deutung geht auf Landau und Peierls zurück [530]¹⁵². Ausgangspunkt ist dabei ein wohlbekannter Sachverhalt, wonach an exponentiell zerfallenden Systemen beobachtete Spektrallinien nicht scharf begrenzt sind, sondern stets eine gewisse Breite ΔE aufweisen, die sogenannte *natürliche Linienbreite*. Diese natürliche Linienbreite kann man mit Hilfe der mittleren Lebensdauer τ des angeregten Zustandes (also der Zeitdauer, nachdem der Bestand auf das $1/e$ -fache des ursprünglichen Bestandes abgesunken ist) berechnen. Die Spektren haben im Falle von exponentiellen Zerfallsgesetzen die Form von Lorentz-Kurven der Breite

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\tau}. \quad (3.87)$$

Um einen solchen Zerfall zu beobachten, muß man also im Mittel mindestens eine Zeit $\Delta t = \tau$ warten, und die abgestrahlte Energie kann man dann natürlich höchstens bis auf eine Genauigkeit ΔE messen. Dies läßt sich in der Form

$$\Delta E \Delta t \approx \hbar \quad (3.88)$$

notieren, womit wir eine Relation ähnlich wie (3.86) abgeleitet haben. Es muß dabei aber stets dazugesagt werden, auf was für physikalische Situationen sich diese Relation bezieht,

¹⁵²Vergleiche auch [427], [531] und [630].

nämlich auf exponentiell zerfallende instabile Systeme. Nur hierfür gilt sie allgemein und kann entsprechend auch zu Berechnungen herangezogen werden. Beispielsweise folgt aus (3.87)

$$\tau = \frac{\hbar}{\Delta E},$$

man kann also aus der Breite der Resonanzkurve eines zerfallenden Systems dessen mittlere Lebensdauer berechnen. Wir betonen aber erneut, daß das nichts mit Unschärferelationen zu tun hat und Δt und ΔE keine Streuungen und damit keine quantenmechanischen Unschärfen sind.

3.8.5.2 Die Zeit als kanonische Variable?

Die beschriebene Argumentation gegen eine kanonische Energie-Zeit-Unschärferelation scheint eine Lücke aufzuweisen, denn natürlich steht es zumindest formal gesehen jedermann frei, die Zeit t und die negative Hamiltonfunktion $-H$ eines physikalischen Systems als kanonisch konjugierte Variablen zu betrachten. In [338] beziehungsweise [339] steht genau, wie das geht. Man betrachtet dazu irgendeine invariante Variable θ , mit welcher die Bahn des beschriebenen Systems parametrisiert wird, beachtet, daß die Zeit hierdurch zu einer Funktion $t = t(\theta)$ wird und formuliert damit das Hamiltonsche Prinzip neu in der Form (der Strich bedeutet Ableiten nach θ)

$$\begin{aligned} \delta \int_{\theta_1}^{\theta_2} \left(\sum_{j=1}^n p_j \dot{q}_j - H \right) t' d\theta &= \delta \int_{\theta_1}^{\theta_2} \left(\sum_{j=1}^n p_j \dot{q}_j \frac{dt}{d\theta} - H \frac{dt}{d\theta} \right) d\theta \\ &= \delta \int_{\theta_1}^{\theta_2} \left(\sum_{j=1}^n p_j \frac{dq_j}{d\theta} - H \frac{dt}{d\theta} \right) d\theta = 0. \end{aligned}$$

Der Integrand des dritten Integrals legt obige Interpretation aufgrund seiner Symmetrie unmittelbar nahe. t wird hierdurch zur $n + 1$ -ten verallgemeinerten Koordinate q_{n+1} mit dem konjugierten verallgemeinerten Impuls $p_{n+1} = -H$. Das Hamiltonsche Prinzip lautet dann

$$\delta \int_{\theta_1}^{\theta_2} \sum_{j=1}^{n+1} p_j q'_j d\theta = 0.$$

Allerdings kauft man sich dabei gewisse Konsequenzen ein, denn jetzt handelt es sich bei der Variable t nicht mehr um einen der Parameter aus dem Satz der vier invarianten Raum-Zeit-Koordinaten, sondern um eine dynamische Variable, die vom neuen invarianten Parameter θ und insbesondere vom beschriebenen System abhängt.

Gelänge es, der zusätzlichen kanonischen Variablen t einen quantenmechanischen Operator \hat{T} zuzuordnen – das ist genau das, was unter der irreführenden Bezeichnung „Zeit-

Operator“ seit Jahrzehnten verbissen gesucht und teilweise auch gefunden wird¹⁵³, worauf wir gleich noch zurückkommen –, dann lieferten die Regeln der kanonischen Quantisierung für diesen und den Hamiltonoperator \hat{H} des Systems eine Kommutatorrelation der Form

$$[\hat{T}, \hat{H}] = -i\hbar, \quad (3.89)$$

wobei die Reihenfolge der Operatoren im Kommutator und damit das Vorzeichen dadurch bestimmt werden, daß wie oben angedeutet die *negative* Gesamtenergie die kanonisch konjugierte Variable der Zeit ist. Aus dieser Kommutatorrelation würde dann in der Tat gemäß der beschriebenen Prozedur die Unschärferelation

$$\Delta\hat{T} \Delta\hat{H} \geq \frac{\hbar}{2} \quad (3.90)$$

folgen, was auf den ersten Blick eine Energie-Zeit-Unschärferelation zu schein scheint. Das ist jedoch ein Trugschluß, da ein solcher Operator der zur Gesamtenergie kanonisch konjugierten Variablen eben nicht der Operator des universellen Zeitparameters ist; was immer durch einen solchen wie auch immer aufgebauten Operator \hat{T} beschrieben wird, es ist in jedem Fall eine dynamische, vom betrachteten System, von dessen Zustand und dessen Hamiltonoperator abhängige Variable und keinesfalls so etwas wie die absolute Zeit. Damit ist jegliche Interpretation von (3.90) im Sinne einer Unschärferelation von genau diesem universellen Zeitparameter und der Energie unzulässig.

Die Altvorderen waren sich natürlich nahezu von Beginn an der besonderen, nicht unproblematische Rolle der Zeit in der Quantenmechanik bewußt¹⁵⁴. Nachdem Born, Heisenberg und Jordan in ihrer „Dreimännerarbeit“ [113] die Zeit unausgesprochen, aber klar erkennbar als universellen Parameter handhaben, macht das Heisenberg in einem kurz danach veröffentlichten Übersichtsartikel zu diesem Aufsatz zunächst genauso, schreibt aber im letzten Abschnitt erstmals, daß die Zeit in der Quantenmechanik „scheinbar eine andere Rolle spielt und formal anders behandelt wird als die räumlichen Koordinaten“ [401]. Im Jahr darauf ist dann im Rahmen von Heisenbergs Unschärfe-Aufsatz [402] auch von einer Energie-Zeit-Unschärferelation die Rede; dabei spricht der Autor wieder von einer „direkten Erläuterung“ der Gleichungen

$$\mathbf{E}t - \mathbf{tE} = \frac{h}{2\pi i} \quad \text{oder} \quad \mathbf{Jw} - \mathbf{wJ} = \frac{h}{2\pi i}, \quad (3.91)$$

wobei \mathbf{J} eine Wirkungsvariable und \mathbf{w} eine Winkelvariable des betrachteten Systems ist¹⁵⁵. Heisenberg scheint damit an Kommutatoren kanonisch konjugierter Operatoren und folglich an eine zu derjenigen für Ort und Impuls völlig analoge Energie-Zeit-Unschärferelation zu

¹⁵³Siehe zum Beispiel [130], [143], [311],[312], [372] oder [781]. Einen Überblick findet man in [696]. Zur Diskussion der Bedeutung der Zeit in der Quantenmechanik im allgemeinen vergleiche auch die Artikelsammlung [632].

¹⁵⁴Eine ausführliche Darstellung der frühen Überlegungen zur quantenmechanischen Bedeutung der Zeit findet man in [430].

¹⁵⁵Einiges über klassische Wirkungs- und Winkelvariable findet der Leser im vorliegenden Buch in Abschnitt 1.1.2.6.

denken; dann wären allerdings die Vorzeichen in den Kommutatorrelationen (3.91) falsch. Kommutatoren dieser Form, allerdings jeweils mit umgekehrtem und damit demjenigen in (3.89) entsprechenden Vorzeichen, tauchen bereits 1926 bei Dirac auf [195]. Eine genauere Lektüre der entsprechenden Stellen in [402] zeigt jedoch, daß etwas anderes gemeint ist. Heisenberg redet im Zusammenhang mit \mathbf{t} und \mathbf{w} von Anfang an von *Phasen*, denkt dabei an Winkelvariable und offensichtlich zu keiner Zeit an Operatoren¹⁵⁶. Zur Illustration betrachtet er anschließend ein Stern-Gerlach-Experiment, bei dem die Energien der stationären Zustände von Atomen bestimmt werden sollen, die durch ein inhomogenes Magnetfeld fliegen. d sei die durch eine Blende bestimmte Breite des Strahlenbündels aus Atomen, p ihr Impuls in Bewegungsrichtung und E_1 der maximale Energiebetrag, der durch das Magnetfeld an die Atome übertragen werden kann, so daß die Bestimmung der Energieniveaus gerade noch möglich ist. Die maximale ablenkende Kraft ist dann E_1/d , und wenn die Atome während der Zeit t_1 unter dem Einfluß des Magnetfelds stehen, ist die Winkelablenkung des Atomstrahls gegeben durch

$$\alpha = \frac{E_1 t_1}{dp}$$

Da gleichzeitig durch Beugung an der Blende eine Verbreiterung des Strahls eintritt, deren Größenordnung durch die Lage der Minima erster Ordnung und damit durch die Winkelablenkung

$$\sin \alpha \approx \alpha \approx \frac{\lambda_{\text{dB}}}{d}$$

abgeschätzt werden kann, beginnt eine Messung gerade möglich zu werden, wenn

$$\frac{\lambda_{\text{dB}}}{d} \approx \frac{E_1 t_1}{dp}$$

gilt, oder, wegen $\lambda_{\text{dB}} = h/p$,

$$E_1 t_1 \approx h,$$

was wiederum in etwa (3.86) entspricht. Heisenberg landet damit bei der bereits erwähnten Interpretation, wonach die Energie-Zeit-Unschärferelation beschreiben soll, wie Energiemessungen umso ungenauer ausfallen, je kürzer sie dauern. Diese Deutung, die sich bis heute großer Beliebtheit erfreut, ist wie erwähnt nicht stichhaltig, da sie, genau wie Heisenbergs Herleitung, keinerlei allgemeine Gültigkeit beanspruchen kann. Im übrigen scheint Heisenberg die Relationen (3.91) für universell anwendbar zu halten, wovon ebenfalls keine Rede sein kann. Sie lassen sich lediglich für spezielle mehrfach periodische Systeme herleiten [430]. Wird ein solches System mit den n Frequenzen $\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_n$ durch jeweils n Winkelsvariablen w_1, w_2, \dots, w_n und Wirkungsvariablen J_1, J_2, \dots, J_n sowie die Hamiltonfunktion

$$H = \sum_{i=1}^n \nu_i J_i$$

¹⁵⁶Die Verwendung des Begriffs „Phase“ ist hier streng von derjenigen im Zusammenhang mit quantenmechanischen Phasen, also den in den Exponenten der Phasenfaktoren quantenmechanischer Wellenfunktionen auftretenden Winkeln zu unterscheiden.

beschrieben, dann gelten hierfür die Relationen

$$\{w_i, J_j\} = \delta_{ij}, \quad \frac{dw_i}{dt} = \{w_i, H\} = 1, \quad \frac{dJ_i}{dt} = \{J_i, H\} = 0$$

wobei mit den geschweiften Klammern hier die durch

$$\{A, B\} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial A}{\partial w_i} \frac{\partial B}{\partial J_i} - \frac{\partial A}{\partial J_i} \frac{\partial B}{\partial w_i} \right)$$

definierten Poisson-Klammern gemeint sind. Die Umlaufzeiten des Systems sind gegeben durch $\tau_i = w_i/\nu_i$, und es folgt

$$\frac{d\tau_i}{dt} = \{\tau_i, H\} = 1.$$

Ersetzt man nun gemäß den Regeln der kanonischen Quantisierung dynamische Variable durch Operatoren, etwa

$$\begin{aligned} \widehat{W}_i f(\vec{w}) &= w_i f(\vec{w}) \quad \text{für } f \in \mathcal{L}^2([0, 2\pi]^n), \\ \widehat{J}_i f(\vec{w}) &= -i\hbar \frac{\partial f(\vec{w})}{\partial w_i} \quad \text{für } f \in \mathcal{L}^2([0, 2\pi]^n), f \text{ differenzierbar,} \\ &\quad \forall i = 1, 2, \dots, n \quad f(w_1, \dots, w_{i-1}, 0, w_{i+1}, \dots, w_n) \\ &\quad = f(w_1, \dots, w_{i-1}, 2\pi, w_{i+1}, \dots, w_n), \end{aligned}$$

sowie

$$\widehat{\tau}_i = \widehat{w}_i/\nu_i, \quad \widehat{H} = \sum_{i=1}^n \nu_i \widehat{J}_i,$$

und Poisson-Klammern durch Kommutatoren, dann findet man die Kommutatorrelationen

$$[H, \widehat{\tau}_j] = -i\hbar \mathbf{1}, \quad [\widehat{J}_i, \widehat{W}_j] = -i\hbar \delta_{ij} \mathbf{1},$$

was (3.91) entspricht, nun jedoch mit richtigen Vorzeichen. Die Herleitung sollte deutlich gemacht haben, daß solche Kommutatoren nicht geeignet sind, irgendwelche Energie-Zeit-Unschärferelationen im Sinne von Streuungen quantenmechanischer Messungen zu etablieren. Dennoch setzte sich die erwähnte, unkorrekte Interpretation der inversen Abhängigkeit von Zeitdauer und Genauigkeit bei Energiemessungen fürs erste weitgehend durch, wie man etwa bei Heisenberg [406] oder von Neumann [655] nachlesen kann.

Der erste, der sich explizit mit der Frage nach der Möglichkeit oder Unmöglichkeit der Definition eines „Zeitoperators“ beschäftigte, war Pauli. In einer Fußnote seines Wellenmechanik-Artikels im Handbuch der Physik legte er einen Beweis für die Nichtexistenz eines solchen Operators vor [679], [684]. Dabei stellt er zunächst fest, daß man aus der Bewegungsgleichung für Operatoren im Heisenberg-Bild formal eine Kommutator-Relation der Form (3.89) gewinnen kann; ist \widehat{F} ein nicht explizit zeitabhängiger Operator in Gestalt einer beliebigen Funktion der Ortsoperatoren \widehat{q}_j und Impulsoperatoren \widehat{p}_j , dann lautet dessen Bewegungsgleichung

$$i\hbar \frac{d\widehat{F}}{dt} = [\widehat{F}, \widehat{H}],$$

und durch Einsetzen von t für \hat{F} erhält man direkt

$$[\hat{H}, t] = i\hbar \mathbf{1},$$

also tatsächlich etwas, das wie (3.89) aussieht. Diese Relation ist natürlich völlig sinnlos, es sei denn, t wäre ein Operator. Nun begründet Pauli die Nichtexistenz eines solchen Operators damit, daß aus der angenommenen Vertauschungsrelation für Zeit und Energie grundsätzlich ein rein kontinuierliches, sich von $-\infty$ bis $+\infty$ erstreckendes Spektrum des Hamiltonoperators folge, im Widerspruch zu der Tatsache, daß dieser auch diskrete Eigenwerte besitzen kann¹⁵⁷. Um seine Argumentation nachzuvollziehen¹⁵⁸, geht man vom Gegenteil der Behauptung aus, nimmt also an, daß es zu einem beliebigen, natürlich selbstadjungierten Hamiltonoperator \hat{H} einen kanonisch konjugierten selbstadjungierten Zeitoperator \hat{T} mit der Kommutatorrelation

$$[\hat{T}, \hat{H}] = -i\hbar \mathbf{1} \quad (3.92)$$

gibt und betrachtet außerdem die für jedes $\beta \in \mathbb{R}$ durch \hat{T} erzeugte unitäre Transformation

$$\hat{U}(\beta) = e^{-i\beta\hat{T}/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i\beta}{\hbar}\right)^n \hat{T}^n.$$

Für deren Kommutator mit \hat{H} findet man zunächst

$$[\hat{U}(\beta), \hat{H}] = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i\beta}{\hbar}\right)^n \hat{T}^n, \hat{H} \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i\beta}{\hbar}\right)^n [\hat{T}^n, \hat{H}].$$

Mit vollständiger Induktion zeigt man leicht, daß für alle $n \in \mathbb{N}^*$

$$[\hat{T}^n, \hat{H}] = i\hbar n \hat{T}^{n-1}$$

gilt; damit erhält man weiter

$$\begin{aligned} [\hat{U}(\beta), \hat{H}] &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i\beta}{\hbar}\right)^n i\hbar n \hat{T}^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \left(\frac{-i\beta}{\hbar}\right)^n i\hbar \hat{T}^{n-1} \\ &= \beta \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i\beta}{\hbar}\right)^n \hat{T}^n = \beta \hat{U}(\beta). \end{aligned} \quad (3.93)$$

Für einen Eigenzustand ψ_E von \hat{H} zum Eigenwert E folgt damit

$$[\hat{U}(\beta), \hat{H}] \psi_E = \beta \hat{U}(\beta) \psi_E$$

¹⁵⁷und außerdem bei gebundenen Systemen stets von unten beschränkt ist, was Pauli aber gar nicht zusätzlich erwähnt.

¹⁵⁸Siehe hierzu [116] oder [311].

oder

$$\hat{H} \hat{U}(\beta) \psi_E = (E - \beta) \psi_E,$$

das heißt, $\hat{U}(\beta) \psi_E$ ist ein Eigenzustand von \hat{H} zum Eigenwert $E - \beta$. Andererseits ist β eine beliebige reelle Zahl, und das Spektrum von \hat{H} scheint damit tatsächlich ganz \mathbb{R} zu sein, im Widerspruch zur Quantenmechanik.

Auch wenn Paulis Beweis für ein paar Jahrzehnte zum Standardargument gegen Zeitoperatoren wurde – er ist nicht korrekt. Das merkt man erst, wenn man die Definitionsmengen der Operatoren mitberücksichtigt [116], [311], was zur Zeit der Veröffentlichung von Paulis Artikel noch nicht üblich war. Die Definitionsmenge des Kommutators $[\hat{T}, \hat{H}]$ ist

$$\mathcal{D}([\hat{T}, \hat{H}]) = \mathcal{D}(\hat{T} \hat{H}) \cap \mathcal{D}(\hat{H} \hat{T}),$$

und die Vertauschungsrelation (3.92) sollte besser in der Form

$$[\hat{T}, \hat{H}] \subset i\hbar \mathbf{1}$$

geschrieben werden. Damit läßt sich jedoch zeigen, daß kein Eigenvektor ψ_E von \hat{H} Element von $\mathcal{D}([\hat{T}, \hat{H}])$ sein kann. Denn einerseits folgt aus der Annahme, es gebe ein $\psi_E \in \mathcal{D}([\hat{T}, \hat{H}])$, unmittelbar

$$(\psi_E, [\hat{T}, \hat{H}] \psi_E) = (\psi_E, (\hat{T} \hat{H} - \hat{H} \hat{T}) \psi_E) = E (\psi_E, (\hat{T} - \hat{T}) \psi_E) = 0,$$

andererseits gilt jedoch

$$(\psi_E, [\hat{T}, \hat{H}] \psi_E) = i\hbar (\psi_E, \psi_E) = i\hbar \neq 0,$$

ein Widerspruch. Folglich gehört auch kein Eigenvektor von \hat{H} zu $\mathcal{D}([\hat{U}(\beta), \hat{H}])$, und (3.93) und damit der gesamte Beweis sind ungültig.

Damit stellt sich natürlich die Frage nach einem selbstadjungierten, zum Hamiltonoperator kanonisch konjugierten Operator neu; einen solchen Operator „Zeitoperator“ zu nennen, ist jedoch wie erwähnt irreführend. Galapon konnte diese Frage im Jahr 2002 positiv beantworten [311], [312]; er bewies folgenden Sachverhalt [312]:

Zu jedem selbstadjungierten Hamiltonoperator \hat{H} ,

1. der ein nach unten beschränktes reines Punktspektrum mit Eigenwerten $-\infty < E_1 < E_2 < E_3 < \dots$ besitzt,
2. der g -fach entarte Energieniveaus hat mit $1 \leq g < \infty$,
3. dessen Eigenwerte die Bedingung $\sum_{n=1}^{\infty} 1/E_n^2 < \infty$ erfüllen und
4. dessen Eigenvektoren ein vollständiges Orthonormalsystem des gesamten Hilbertraums \mathcal{H} bilden,

existiert ein für das System charakteristischer, kanonisch konjugierter selbstadjungierter Operator \hat{T} , das heißt, für \hat{T} gilt in einer dichten Teilmenge von $\mathcal{D}(\hat{T}\hat{H}) \cap \mathcal{D}(\hat{H}\hat{T})$

$$[\hat{T}, \hat{H}] \subset i\hbar \mathbf{1},$$

wobei $\mathbf{1}$ der Einheitsoperator von \mathcal{H} ist. Außerdem erzeugt \hat{T} eine Klasse von überabzählbar unendlich vielen weiteren, zum selben Hamiltonoperator auf der selben dichten echten Teilmenge von \mathcal{H} kanonisch konjugierten Operatoren.

Galapon führt den Beweis konstruktiv [312], das heißt, er gibt diese Operatoren explizit an. Für ein vollständiges Orthonormalsystem $\{|s, r\rangle \mid r = 1, 2, \dots, g; s = 1, 2, \dots\}$ aus Eigenvektoren von \hat{H} ist der Operator

$$\hat{T} = \sum_{\substack{s, s'=1 \\ s \neq s'}}^{\infty} \sum_{\substack{r, r'=1 \\ r \neq r'}}^{\infty} \frac{i\hbar}{E_s - E_{s'}} |s, r\rangle \langle r', s'|$$

auf

$$\mathcal{D}(\hat{T}) = \left\{ |\varphi\rangle = \sum_{s=1}^N \sum_{r=1}^g c_{s,r} |s, r\rangle \mid |c_{s,r}| < \infty, N < \infty \right\}$$

wesentlich selbstadjungiert und auf

$$\mathcal{D} = \left\{ |\xi\rangle = \sum_{j=1}^{2N-1} \sum_{i=j+1}^{2N} \sum_{k=1}^g a_{i,j,k} (|i, k\rangle - |j, k\rangle) \mid a_{i,j,k} \in \mathbb{C}, 1 \leq N < \infty \right\} \subsetneq \mathcal{D}(\hat{T})$$

zu \hat{H} kanonisch konjugiert. Außerdem ist für jede Menge

$$\alpha = \{\alpha_{s,r} \mid r = 1, 2, \dots, g; s = 1, 2, \dots\} \subset \mathbb{R}$$

mit $|\alpha_{s,r}| < A < \infty$ für ein $A \in \mathbb{R}$ und alle s und r der Operator

$$\hat{T}(\alpha) = \hat{T} + \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{r=1}^g \alpha_{s,r} |s, r\rangle \langle s, r|$$

ebenfalls auf $\mathcal{D}(\hat{T})$ wesentlich selbstadjungiert und auf \mathcal{D} zu \hat{H} kanonisch konjugiert.

Auch wenn diese Operatoren von ihrem Entdecker als Zeitoperatoren bezeichnet werden, handelt es sich dennoch dabei *nicht* um Operatoren des universellen Zeitparameters t ; das wird von Galapon natürlich auch nirgends behauptet. Damit sind die Unschärferelationen für \hat{T} und \hat{H} beziehungsweise für $\hat{T}(\alpha)$ und \hat{H} , die sich vermöge der entsprechenden Kommutator-Relationen herleiten lassen, ebenfalls *keine Energie-Zeit-Unschärferelationen*. Als generelles Fazit darf festgestellt werden, daß es zwar sehr wohl möglich ist, das formale Konzept der kanonischen Konjugiertheit von t und $-H$ aus der klassischen Mechanik in die Quantenmechanik zu übertragen, daß damit aber die Tatsache, daß es in letzterer keinen Operator der Zeit gibt, in keiner Weise tangiert wird und zu den Unschärferelationen für Ort und Impuls analoge universelle Energie-Zeit-Unschärferelationen ein Phantasieprodukt sind und bleiben.

3.9 Erste Interpretationen der Quantenmechanik

Ein physikalisches Theoriegebäude besteht niemals nur aus dem formalen Apparat und den rein quantitativen Resultaten bei seiner Anwendung, sondern weist immer auch einen semantischen Anteil auf – und spätestens hier beginnen gewöhnlich die Diskussionen. Das gilt mehr als irgendwo sonst auch für die Quantenmechanik. Herrscht über die Wahrscheinlichkeitsdeutung allenthalben Einigkeit, so kann bei der Frage, ob und wenn ja inwiefern es darüberhinausgehend sinnvolle Interpretationen quantenmechanischer Begriffe gibt, davon keine Rede sein. Wie sich bald zeigte, sind höchst unterschiedliche, sogar sich widersprechende Vorstellungen der Realität mit dem Formalismus der Quantenmechanik ohne weiteres in Einklang zu bringen¹⁵⁹. Nach und nach wurden daher auch entsprechend unterschiedliche Vorschläge für solche Interpretationen veröffentlicht, die insgesamt nur zwei Gemeinsamkeiten aufweisen, soweit es sich dabei um vernünftige Vorschläge handelt¹⁶⁰. Erstens ist dabei stets auch explizit nicht mehr ausschließlich die Rede von rein physikalischen, sondern jeweils zusätzlich auch von metaphysischen Sachverhalten¹⁶¹. Zweitens muß jede solche weitergehende Interpreta-

¹⁵⁹Das ist wohl einer der Gründe dafür, daß die Quantenmechanik auch außerhalb der physikalischen Fachliteratur verbreitet Erwähnung findet, wobei gelegentlich Tendenzen zum naturalistischen Fehlschluß anzutreffen sind. Man erkennt das beispielsweise an der teilweise eher negativ, teilweise auch eher positiv eingeschätzten gesellschaftlichen Bedeutung, die ihr gelegentlich innerhalb der Sozialphilosophie zugemessen wird. So betrachtet etwa Martin Heidegger nicht nur die klassische Physik, sondern auch die Quantenmechanik als weiteren Beitrag zur „Seinsvergessenheit“, wie er seine Metaphysikkritik häufig schlagwortartig umschreibt [397], [398]. Auch Theodor W. Adorno und Max Horkheimer [444] sowie Herbert Marcuse [583] sehen den von ihnen zu Recht angemahnten Prozeß der Ausweitung der Naturbeherrschung zu einer Beherrschung des Menschen durch Quantenmechanik und moderne Physik überhaupt weiter gestärkt. Dagegen bewertet Ernst Bloch letztere grundsätzlich positiv, wobei er allerdings beklagt, daß die sich daraus ergebenden Chancen gesellschaftlicher Kritik und Emanzipation nicht genützt würden [74]. Eine ausführliche Darstellung der Rezeption der Quantenmechanik in der nichtphysikalischen Literatur stammt von Elisabeth Emter [258].

¹⁶⁰Unvernünftige Vorschläge gibt es massenhaft, daran hat sich natürlich auch heutzutage nichts geändert. Die Quantenmechanik liefert traditionell unerschöpfliche Anregungen für pseudowissenschaftliche Phantasien. Die prominentesten Beispiele hierfür sind die zeitweise sehr populären Beiträge von Fritjof Capra [146], [147] und Gary Zukav [962]. Auch die Anthroposophie mit ihrem verklärt-idealistischen Weltbild bedient sich hier gleichermaßen ausgiebig wie inkompetent [363], [893]. In jüngerer Zeit wird von Harald Atmanspacher, Harald Walach und Hartmann Römer etwas verbreitet, was sie „verallgemeinerte“ oder „schwache Quantentheorie“ nennen und womit sie übersinnliche, parapsychologische und sonstige „grenzwissenschaftliche“ Phänomene zu erklären behaupten [19]. Erreicht werden soll dieses Ziel durch Anwendung quantenmechanischer Begriffe wie Komplementarität, Verschränkung und dergleichen auf allgemeine, auch nichtphysikalische Systeme, insbesondere auf solche, die durch Messungen verändert werden und bei denen die Reihenfolge unterschiedlicher Messungen eine Rolle spielt. Das Unternehmen gelangt – wenig erstaunlich – nicht über vage Spekulationen hinaus, weist einen sehr diffusen mathematischen Unterbau auf, liefert keine wissenschaftlich überprüfbare Aussagen und ist nichts anderes als Esoterik. Daß sich ein derart renommierter Kollege und Autor etablierter Lehrbücher (man greife zu [442], [740] oder [741]) wie Römer auf so etwas einläßt, ist schon einigermaßen erstaunlich.

¹⁶¹Implizit ist natürlich *immer* auch Metaphysik mit von der Partie, streng nach der Devise, daß man nie nicht philosophieren kann. Das gilt insbesondere und trotz gegenteiliger Beteuerungen auch für beliebige metaphysikfeindliche positivistische Weltanschauungsverfinsterungen. Genauer gesagt steht man daher vor der Wahl zwischen einer minimalistischen Metaphysik, wie sie eine auf die Wahrscheinlichkeitsdeutung reduzierte Quantenmechanik darstellt, und etwas, was darüber hinausgeht.

tion, will sie nicht insgeheim die Quantenmechanik durch eine andere Theorie ersetzen, eine Mindestanforderung erfüllen, die darin besteht, sicherzustellen, daß dieselben physikalischen Ergebnisse produziert werden wie diejenigen, die man im Rahmen der statistischen Interpretation erhält, da diese empirisch vollkommen abgesichert sind. Das ist einfach eine andere Formulierung der Aussage, letztere bilde eine Minimalinterpretation der Quantenmechanik¹⁶². Eine genauere Darstellung der vielfältigen philosophischen Auffassungen, die man hier findet, würde den für das vorliegende Buch gesteckten Rahmen bei weitem überschreiten und selbst Buchform annehmen, und das auch dann noch, wenn man sich dabei auf die historischen Anfänge beschränkt, die hier im Mittelpunkt der Betrachtung stehen. Deswegen soll ein ganz kurzer Überblick genügen¹⁶³. Wir beginnen dabei mit einer Diskussion der beiden gegensätzlichen Grundideen, welche – nicht nur aus historischer Sicht, sondern auch heute noch – die Basis derjenigen Deutungsversuche der Quantenmechanik bilden, die im wesentlichen ernstzunehmen sind¹⁶⁴.

3.9.1 Die Ensemble-Interpretation

Die einfachste Möglichkeit einer naturphilosophischen Erweiterung der Wahrscheinlichkeitsdeutung besteht natürlich darin, *keine* Erweiterung vorzunehmen und sie bereits als *vollständige Interpretation* der Quantenmechanik anzusehen. Insbesondere wird dann nur dem Betragsquadrat quantenmechanischer Wellenfunktionen, nicht aber diesen selbst eine physikalische Bedeutung zuerkannt. Das reicht zumindest für den Bedarf des praktisch arbeitenden Experimentalphysikers weitgehend aus¹⁶⁵. Weil hierbei lediglich Voraussagen über Meßergebnisse, aber darüberhinaus keinerlei Aussagen über die beschriebenen physikalischen Systeme selbst möglich sind, führt das bei konsequenter Vermeidung weitergehender Deutungen des verwendeten Formalismus auf eine *streng positivistische Sichtweise der Physik*, das heißt auf

¹⁶²Gelegentlich wird dieser unstrittige Sachverhalt mit dem Begriff *Kopenhagener Deutung der Quantenmechanik* verwechselt. Diese Gleichsetzung ist abwegig, wie im zugehörigen Abschnitt 3.9.3 deutlich werden wird.

¹⁶³Ausführliche wissenschaftshistorische Darstellungen der Entwicklung der gängigsten Interpretationen der Quantenmechanik liefern, wenn auch nicht sehr aktuell, [463] und insbesondere [464]; neuere Darstellungen sind beispielsweise [411], [925] und [926]. Kurze Beschreibungen der wichtigsten Interpretationen in Übersichtsform stehen in [355]. Die wichtigsten Originalarbeiten der Anfangsphase findet man zusammen mit kurzen und präzisen Darstellung der Standardinterpretationen in [42]. Ausführlicher, allerdings deutlich subjektiv gefärbt ist [806] beziehungsweise [807]. Die aus einer Studium-Generale-Vortragsreihe an der Universität Konstanz entstandene Aufsatzsammlung [22] ist zum Einlesen in die Thematik sehr zu empfehlen. Im übrigen muß zumindest im Prinzip zwischen unterschiedlichen *Formulierungen*, also mathematischen Ausarbeitungen, und *Interpretationen*, also erkenntnistheoretischen Deutungen der Theorie unterschieden werden, auch wenn eine Trennung hier nicht immer strikt möglich ist. Einen kurzen Überblick mit Andeutungen der gängigsten Formulierungen liefert [847], der Versuch einer Synthese dieser beiden Perspektiven steht in [25].

¹⁶⁴Es gibt natürlich auch Varianten, die von diesen Grundideen abweichen; auch hierüber informiert kurz und präzise [355].

¹⁶⁵Auch wenn das abwertend klingt, ist es natürlich nicht so gemeint. Es wird damit lediglich die sinnvolle Arbeitsteilung in experimentelle, theoretische und mathematische Physik unterstrichen.

eine Haltung, die der Physik abgesehen von eben der (statistischen) Voraussage von Meßresultaten keinerlei Aussagekraft über die Natur zubilligt.

Eine naheliegende Konsequenz dieser Auffassung führt auf die sogenannte *Ensemble-Interpretation* der Quantenmechanik, die sich nur ganz gering von einer streng minimalistisch-statistischen Sichtweise unterscheidet. Sie geht, was ihr frühestes öffentlichkeitswirksames Erscheinen betrifft, auf einen Vorschlag von Einstein während der Diskussion nach dem den Abschluß der fünften Solvay-Konferenz im Oktober 1927 bildenden Vortrag Niels Bohrs zurück; weniger bekannt ist, daß Bohr, dessen Name selten damit in Verbindung gebracht wird, diese Ansicht in ganz wesentlichen Punkten teilte¹⁶⁶. Die Ensemble-Interpretation fand schnell Anhänger, interessanterweise gerade auch in der damaligen Sowjetunion, wo linientreue Physiker hofften, auf dieser Grundlage die Quantenmechanik antipositivistisch, antiidealistisch und dafür vermeintlich dialektisch-materialistisch gestalten zu können. In diesem Zusammenhang ist insbesondere der Name Dmitri I. Blochinzew zu nennen, dessen bekanntes Lehrbuch [75] auch jenseits des damaligen Ostblocks mit zur Verbreitung der Ensemble-Interpretation beigetragen hat¹⁶⁷. Weitere bedeutende Vertreter der Ensemble-Interpretation sind unter anderem Willis E. Lamb [525], Günther Ludwig [564] - [568]¹⁶⁸ und Leslie E. Ballentine [35], [36]¹⁶⁹. Ausgangspunkt ist dabei die Feststellung, daß sich Wahrscheinlichkeitsaussagen stets auf sehr häufig unter identischen Bedingungen wiederholt stattfindende Ereignisse beziehen müssen und niemals auf Einzelereignisse. Die zentrale Idee der Ensemble-Interpretation ist folglich das Postulat, die Wellenfunktion ψ eines Systems beschreibe ein statistisches Ensemble sehr vieler identischer solcher Systeme¹⁷⁰, keineswegs jedoch ein Einzelsystem. Entsprechend wird

¹⁶⁶Hierauf wird noch zurückzukommen sein.

¹⁶⁷Blochinzews Interpretation wurde mit nur geringen Abweichungen von K. V. Nikolskij praktisch vorweggenommen [658].

¹⁶⁸Ludwig kleidete seine Version der Ensemble-Interpretation in eine sehr aufwendige axiomatische Darstellung der Quantenmechanik, im Rahmen derer Begriffe wie „Präparations- und Registrierungsapparaturen“, „Messungen“, „Zustände“ und dergleichen aus sehr allgemeinen erkenntnistheoretischen Annahmen abgeleitet werden [564], [567], [568]. Man gerät dabei allerdings schnell in Gefahr, sich den Blick auf zumindest merkwürdige Konsequenzen verstellen zu lassen. Denn die Ludwigsche Axiomatik postuliert die Existenz zweier strikt voneinander getrennter Welten, derjenigen der Präparationen und derjenigen der Messungen, und die Quantenmechanik erhält lediglich die Aufgabe, dazwischen zu vermitteln. Sie soll folglich nur für den Bereich zwischen diesen beiden Welten zuständig sein. Diese Variante handelt sich damit unvermeidlicherweise und zusätzlich zu den Schwierigkeiten der Ensemble-Interpretation solche der im nächsten Abschnitt betrachteten Kopenhagener Deutung der Quantenmechanik ein. Eine ähnliche Auffassung, allerdings ohne vergleichbaren axiomatischen Hintergrund, vertritt V. A. Fock [300].

¹⁶⁹Einen ausführlichen Überblick unterschiedlicher Varianten der Ensemble-Interpretation findet man bei Home und Whitaker [441], die diesen Begriff allerdings in verallgemeinerter Weise verwenden, wodurch auch Theorien mitberücksichtigt werden, die nicht in obige Charakterisierung passen.

¹⁷⁰Üblicherweise ist hier von Ensembles *identisch präparierter Systeme* die Rede, welche durch Wellenfunktionen beschrieben werden sollen. Häufig wird dabei betont, Präparationen seien etwas anderes als Messungen, womit man sich bereits, womöglich ohne es zu bemerken, auf Ludwigschem Terrain befindet. Von einem konventionellen quantenmechanischen Standpunkt aus betrachtet sind ideale, vollständige Präparationen natürlich nichts anderes als Messungen, und auch unvollständige Präparationen kann man im Rahmen der Ignoranzinterpretation statistischer Operatoren als Messungen interpretieren, über deren Resultate nur unvollständige Informationen vorliegen.

in dieser Interpretation die Beschreibung einzelner, das heißt *individueller* Systeme als prinzipiell unmöglich ausgeschlossen¹⁷¹. Damit übernimmt die Ensemble-Interpretation wie jede vernünftige Interpretation der Quantenmechanik die Wahrscheinlichkeitsdeutung komplett, erklärt sie jedoch gleichzeitig als so ziemlich alles, was es interpretierenderweise zu sagen gibt, ergänzt lediglich um das Postulat der Wellenfunktionen als Beschreibung von Ensembles identischer Systeme¹⁷². Das soll bereits den vollständigen metaphysischen Überbau der Quantenmechanik darstellen, eine weitergehende Interpretation wird nicht geboten¹⁷³.

3.9.2 Der Kollaps der Wellenfunktion

Andere Interpretationen vertreten das genaue Gegenteil davon und postulieren, daß quantenmechanische Wellenfunktionen stets *einzelne, individuelle physikalische Systeme* beschreiben. Gleichzeitig wird natürlich an der Wahrscheinlichkeitsdeutung der Wellenfunktionen festgehalten, und das hat unabhängig von der präzisen Ausformulierung der jeweiligen Interpretationen drastische Folgen. Denn während der Zustand eines quantenmechanischen Systems vor der Messung einer physikalischen Größe die Form einer Superposition aus unterschiedlichen Eigenzuständen zu unterschiedlichen Eigenwerten der Größe und damit unterschiedlichen möglichen Meßwerten aufweisen kann, befindet sich das System unmittelbar nach der Messung in genau einem Eigenzustand der Größe zu genau demjenigen Eigenwert derselben, der als Meßresultat herausgekommen ist. Eine unmittelbare Wiederholung derselben Messung an diesem System liefert folglich mit hundertprozentiger Wahrscheinlichkeit wieder genau dasselbe Meßresultat¹⁷⁴. Wenn nun einerseits Wellenfunktionen in Gestalt ihrer Betragsquadrate Wahrscheinlichkeitsdichten und damit Wahrscheinlichkeitsverteilungen liefern, und andererseits die Wahrscheinlichkeit, gerade den gemessenen Wert zu finden, für die erste Messung im allgemeinen echt kleiner als 1, vor der zweiten Messung jedoch exakt gleich 1 ist, muß sich die Wellenfunktion des Systems bei der Messung *abrupt und unstetig verändert haben*. Wir haben es hier mit dem berühmten *Kollaps der Wellenfunktion* zu tun, der die Diskussionen über physikalische und philosophische Fragen der Quantenmechanik wohl mehr als alles andere angeheizt hat und das auch weiterhin tut¹⁷⁵. Man spricht auch von der *Reduktion*

¹⁷¹Natürlich hängen die Details aller denkbaren Ausführungen der Ensemble-Interpretation in fundamentaler Weise von der verwendeten Auffassung des Wahrscheinlichkeitsbegriffs ab. Details würden hier zu weit führen und gehören auch nicht mehr zur Anfangsphase der neueren Quantenmechanik. Näheres dazu findet man in [441].

¹⁷²Die sehr häufig anzutreffende Behauptung, die Wahrscheinlichkeitsdeutung impliziere diese Interpretation der Wellenfunktionen bereits automatisch, *trifft nicht zu*. Wir kommen darauf zurück.

¹⁷³Es wurde vorgeschlagen, die Ensemble-Interpretation aufgrund ihrer relativen Einfachheit im Vergleich zu anderen Interpretationen zur Grundlage der Einführung in die Quantenmechanik im Rahmen der gymnasialen Physikdidaktik zu machen [932], [933]. Die weiter unten aufgeführten Kritikpunkte lassen das jedoch fragwürdig erscheinen. Ausführliches zur Quantenmechanik in der Oberstufe des Gymnasiums steht in [897].

¹⁷⁴Die Vorstellung einer unmittelbaren, also instantanen Wiederholung derselben Messung ist natürlich eine Idealisierung und als Gedankenexperiment zu verstehen, mit dem die nun folgenden Aussagen plausibel gemacht werden können.

¹⁷⁵Auf diese Konsequenz aus der Interpretation quantenmechanischer Wellenfunktionen als Beschreibung individueller Systeme wurde erstmals von Einstein hingewiesen; er tat dies bei der bereits erwähnten Dis-

der Wellenfunktion; beide Bezeichnungen zielen vereinfacht gesagt darauf ab, daß ein vor der Messung aus Eigenzuständen der gemessenen Größe und „Zeigerzuständen“ der Meßapparatur aufgebauter verschränkter Superpositionszustand der Form

$$\psi_{\text{vorher}} = \sum_n a_n u_n \otimes \varphi_n$$

nach der Messung auf die Gestalt

$$\psi_{\text{nachher}} = u_j \otimes \varphi_j,$$

das heißt auf einen einzelnen Summanden des Ausgangszustands zusammenschnürt (wobei $|a_j|^2$ die Wahrscheinlichkeit ist, daß es gerade dieser und damit der Eigenwert mit Index j das gefundene Meßresultat ist). Diese Reduktion der Wellenfunktion bleibt nur dann aus, wenn sich das System bereits vor der Messung in einem Eigenzustand der gemessenen Größe befindet. Dabei wird ein grundlegendes quantenmechanisches Postulat vorausgesetzt, das gelegentlich als *Eigenvalue-Eigenvector-Link* bezeichnet wird und besagt, daß bei der Messung einer physikalische Größe an einem System das Meßergebnis nur dann mit Gewißheit vorausgesagt werden kann, wenn sich das System in einem Eigenzustand des die gemessene Größe repräsentierenden selbstadjungierten Operators befindet und das Meßergebnis dann stets ein Element des Spektrums dieses Operators ist.

Die Frage ist nun, ob es sich beim Kollaps der Wellenfunktion um einen dynamischen Prozeß handelt. Da die Schrödingergleichung eine Differentialgleichung ist und folglich stetige Lösungen hat, kann sie diesen Vorgang nicht beschreiben; wenn er real ist, dann gibt es in der Quantenmechanik zwei unterschiedliche Dynamiken, nach denen sich physikalische Systeme entwickeln, nämlich eine stetige, unitäre, durch die Schrödingergleichung beschriebene *Dynamik I*, die abläuft, solange Systeme von Meßprozessen unbehelligt bleiben, und eine unstetige, nichtunitäre *Dynamik II*, die bei Meßprozessen gültig ist¹⁷⁶. Abgesehen davon, daß die Existenz zweier unterschiedlicher Dynamiken innerhalb einer Theorie für sich allein schon nach einer Erklärung verlangt, ist es eine völlig offene Frage, nach welchen Gesetzmäßigkeiten die zweite Dynamik ablaufen soll, wenn es sie überhaupt gibt. Genauso unklar ist der Prozeß, der zur Auswahl des nach der Messung tatsächlich realisierten Meßwertes aus der Menge der

kussion im Anschluß eines Vortrags von Niels Bohr bei der fünften Solvay-Konferenz 1927. Der konkrete Terminus „Kollaps der Wellenfunktion“ tauchte dabei allerdings noch nicht auf; dieser wurde kurz danach von Heisenberg eingeführt, erstmals wohl im selben Jahr in seinem Unschärfe-Aufsatz [402]. Siehe hierzu auch Abschnitt 3.9.3.2. Häufig hört man auch vom „Kollaps des Wellenpakets“, was auf den in den Abschnitten 3.4.4 und 3.4.5 beschriebenen vergeblichen Versuch deutet, lokalisierte Teilchen durch Wellenpakete zu beschreiben. Einsteins Absicht war es im übrigen natürlich gerade nicht, die Vorstellung des Kollapses der Wellenfunktion in der Quantenmechanik zu etablieren, sondern vielmehr mit Hilfe dieser aus seiner Sicht absurden Vorstellung die Unvollständigkeit der Quantenmechanik nachzuweisen.

¹⁷⁶Die Ausdrücke „Dynamik I“ und „Dynamik II“ stammen von Jürgen Audretsch [23]. John von Neumann spricht dabei vom Prozeß 2 beziehungsweise Prozeß 1 [655], verwendet also gerade die umgekehrte Nummerierung. Das geht auf die anfängliche irriige Vorstellung zurück, in der Mikrophysik entwickle sich alles in Quantensprüngen, was die diskontinuierliche Zeitentwicklung zur eigentlichen quantenmechanischen Dynamik erhoben hätte.

möglichen Meßwerte führt. Diese beiden Sachverhalte werden gemeinsam als das *Problem des quantenmechanischen Meßprozesses* bezeichnet¹⁷⁷. Sehr häufig wird bereits die Tatsache selbst, daß sich der Kollaps der Wellenfunktion aus der Auffassung, Wellenfunktionen beschreiben einzelne, individuelle quantenmechanische Systeme, notwendigerweise ergibt, zu diesem Meßproblem gerechnet oder sogar mit demselben identifiziert, da ein solcher Kollaps die vertraute Vorstellung eines stetigen, dynamisch kausalen Ablaufs physikalischer Prozesse auf das empfindlichste untergräbt; eine solche Aussage ist jedoch im Gegensatz zu der zuvor beschriebenen, eigentlichen Bedeutung des Begriffs „quantenmechanisches Meßproblem“ bereits nicht mehr physikalischer Natur, sondern bereits Bestandteil einer speziellen Interpretationsweise der Quantenmechanik.

3.9.3 Die Kopenhagener Deutung

Als bedeutendste Variante derjenigen Klasse von Interpretationen, die auf der Vorstellung des Kollapses der Wellenfunktion aufbauen, und häufig sogar als die *orthodoxe Interpretation* wird sehr verbreitet die sogenannte *Kopenhagener Deutung* der Quantenmechanik bezeichnet¹⁷⁸, und ein erheblicher Anteil der aktiven Physikerinnen und Physiker dürfte sich wohl als Anhänger derselben bezeichnen. Beide Positionen sind problematisch bis unhaltbar. Zum einen wird dieser Begriff sehr oft mit einer gewissen pragmatischen Haltung verwechselt, welche sich mit der Wahrscheinlichkeitsinterpretation, ergänzt durch eine unhinterfragte bis diffuse Vorstellung der Reduktion von Wellenfunktionen begnügt, was wohl die weitverbreitete vermeintliche Akzeptanz erklärt¹⁷⁹. Andererseits ist es völlig unmöglich, dem Ausdruck „Kopenhagener Deutung“ eine einheitliche metaphysische Position zuzuordnen. Es gibt mindestens drei unterschiedliche Varianten, und die Ausführungen der Protagonisten der Kopenhagener Fraktion widersprechen sich teilweise diametral, was schon daran erkennbar ist, daß sich sowohl Anhänger der Ensemble-Interpretation als auch solche der Vorstellung des Kollapses der Wellenfunktion unter ihnen befinden – zwei Konzepte, die sich, wie wir gesehen haben, gegenseitig vollkommen ausschließen¹⁸⁰. Wir werden hier folglich, anders als vielfach üblich, von der Kopenhagener Deutung nur im Sinne eines historischen Sammelbegriffes sprechen.

¹⁷⁷Bis jetzt ist dieses Problem nicht wirklich gelöst. Auch die bereits erwähnte Theorie der Dekohärenz leistet das entgegen verbreiteter anderslautender Behauptungen nicht; mit ihr wird zwar verständlich, warum wir bei Meßprozessen einen *scheinbaren Kollaps* der Wellenfunktionen wahrnehmen, die vollständige Beschreibung von Meßprozessen macht jedoch weitergehende Annahmen erforderlich. Insbesondere bleiben der Mechanismus der Auswahl der tatsächlich realisierten Meßergebnisse und deren stochastische Verteilung dabei weiter unklar. Wir kommen in Kapitel 4 darauf zurück. Das Meßproblem wird in vielen einschlägigen Lehrbüchern beschrieben, außerdem sind wichtige historische Originalarbeiten in [924] abgedruckt.

¹⁷⁸Der Ausdruck „Kopenhagener Deutung“ wurde wohl erstmals 1955 von Heisenberg verwendet [404].

¹⁷⁹Berthold-Georg Englert, Ray Streater und Anton Zeilinger, drei gewichtige Exemplare derjenigen Physiker-gattung, die sich selbst zur Anhängerschaft der Kopenhagener Deutung zählt, sind hiervon ausdrücklich auszunehmen. Sie wissen stets sehr genau, worüber sie schreiben, wenn dabei auch wieder jeweils ganz eigene „Kopenhagener Deutungen“ herauskommen und man (so wie ich) im Hinblick auf die dabei vertretenen philosophischen Haltungen zur Quantenmechanik sehr wohl anderer Meinung sein kann.

¹⁸⁰Eine historisch-kritische Darstellung der entsprechenden Originaldiskussionen wurde von Mara Beller veröffentlicht [52]. Sie demonstriert dabei besonders eindrücklich, daß die Frühphase der Entwicklung und Deutung der neueren Quantenmechanik alles andere als ein geradliniger kontinuierlicher Prozeß war.

Der Name der dänischen Hauptstadt verdankt seinen Auftritt in diesem Zusammenhang im übrigen der Tatsache, daß ein Großteil der wesentlichen Beiträge zur Kopenhagener Deutung trotz ihrer völlig unterschiedlichen Varianten am 1921 dort von Niels Bohr gegründeten *Universitetes Institut for teoretisk Fysik Kobenhavn* erbracht wurden, wo neben Bohr auch Heisenberg und Pauli tätig waren. Dieses Institut bot insbesondere auch in politisch schwieriger Zeit eine nahezu einzigartige Möglichkeit, Physiker aus unterschiedlichen Ländern zu formellen und informellen Treffen zusammenzuführen¹⁸¹. Seine Bedeutung für die Entwicklung der neueren Quantenmechanik ist kaum zu überschätzen.

3.9.3.1 Niels Bohr

Der bedeutendste Vertreter der Kopenhagener Deutung überhaupt, so hört man häufig, sei natürlich Niels Bohr. Das trifft zu – allerdings nur für seine eigene und damit eine sehr spezielle Version, die Quantenmechanik zu interpretieren¹⁸². Zweifellos ist Bohrs Einfluß auf die philosophische Auslegung der Quantenmechanik sehr weitgehend, was aber keineswegs bedeutet, daß seine Auffassung der unumgehbare Maßstab für alle anderen wäre. Eine etwas ausführlichere Darstellung dieser Interpretation dürfte daher durchaus dazu geeignet sein, einige verbreitete Mißverständnisse aufzuklären.

Wir beginnen gleich mit einem besonders schwerwiegenden Exemplar davon; es geht dabei um Bohrs Haltung zur quantenmechanischen Wellenfunktion eines physikalischen Systems. In allen seinen Äußerungen hierzu ist stets erkennbar, daß er genau wie Einstein eine rein statistische Deutung der Wellenfunktion auf der Basis der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation vertrat, also ein Anhänger der Ensemble-Interpretation war. Konsequenterweise lehnte Bohr die Vorstellung von in irgendeiner Art unbestimmten physikalischen Größen, die erst bei Messungen konkrete Werte annehmen, strikt ab. Insbesondere kommt in seiner Interpretation, wiederum genau wie bei Einstein, *kein Kollaps der Wellenfunktion vor*¹⁸³. Das ist

¹⁸¹Werner Eisners kurze und dennoch präzise Darstellung des „Kopenhagener Geistes“ [255], der nicht nur die physikalischen Sachverhalte – der Begriff wurde in diesem Sinne 1930 durch Heisenberg geprägt und erfährt seither normalerweise auch eher diese Verwendung – sondern auch die Kopenhagener Protagonisten selbst durchwehte, beschreibt diese besondere Arbeitsatmosphäre und ist eine beispielhafte Verbindung soziologischer und physikalischer Betrachtungen.

¹⁸²Bohr trug seine Auslegung der Quantenmechanik zuerst im September 1927 auf einer Tagung in Como vor, wobei er auch den Begriff der Komplementarität erstmals verwendete. Die früheste publizierte Fassung findet sich in [89], danach ist sie auf viele Arbeiten verstreut. Einen guten Überblick hierzu liefern die Aufsatzsammlungen [91] (diese enthält auch eine mehrfach überarbeitete und ergänzte Version des Vortrags von Como), [94] und [95]. Klaus-Michael Meyer-Abichs Monographie [605] liefert eine geschlossene Darstellung der Bohrschen Naturphilosophie, auch im Hinblick auf ihre mit der Zeit eintretenden Veränderungen. Carsten Held, der eine sehr präzise Analyse der langjährigen Diskussionen zwischen Bohr und Einstein zur Interpretation der Quantenmechanik vorgelegt hat [411], liefert dort eine ähnlich ausführlich Darstellung. Für eine erste und schnelle Orientierung greife man zu [414], [625] oder [766].

¹⁸³Dieser Sachverhalt trat, vermutlich unter dem Einfluß Heisenbergs, erstaunlich wenig in das Bewußtsein der physikalisch gebildeten Öffentlichkeit. Bei ausgewiesenen Bohr-Spezialisten wie etwa Meyer-Abich in dessen eben erwähnter Monographie zum Bohrschen Komplementaritätsbegriff von 1965 war die Sache noch

jedoch nur ein wenn auch wichtiges Detail, und um Bohrs Auffassung der Quantenmechanik wirklich zu erfassen, müssen wir weiter ausholen.

Bohrs Variante der Kopenhagener Deutung läßt sich auf der Grundlage einer wesentlich statistischen Interpretation grob auf vier Thesen zusammenfassen:

- Unverzichtbarkeit der klassischen Physik

Die klassischen Begriffe bleiben in der Quantenmechanik unverzichtbar, da quantenmechanische Messungen Meßgeräte erfordern, die in klassischen Begriffen beschrieben werden müssen, sofern man überhaupt über die Meßresultate reden können und sie interpretieren will – was ebenfalls mit Hilfe der Sprache der klassischen Physik erfolgen muß.

- Unkontrollierbarkeit der Wechselwirkungen bei Meßprozessen

Bei quantenmechanischen Messungen kommt es zu prinzipiell nicht kontrollier- und beschreibbaren Wechselwirkungen zwischen dem Objekt, an dem, und dem Meßgerät, mit dem gemessen wird. Diese führen zu irreversiblen Veränderungen am Gesamtsystem, wodurch Meßresultate ablesbar werden, aber gleichzeitig zu einer Individualität quantenmechanischer Prozesse, was eine deterministische Voraussage derselben nicht zuläßt.

- Ganzheitlichkeit quantenmechanischer Phänomene

Quantenmechanische Beschreibungen müssen immer das gemessene physikalische Objekt, das verwendete Meßgerät und die genaue Konfiguration des Experiments als untrennbares Ganzes betrachten; ändert man Versuchsaufbau oder -durchführung, so hat man es mit einem anderen System zu tun.

- Komplementarität

Die vollständige Beschreibung von Beobachtungen an quantenmechanischen Systemen kann nicht in einem begrifflich einheitlichen Bild zusammengefaßt werden. Erst die Gesamtheit der sich aus klassischer Sicht im allgemeinen gegenseitig widersprechenden Beobachtungsergebnisse liefert die vollständigen möglichen Informationen über quantenmechanische Objekte.

Das klingt sehr viel harmloser, als es tatsächlich ist. Denn diese Auffassung führt, wenn man sie akzeptiert, zu einer sehr seltsamen Sicht der physikalischen Welt. Daß sie darüberhinaus und unabhängig davon in wesentlichen Details (jedenfalls für mich) nur schwer nachvollziehbar ist, verschieben wir auf den nächsten Abschnitt. Wir beschränken uns zunächst auf eine schlichte Wiedergabe der Bohrschen Interpretation.

völlig gegenwärtig [605], dennoch wurde erst 1979 von Don Howard wieder nachdrücklich daran erinnert [445]. Seither ist das in der Wissenschaftsgeschichte Allgemeingut, ohne daß sich an der Verbreitung der irrigen Meinung, Bohrs Interpretation der Quantenmechanik und die Vorstellung des Kollapses der Wellenfunktion hätten etwas miteinander zu tun, oder letzterer sei gar der zentrale Punkt der Kopenhagener Deutung, etwas wesentliches geändert hätte.

Die trotz des offensichtlich nichtklassischen Verhaltens quantenmechanischer Systeme von ihm in der ersten These propagierte *Unverzichtbarkeit der klassischen Physik* begründet Bohr erkenntnistheoretisch mit der Forderung nach Mittelbarkeit sowohl der Beschaffungsbedingungen als auch der Deutungen des Erfahrungsmaterials bei physikalischen Experimenten. Dies, so schreibt er immer wieder, ist nur möglich, wenn Meßapparate und Meßergebnisse klassisch beschrieben werden [91]. Bohr führt das auf den in der zweiten These postulierten *fundamentalen Unterschied zwischen klassischen und quantenmechanischen Messungen* zurück, den er folgendermaßen beschreibt: Während in der klassischen Physik vorausgesetzt wird, daß Messungen zumindest im Prinzip durchgeführt werden können, ohne das gemessene Objekt im geringsten zu beeinflussen, beruht die Registrierung mikrophysikalischer Objekte oder ihrer Eigenschaften im allgemeinen auf irreversiblen Verstärkungseffekten, die nicht kontrollierbar und genausowenig physikalisch beschreibbar sind. Das hat einerseits den statistischen Charakter der Quantenmechanik zur Folge; ihre Aussagen sind stets Wahrscheinlichkeitsaussagen und damit grundsätzlich anders als diejenigen der klassischen Physik. Andererseits werden Meßergebnisse durch diese irreversiblen Verstärkungseffekte zu unumstößlichen Tatsachen in der makroskopischen Welt in Raum und Zeit, was faktische, nicht statistische Aussagen erforderlich macht. Aussagen der klassischen Physik sind genau von dieser Form, folglich können Meßergebnisse niemals quantenmechanisch und müssen immer klassisch formuliert werden, ganz gleich, wie weit die dabei betrachteten Erscheinungen über die Reichweite der klassischen Physik hinausgehen. Auch die Einstellung des Meßapparates ist eine raumzeitliche Tatsache und muß somit unter Verwendung klassischer Begriffe beschrieben werden. Allerdings müssen makroskopische Objekte nicht generell klassisch beschrieben werden, sondern nur, wenn sie tatsächlich als Meßapparate benutzt werden sollen. Umgekehrt können Meßapparate nie quantenmechanisch beschrieben werden, denn sonst würden sie automatisch zu Meßobjekten.

Natürlich gibt es auch klassische statistische Theorien; diese kommen zum Einsatz, wenn man nicht genügend weiß, um das betrachtete System in der üblichen klassisch-deterministischen Weise zu beschreiben. Das Beispiel schlechthin ist die klassische statistische Mechanik. Solche statistischen Theorien sind insbesondere nicht fundamental, das heißt, ihre Aussagen lassen sich im Prinzip auf tieferliegende Gesetzmäßigkeiten zurückführen. Bohrs zentrale Aussage in Bezug auf den erkenntnistheoretischen Status der neuen Theorie lautet damit: Die Quantenmechanik ist statistisch *und* fundamental¹⁸⁴.

Zunächst scheint aus dieser Auffassung unmittelbar zu folgen, die Welt sei, was ihr physikalisches Verhalten angeht, in zwei Bereiche unterteilt, einen Bereich der Meßgeräte, welcher der klassischen Physik gehorcht, und einen Bereich der Mikrosysteme, für den die Quantenmechanik gilt. Das ist jedoch ein Mißverständnis; Bohr beabsichtigt nirgends, eine Zweiteilung der physikalischen Welt vorzunehmen, er betrachtet letztere angesichts seiner oben erwähnten Bewertung der Quantenmechanik als einer fundamentalen Theorie durch und durch als quantenmechanisch. Daß er dennoch an der Notwendigkeit der Koexistenz von klassischer Physik und Quantenmechanik festhält, ist keine physikalische, sondern eine rein erkenntnistheoretische Aussage. Das wird durch Bohrs dritte These von der *Ganzheitlichkeit quantenme-*

¹⁸⁴Diese sehr pointierte Formulierung stammt von Held [411].

chanischer Phänomene deutlich; häufig ist hier auch vom *relationalen Charakter quantenmechanischer Zustände* und in neuerer Zeit auch von der *Kontextualität quantenmechanischer Prozesse* die Rede. Diese These beinhaltet zunächst eine Neudefinition des Begriffs des „Phänomens“: Ein solches besteht danach stets aus einer festgelegten Meßanordnung aus Meßgerät und Meßobjekt, dem gesamten damit durchgeführten Experiment und einer tatsächlichen Beobachtung, wobei diese drei Aspekte eine unauflösbare Gesamtheit bilden. Carl Friedrich von Weizsäcker bringt das kurz und präzise zum Ausdruck, wenn er sagt, erst das Verständliche Ganze einer Situation sei ein Phänomen. Jeder Versuch einer Trennung insbesondere von Meßapparat und Meßobjekt bedeutet eine Änderung der Versuchsanordnung, womit man ein neues Phänomen vorliegen hat. Damit ändern sich auch die Voraussetzungen und Resultate der Berechnungen der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeiten für die möglichen Meßergebnisse. Unsere Entscheidung, eine bestimmte Größen zu messen und nicht etwa irgendeine andere, beeinflußt folglich sowohl die Bedingungen, unter welchen die Meßergebnisse gewonnen werden, als auch diejenigen, welche die möglichen Voraussagen der Quantenmechanik über das System festlegen.

Die – wiederum erkenntnistheoretischen – Folgerungen, die Bohr hieraus zieht, sind dramatisch. Da er die Notwendigkeit der klassischen Beschreibung von Meßgeräten und Meßresultaten sowie die Untrennbarkeit von Meßgeräten und Meßobjekten als unhintergebares erkenntnistheoretisches Prinzip propagiert und folglich jede Möglichkeit, diese Grenze etwa mit der Quantenmechanik zu überschreiten, für unmöglich erklärt, bleibt ihm nichts anderes übrig, als mindestens letzterer jeglichen Auftrag abzusprechen, die Mikrowelt als solche zu beschreiben, oder das gleich an sich für unmöglich zu erklären. Das bedeutet erst recht eine Absage an alle Versuche, jemals die Schwierigkeiten der Mikrophysik durch Ersetzen der klassischen Begriffe durch irgendwelche neuen zu überwinden, denn der Fähigkeit des Menschen, neue Begriffe zu schaffen, seien grundlegende Grenzen gesetzt [91]¹⁸⁵. Bohr geht sogar noch einen Schritt weiter; „Es gibt keine Quantenwelt“ ist seine zentrale Aussage¹⁸⁶. Indem er generell die Existenz einer Welt aus Quantenobjekten abstreitet, erzwingt er die Konsistenz seiner Interpretation. Dahinter steckt mehr als nur die Vorstellung, daß die Quantenmechanik nicht die physikalischen Systeme selbst, sondern nur deren Erscheinungen beschreibt beziehungsweise das, was wir von diesen Erscheinungen beobachten können. Das wäre nichts spezifisch quantenmechanisches und lediglich eine positivistische Sichtweise, wie sie zuvor schon ganz allgemein etwa von Mach oder dem Wiener Kreis vertreten wurde¹⁸⁷. Die These ist vielmehr, daß anstelle von Mikroobjekten und Meßapparaturen nur *mögliche Relationen* zwischen die-

¹⁸⁵Feyerabend bezeichnet diese Haltung Bohrs zu Recht als Defaitismus [284].

¹⁸⁶Zitiert nach [692]; vergleiche auch [140].

¹⁸⁷Dieser Aspekt ist häufig selbst dann noch Ursache von Mißverständnissen, wenn eigentlich klar ist, daß die Kopenhagener Deutung, um welche Variante es sich auch handeln mag, definitiv nicht mit „Wahrscheinlichkeitsdeutung + Kollaps der Wellenfunktion“ gleichzusetzen ist. Denn auch dann wird sie sehr oft mit einer gewissermaßen fortgeschrittenen pragmatischen Deutung verwechselt, wonach die Quantenmechanik nur Aussagen über meßbare Sachverhalte mache. Der Unterschied ist jedoch fundamental, denn während diese pragmatische Deutung sagt, ungemessene Eigenschaften seien physikalisch bedeutungslos, behauptet die Kopenhagener Deutung, zumindest in der von Bohr vertretenen Version, daß ungemessene Eigenschaften *nicht existieren*.

sen der Gegenstand der Beschreibung sind. Über die Systeme an sich oder irgendwelche physikalische Prozesse, an welchen diese beteiligt sind, kann die Quantenmechanik demnach keinerlei Aussagen machen – weil es nichts gibt, worüber Aussagen zu machen wären. Atomaren Objekten können keinerlei selbständige, objektive, das heißt, von der Meßanordnung unabhängige Eigenschaften zugeschrieben werden.

Die Forderung, stets nur das Meßobjekt und die experimentelle Situation zusammen als Phänomen zu akzeptieren, macht den Beobachter, der ja *entscheidet*, welches Experiment durchgeführt wird, zu einem *unablösbaren Bestandteil des physikalischen Prozesses*, der gerade betrachtet wird. Bohr formuliert das sinngemäß, indem er von der Notwendigkeit der tatsächlichen Beobachtung durch einen Beobachter für das Vorhandensein eines Phänomens spricht – und sagt damit nichts weniger, als daß die Frage, welche physikalischen Größen eines Systems als wirklich angesehen werden können, mit der Frage gleichzusetzen ist, ob sie gemessen werden oder nicht. Das beinhaltet mehr als nur die Aussage, daß objektive Werte bei Messungen keinesfalls schon längst unentdeckt real vorhanden sind, sondern erst bei der Messung sinnvoll davon gesprochen werden kann. Es bedeutet vielmehr, daß erst bei der Beobachtung ein quantenmechanisches Objekt in ursprünglicher Weise *entsteht* und insbesondere quantenmechanische Aussagen welcher Art auch immer sich zwar auf Zeitpunkte vor der Messung, nicht aber auf real existierende Objekte beziehen können. Bei der Rückwirkung des Meßprozesses auf das Meßobjekt handelt es sich in der Bohrschen Auffassung nicht einfach um eine Wechselwirkung der Meßapparatur mit einem vorhandenen Objekt, sondern *der Meßprozeß bringt das beobachtete Phänomen erst hervor*. Was bei Messungen herauskommt, wird durch dieselben erst wirklich, Beobachtungen schaffen Realität und bilden diese nicht bloß ab. Damit landet man wieder bei Bohrs bereits beschriebener, den erkenntnistheoretischen Realismus negierenden Position: Es gibt hiernach keine selbständige physikalische Realität der beobachteten Phänomene.

Das hat jedoch zumindest in der von Bohr vertretenen Form nichts mit einer wie auch immer verstandenen privilegierten Rolle des *subjektiven* Beobachters oder gar dessen Bewußtsein zu tun; man könnte diesen jederzeit etwa durch einen Automaten ersetzen, welcher die genaue experimentelle Vorgehensweise auswählt und durchführt. Der „Beobachter“ ist hier als rein physikalischer Begriff zu sehen; Bohr spricht zuweilen auch von „Beobachtungsinstanzen“ („agencies of observation“), um jeden subjektivistischen Eindruck zu vermeiden.

Anfänglich erklärte Bohr die von ihm geforderte ganzheitliche Betrachtung von Quantensystemen durch die oben erwähnten „unkontrollierbaren Störungen“ des Systems während des Meßprozesses, womit er den selbstaufgelegten Verzicht einer physikalisch-realistischen Betrachtung der Mikrowelt noch nicht mit letzter Konsequenz durchhielt. Denn hierbei sind ganz ohne Zweifel tatsächliche physikalische, also gewissermaßen mechanische Wechselwirkungen zwischen dem Meßobjekt und der Meßapparatur gemeint, wenn diese auch aufgrund ihrer Unkontrollierbarkeit prinzipiell nicht beschreibbar sein sollen. Das wird ganz besonders in seiner direkten Entgegnung zum EPR-Aufsatz deutlich. Im weiteren Verlauf der EPR-Debatte änderte Bohr seine Haltung diesbezüglich drastisch; da sich dank der Überlegungen von Einstein, Podolsky und Rosen die fundamentale Bedeutung der Verschränkung für die Quanten-

mechanik nicht mehr wegdiskutieren ließ, erklärte er, daß es auch ganz ohne irgendwelche mechanischen Wechselwirkungen zwischen System und Meßgerät einen Einfluß der experimentellen Anordnung und Durchführung auf die möglichen Meßergebnisse und damit auf die Wellenfunktion des Systems gebe. Gleichzeitig warnte er von nun an ausdrücklich davor, von „Störungen der Phänomene durch Beobachtung“ oder „Schaffung physikalischer Eigenschaften atomarer Gegenstände durch Messung“ zu sprechen, da solche Ausdrucksweisen den falschen Eindruck erweckten, der Einfluß quantenmechanischer Messungen auf Mikroobjekte trete aufgrund realer Krafteinwirkungen zwischen Meßgeräten und Meßobjekten auf [96].

Das Beharren auf der Unverzichtbarkeit klassischer Begriffe im Verein mit dem offenkundig nichtklassischen Verhalten quantenmechanischer Systeme bleibt natürlich nicht folgenlos; beides zusammen muß zwangsweise zu Widersprüchen führen. Bohr reagiert darauf mit seinem *Komplementaritätsprinzip* [89], [90]. Der Begriff „Komplementarität“ stammt ursprünglich von dem amerikanischen Psychologen William James, der ihn zur Beschreibung hypnotischer und hysterischer Zustände verwendete [461], [462]. Sehr viel mehr als aus dieser Quelle bezog Bohr seine Inspiration jedoch andernorts. Hier ist beispielsweise Edgar Rubin zu nennen, ein dänischer Psychologe, der durch seine Kippbilder bekannt geworden ist. Bei diesen ergeben sich einander ausschließende Eindrücke, je nachdem, ob man den Vordergrund oder den Hintergrund des Musters betrachtet [745], [746]. Auch Søren Kierkegaard dürfte nicht ohne Bedeutung gewesen sein. Den größten Einfluß hatte ohne Zweifel Harald Høffding; der dänische Philosoph und Psychologie, von Bohr selbst als sein Lehrer bezeichnet, brachte diesen erst darauf, sich mit den vorgenannten Personen und deren Werken zu beschäftigen und darf wohl für den ersten Anstoß verantwortlich gemacht werden, der die Komplementarität schließlich in die Physik eintreten ließ¹⁸⁸.

Bohrs Komplementaritätsprinzip wird von ihm nirgends wirklich präzise definiert, es ist aber im Sinne einer Schnittmenge all dessen, was er aus physikalischer Sicht dazu gesagt hat, in etwa so wie oben formulierbar¹⁸⁹. Dabei wird gewissermaßen aus der Not eine Tugend gemacht und postuliert, daß die im Rahmen der Quantenmechanik mögliche vollständige Beschreibung eines Systems notwendigerweise sich gegenseitig ausschließende Aspekte beinhaltet¹⁹⁰. Zusammen mit dem Postulat der Ganzheitlichkeit landet man so beim empirisch

¹⁸⁸In diesem Zusammenhang sind wesentliche Arbeiten Kierkegaards [498] und [499], solche Høffdings [432] - [435]. Details zur Herkunft des Begriffs der Komplementarität findet man unter anderem bei Meyer-Abich [605], Gerald Holton [439], [440] oder Ernst Plaum [711]; die drei genannten Autoren lassen allerdings ein wenig Kritik an der verbreiteten Unsitte vermissen, die Komplementarität als grundlegendes Naturprinzip zu verkaufen, dessen Auftreten in der Quantenmechanik nur ein Beispiel für viele verwandte Fälle sei. Wir kommen in Abschnitt 3.9.4.2 darauf zurück.

¹⁸⁹Inzwischen kennt die mathematische Physik die präzise Definition eines Sachverhalts, der sehr genau dem entspricht, was sich aus Bohrs Komplementaritätsideen an vernünftiger Physik herausdestillieren läßt. Vergleiche auch hier Abschnitt 3.9.4.2.

¹⁹⁰Das zwiespältige Verhältnis der Ideologie des dialektischen Materialismus zum Komplementaritätsprinzip und allgemein zur Kopenhagener Deutung erscheint wenig erstaunlich. In der UdSSR findet man in den dreißiger Jahren gleichermaßen qualifizierte Zustimmung, etwa bei Vladimir Fock, wie auch dogmatische Verfinsterung und kategorische Ablehnung „westlich-idealischer Theorien“, beispielsweise in Gestalt von K. V. Nikolskij, M. E. Omelianovskij oder A. A. Maximov. Ab 1947 führte die Phase der Zhdanovschchi-

bekanntem Sachverhalt, zur vollständigen experimentellen Untersuchung eines Systems gegebenenfalls sich gegenseitig ausschließende Versuchsanordnungen einsetzen zu müssen, die nicht gleichzeitig realisierbar sind. Das heißt, das aus Meßobjekt und Meßapparatur bestehende Gesamtsystem weist je nach experimentellem Aufbau unterschiedliche komplementäre Eigenschaften auf. In diesem Sinn wird das Komplementaritätsprinzip zu einer unhintergehbaren Schranke der menschlichen Erkenntnisfähigkeit erklärt. Gleichzeitig dient es als neuerliches Argument für den geforderten Verzicht auf jeglichen Anspruch auf irgendeine ontologische Aussagekraft der Quantenmechanik über die Welt der Mikrosysteme.

Den Prototyp der Komplementarität findet Bohr in der Relation zwischen der raumzeitlichen Darstellung physikalischer Prozesse und der Kausalität; gleichzeitig ist das besonders geeignet zur Veranschaulichung des gesamten Prinzips. Die Beschreibung des Verhaltens eines Systems in Raum und Zeit erfordert natürlich Messungen, wegen der unkontrollierbaren Wechselwirkung mit dem Meßobjekt geht dabei aber die Kausalität verloren, denn man kann keine kausale Ursache-Wirkungs-Kette angeben, die von den Anfangsbedingungen zu gerade demjenigen Meßwert, der bei der betrachteten Messung herauskommt, führt und zu keinem anderen. Eine kausale, das heißt deterministische Beschreibung wäre theoretisch nur durch Abkopplung des Meßobjekts vom Meßgerät zu erhalten, dann findet jedoch gar keine Messung statt, und die gewünschte raumzeitliche Beschreibung ist nicht möglich. Vergleichbares läßt sich über sämtliche Paare komplementärer Größen aussagen¹⁹¹.

Damit läßt sich nun wiederum die Begründung von Bohrs Prinzip der notwendigerweise klassischen Beschreibung von Meßgeräten präzisieren¹⁹². Meßgeräte sollen es ermöglichen,

na mit ihrer repressiven Politik der erzwungenen ideologischen Linientreue sowjetischer Naturwissenschaftler zu einem allgemeinen Umschwenken in Richtung dogmatischer, physikalisch abwegiger Auffassungen, wobei wieder Maximov die gleichermaßen eifrige wie fachlich-ignorante Wortführerschaft innehatte. Selbst Fock reagierte hierauf mit offen bekundeten vorübergehenden Änderungen seiner Haltung, wenn auch nur minimal. Der Effekt einer ideologischen Verblendung vieler Physiker blieb zunächst über das Ende der Kampagne 1952 hinaus erhalten. Ein prominentes Gegengewicht bildete Robert Havemann [391], der mit schneidender Kritik der vorherrschenden dogmatischen Auffassung der Mathematik und der mathematischen Naturwissenschaften im dialektischen Materialismus gleichzeitig eine Rückkehr zu dessen Wurzeln bei Engels „Dialektik der Natur“ [585] und den Wurzeln der Dialektik insgesamt bei Hegels „Wissenschaft der Logik“ [394], [395] anstrebte. Havemanns eigene Version einer dialektischen Kopenhagener Deutung weist natürlich letztlich dieselben Probleme wie das Original auf, zumal er an frühen Fehlinterpretationen festhält, wie etwa Heisenbergs ursprünglicher Interpretation der Unschärferelation; vermag jedoch dem selbstgestellten Anspruch, nicht dogmatisch zu sein, weitgehend Stand zu halten, sofern man vom kategorischen Festhalten an einer dialektischen Naturbeschreibung absieht. – Daß mit einer ideologisch erstarrten Auffassung der Physik dem Westen wissenschaftlich nichts konkurrenzfähiges mehr entgegengehalten werden konnte, blieb nach und nach auch den Ideologen nicht verborgen, sodaß ab den sechziger Jahren eine allmähliche Rückkehr der sowjetischen Physikerszene in die Scientific Community stattfand, wenn auch Tendenzen, sich auf den dialektischen Materialismus zu berufen, weiterhin zu finden waren. Ein typisches Beispiel ist Blochinzew bereits erwähntes Lehrbuch [75]. Zur Unvereinbarkeit der Dialektik einerseits und der Mathematik und mathematischen Physik andererseits vergleiche [505]. Ausführliches zum Verhältnis von dialektischem Materialismus und Quantenmechanik findet man bei [349], [350] und [351]; vergleiche auch [742] und [743].

¹⁹¹In etwas modernerer Sprache sind das beliebige Paare von Observablen, für welche der Kommutator der zugehörigen selbstadjungierten Operatoren nicht verschwindet.

¹⁹²Diese Rekonstruktion der Argumentation Bohrs stammt von C. F. von Weizsäcker [911].

durch Betrachten ihres direkt wahrnehmbaren Verhaltens auf nicht direkt wahrnehmbares Verhalten von Mikrosystemen zu schließen. Dazu müssen sie einerseits anschaulich in Raum und Zeit beschrieben werden können, andererseits die Möglichkeit liefern, von ihrem Verhalten auf dasjenige der Meßobjekte streng kausal zu schließen. Beides zugleich geht aber nur im Rahmen der klassischen Physik, während in der Quantenmechanik das Komplementaritätsprinzip im allgemeinen beziehungsweise die Unschärferelation (als eine von dessen Folgen) im Besonderen eine gleichzeitig raum-zeitliche und dem Kausalitätsprinzip genügende Beschreibung unmöglich ist. Folglich können Meßgeräte gar nicht anders als klassisch beschrieben werden¹⁹³.

Bohrs Auffassung von seinem Komplementaritätsprinzip änderte sich im Lauf der Zeit. Die frühere Variante hatte in erste Linie die Lösung des Problems des Welle-Teilchen-Dualismus zum Ziel; sie versucht, dieses Ziel zu erreichen, indem sie offensichtlich sich widersprechende Aspekte der Wirklichkeit unter einen begrifflichen Hut zu zwingen trachtet. Die Wirklichkeit wird dabei noch als etwas zwar vor uns verborgenes, aber immerhin real existierendes und außerdem von unseren Beobachtungen unabhängiges Etwas betrachtet. Die oben beschriebenen, drastischen erkenntnistheoretischen Folgerungen werden hier also noch nicht gezogen. Erst bei der späteren Variante handelt es sich um diejenige, die weiter oben diskutiert wurde; hierbei wird die Komplementarität wesentlich zur Erklärung der Unschärferelation herangezogen. Aus der späteren Variante des Komplementaritätsprinzips wird ersichtlich, daß Bohr die Unschärferelation *nicht statistisch* interpretiert. Er hat keine Unbestimmtheit von Werten im Sinn von Streuungen vor Augen. Stattdessen will er zum Ausdruck bringen, daß Größen, die vermeintlich unbestimmt sind, gar nicht zur betrachteten, sondern zu einer anderen experimentellen Situation gehören. Unschärferelationen wären damit eine formale Version der Aussage, daß Messungen der beiden darin vorkommenden Größen sich gegenseitig ausschließende Versuchsanordnungen erfordern. In diesem Sinn gedeutet wären Unschärfen nichts anderes als ein Maß dafür, inwieweit klassische Begriffe in der Quantenmechanik noch anwendbar sind¹⁹⁴; unendliche Unschärfen bedeuten, daß von dem entsprechenden Begriff überhaupt nicht gesprochen werden kann¹⁹⁵. Bohr postuliert dazu, daß Größen, für die es Unschärferelationen gibt, in der beschriebenen Weise einander ausschließende Versuchsanordnungen erfordern, woraus er folgert, daß für solche Größen keine gleichzeitige Meßbarkeit möglich sein kann. Erst damit ergibt sich zusammen mit dem Anspruch der Vollständigkeit der Quantenmechanik die beschriebene starke Beschränkung der physikalischen Realität. Diese ist genau die Gesamtheit aller Phänomene und sonst nichts, und das heißt insbesondere auch, daß es Unbeobachtetes nicht gibt. Es handelt sich dabei einmal mehr um die bereits beschriebene schroffe Abfuhr an den erkenntnistheoretischen Realismus.

Es gibt aufwendige Versuche, die Bohrsche Version der Kopenhagener Deutung mit modernen, mathematisch rigorosen Mitteln zu rekonstruieren. Hier sind vor allem die Namen

¹⁹³Auch wenn von Weizsäcker damit illustriert, wie Bohr seine Auffassung begründet, sind die Folgerungen, die er für sich selbst daraus zieht, etwas anders, wie wir im übernächsten Abschnitt sehen werden.

¹⁹⁴In Abschnitt 3.8.2 wurde ausführlich beschrieben, warum diese Interpretation nicht haltbar ist. Man sieht das zusätzlich auch daran, daß es Unschärferelationen für Größen gibt, die keine klassischen Analogien besitzen.

¹⁹⁵Das bleibt natürlich auch in der richtigen Deutung der Unschärferelationen der Fall.

Don Howard [445] - [448] und, darauf aufbauend, Hans Halvorson und Rob Clifton [381] zu nennen. Howards Idee besteht darin, die von Bohr geforderte Verwendung der Sprache der klassischen Physik zur Beschreibung der Resultate quantenmechanischer Messungen mit Hilfe sogenannter *angemessener gemischter Zustände* („appropriate mixtures“) zu modellieren; das sind statistische Operatoren, die ein Gemisch von Eigenzuständen der gemessenen Größe repräsentieren, und zwar gerade so, daß sie dabei die von der Wellenfunktion des Systems vor der Messung per Bornscher Regel gelieferte Wahrscheinlichkeitsverteilung der möglichen Meßwerte der Messung reproduzieren. Halvorson und Clifton lieferten mit diesem Werkzeug eine strenge mathematische Rekonstruktion von Bohrs Versuch, dem EPR-Argument ein Gegenargument zu liefern, samt Eindeutigkeitsbeweis der gewählten Methode, natürlich ohne dabei an der Unzulänglichkeit von Bohrs Erwiderung etwas zu ändern, was allerdings auch an keiner Stelle behauptet wird. Man kann über den Nutzen solcherlei mathematischer Anstrengungen streiten. Mehr als eine wenn auch sehr subtile Neuformulierung und damit eine reine Beschreibung der ursprünglichen Argumentationslinien Bohrs kann dabei prinzipiell nicht herauskommen; insbesondere wird nirgends eine Erklärung oder gar Rechtfertigung derselben geliefert. Abgesehen davon, daß sich an keiner Stelle nachweisen läßt, daß Bohr selbst irgendetwas mit statistischen Operatoren und gemischten Zuständen im Sinn hatte, ändert jeglicher Versuch einer nachträglichen formalen Präzisierung seiner Aussagen nichts daran, daß diese von ihm selbst in kryptischer, unklarer oder teilweise sogar unverständlicher Form verfaßt wurden. Außerdem ist jeder Versuch dieser Art wie jede andere Interpretation der Schriften Bohrs notwendigerweise selbst wieder von subjektiven Interpretationen der jeweiligen Verfasser gefärbt.

3.9.3.2 Werner Heisenberg

Auch wenn sie im allgemeinen unter derselben Handelsmarke verkauft wird, unterscheidet sich Heisenbergs Auffassung der neueren Quantenmechanik teilweise erheblich von derjenigen Bohrs¹⁹⁶. Die Entwicklung dieser Auffassung war mit deutlichen Meinungsänderungen verbunden. Bei der Entdeckung der Matrizenmechanik und der dortigen Zielsetzung, alle nicht beobachtbaren Größen aus der Theorie zu eliminieren¹⁹⁷, vertrat Heisenberg eine radikalpositivistische Haltung, im Rahmen derer er seine Zielsetzung verabsolutierte und erklärte, die Wirklichkeit bestehe nur daraus, was wir beobachten. Jegliche Rede von einer hinter den Beobachtungen liegenden Wirklichkeit sei „unfruchtbar und sinnlos“. 1927 änderte er seine Meinung, wie in seiner unter anderem auch die Unschärferelation präsentierenden Arbeit [402] nachzulesen ist; dabei war unter anderem sicher der Eindruck von Bedeutung, den die soeben aufgetauchte Schrödingersche Wellenmechanik mit ihrem Erfolg und insbesondere ihrer vermeintlichen Anschaulichkeit ausgelöst hatte. Ab hier setzt sich Heisenberg das Ziel, eine *anschauliche Deutung* der neuen Theorie zu liefern, wobei er besonderen Wert auf die

¹⁹⁶In einigen seiner Monographien findet man Heisenbergs Vorstellungen zur Quantenmechanik in kompakter und teilweise auch nichttechnischer Form zusammengefaßt, beispielsweise in [405] - [408].

¹⁹⁷Siehe Abschnitt 3.3.

Einschränkungen legt, welche diese im Vergleich zur herkömmlichen, klassisch-anschaulichen Deutung physikalischer Theorien erzwingt. Ein weiterer Umschwung zeigte sich dann etwa ab den frühen fünfziger Jahren im Hinblick auf die Haltung zur Vorstellung der Reduktion der Wellenfunktion. Das Ergebnis war ein realistisch-operationalistischer Ansatz mit merkwürdigen idealistischen Anklängen – zumindest bekommt man stellenweise diesen Eindruck, wenn man Heisenbergs Ausführungen dazu liest.

Die Gemeinsamkeiten der Bohrschen und Heisenbergschen Version der Kopenhagener Deutung sind auf den ersten Blick sehr weitgehend, denn letztere läßt sich scheinbar in Form derselben vier Thesen zusammenfassen, wie sie im vorigen Abschnitt beschrieben wurden: die Unvermeidbarkeit der klassischen Begriffe, die Unkontrollierbarkeit der Wechselwirkungen bei Messungen, die Einbeziehung der Meßanordnung in die Beschreibung physikalischer Systeme und das Prinzip der Komplementarität. Genauere Betrachtung lehrt indessen, daß nur die erste und letzte dieser vier Thesen einigermaßen unverändert bleiben; auch wenn bei Heisenberg alles sehr viel direkter, klarer und weniger kryptisch verklausuliert formuliert wird, geht es hier doch im wesentlichen um dasselbe. Im Hinblick auf die anderen beiden wesentlichen Aspekte trifft das jedoch nicht zu. Dort vertritt Heisenberg ab 1927 eigentümlich ambivalente und auch nicht immer völlig einheitliche Auffassungen, was sich insbesondere in dessen Interpretation der quantenmechanischen Wellenfunktionen, aber auch, wenngleich weniger ausgeprägt, in seinen Vorstellungen zum Problem des Meßprozesses äußert¹⁹⁸.

Während Wellenfunktionen bei Bohr konsequent rein statistisch im Sinne einer Kodierung der angesichts der festgelegten Meßgröße und Meßanordnung möglichen Wahrscheinlichkeitsaussagen über die Meßergebnisse betrachtet werden, ist das bei Heisenberg nur in der Anfangsphase der Fall. In seinen frühesten Arbeiten, in denen er von Wellenfunktionen spricht, werden diese teilweise mehr, teilweise weniger ausdrücklich statistisch verwendet. Der Begriff der Reduktion der Wellenfunktion wird zwar scheinbar neu eingeführt [402], aber zunächst nirgends in der später etablierten Weise verwendet, sodaß kollabierende Wellenfunktionen in dieser Phase nicht Bestandteil der Heisenbergschen Kopenhagener Deutung sind. Später gehört die Reduktion der Wellenfunktion zu deren festen Bestandteil, wie wir weiter unten sehen werden.

Im Hinblick auf das Problem des quantenmechanischen Meßprozesses findet man bei Bohr und Heisenberg ebenfalls nur in der Anfangsphase Einigkeit. Beide sprechen von unkontrollierbaren Rückwirkungen des Meßapparates auf das Meßobjekt, während Bohr das jedoch nur zu Beginn auf zwar nicht beschreibbare, aber doch physikalisch reale Prozesse zurückführt und später auf metaphysische Betrachtungen ausweicht, bleibt Heisenberg, wie wir im vorigen Abschnitt bei seiner Herleitung der Unschärferelation gesehen haben, bei dieser Haltung. Wie sehr er sich dabei tatsächlich reale Prozesse vorstellt, wird deutlich, wenn er generell von einer *Störung des Systems durch die Messung* spricht. Exemplarisch erkennt man das an Heisenbergs Schilderungen von Ortsmessungen mikroskopischer Objekte, die er sich typischerweise

¹⁹⁸Vor 1927 spielen diese beiden Aspekte bei Heisenbergs Standpunkt keine Rolle, denn Zustände und damit insbesondere Wellenfunktionen kommen in der ursprünglichen Fassung der Matrizenmechanik natürlich überhaupt nicht vor, und Messungen werden typisch positivistisch als empirische und damit unhinterfragbare Basis jeglicher physikalischer Naturbeschreibung betrachtet; vergleiche auch hier Abschnitt 3.3.

durch *Wechselwirkung mit Photonen* vorstellt, also in Gestalt von Compton-Streuungen und damit von physikalischen Vorgängen. Später erklärt er, warum solche physikalischen Wechselwirkungen zwischen Meßobjekt und Meßgerät prinzipiell unkontrollierbar sein sollen [408]. Denn diese treten genaugenommen zwischen dem Meßobjekt und dem gesamten Rest des Universums auf; da sie überdies wie alle Beobachtungen klassisch beschrieben werden müßten, enthielten solche Beschreibungen folglich nicht nur alle Unsicherheiten, die klassische Beschreibungen mikroskopischer Systeme generell notwendigerweise mit sich bringen¹⁹⁹, sondern die Unsicherheiten der mikroskopischen Struktur der ganzen Welt. Zu diesen durch die klassische Beschreibung verursachten objektiven Unsicherheiten kämen außerdem noch solche subjektiver Natur aufgrund der Unkenntnis des Beobachters. Wie Bohr begründet auch Heisenberg die Tatsache, daß Ergebnisse von Messungen im allgemeinen nicht mit Sicherheit vorausgesagt werden können und nur Wahrscheinlichkeitsaussagen möglich sind, mit dieser Unkontrollierbarkeit der Wechselwirkung zwischen Meßapparat und Meßobjekt. Wahrscheinlichkeiten können nur über Meßreihen überprüft werden, was Heisenberg zum Anlaß nimmt, eine zusätzliche Ensemble-Deutung quantenmechanischer Wellenfunktionen ins Spiel zu bringen. Wellenfunktionen beschreiben danach nicht einen bestimmten Vorgang, sondern eine Gesamtheit von möglichen Vorgängen. Das steht eigentlich im Widerspruch zu Heisenbergs späterer Deutung der Wellenfunktion als Maß für das Wissen über das betrachtete System samt der Kollapsvorstellung²⁰⁰, paßt aber zu seiner ambivalenten Sicht in dieser Phase.

Was den deterministischen Charakter der Wellenfunktion angeht und damit deren Bedeutung außerhalb von Messungen, sind Bohr und Heisenberg wieder weitgehend gleicher Auffassung, allerdings mit einer deutlichen Akzentverschiebung. Beide sind sich natürlich darüber einig, daß Wellenfunktionen abseits von Messungen eine deterministische Entwicklung gemäß der Schrödingergleichung zeigen und damit Wahrscheinlichkeiten für mögliche Meßobjekte gemäß der Bornschen Regel determinieren, genau wie sie sich darüber einig sind, daß nur letzteres unmittelbar mit der Wirklichkeit verbunden werden kann, und zwar durch Messungen. Während Bohr damit jedoch alles über Wellenfunktionen gesagt haben möchte, äußert sich Heisenberg trotz der erklärten „Nichtwirklichkeit“ auch über ersteres. Sowohl in Heisenbergs Unschärfe-Aufsatz [402] als auch im etwas später gemeinsam mit Born verfaßten Beitrag zur Solvay-Konferenz 1927 [114]²⁰¹ werden Wellenfunktionen in erster Linie statistisch gedeutet, wobei hier bereits nicht richtig klar ist, ob das eine reine Ensemble-Interpretation werden soll oder zusätzlich an eine Beschreibung individueller Systeme gedacht wird; der Schwerpunkt liegt in dieser frühen Phase auf jeden Fall bei ersterem. Um das zu sehen, betrachten wir ein physikalisches System, an dem eine Observable A gemessen werden soll. Nehmen wir an, $\{\varphi(\lambda)\}_{\lambda \in \mathbb{R}}$ sei ein vollständiges System verallgemeinerter Eigenzustände des zugehörigen linearen Operators \hat{A} zu dessen Eigenwerten $a(\lambda)$, und das betrachtete System werde zunächst durch einen Superpositionszustand der Form

¹⁹⁹Heisenberg denkt hier an die klassische statistische Thermodynamik.

²⁰⁰Siehe weiter unten in diesem Abschnitt.

²⁰¹An dieser Arbeit ist unter anderem besonders bemerkenswert, daß sich dabei zwei Autoren mit zuvor völlig unterschiedlichen Auffassungen – Born als Anhänger der Führungswellenhypothese, Heisenberg als instrumentalistischer Positivist – zu einer gemeinsamen Haltung zusammengerauft haben.

$$\psi(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} c(\lambda, t_0) \varphi(\lambda) d\lambda \quad (3.94)$$

beschrieben. Ist $\widehat{U}(t, t_0)$ der Zeitentwicklungsoperator des Systems und (\cdot, \cdot) das Skalarprodukt des Distributionenraums, in dem die $\varphi(\lambda)$ leben, dann entwickelt sich der Zustand (3.94) gemäß der Schrödingergleichung wie

$$\psi(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (\varphi(\lambda), \widehat{U}(t, t_0) \varphi(\lambda')) c(\lambda', t_0) \varphi(\lambda) d\lambda' d\lambda \equiv \int_{-\infty}^{\infty} c(\lambda, t) \varphi(\lambda) d\lambda$$

Direkte Anwendung der Bornschen Regel auf diesen Zustand liefert für die Wahrscheinlichkeiten der einzelnen Eigenwerte

$$\mathfrak{P}(a(\lambda)) = |c(\lambda, t)|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} (\varphi(\lambda), \widehat{U}(t, t_0) \varphi(\lambda')) c(\lambda', t_0) d\lambda' \right|^2 \quad (3.95)$$

mit charakteristischen Interferenztermen. Nach der Messung erwartet man jedoch dafür Ausdrücke der Gestalt

$$p(a(\lambda)) = \int_{-\infty}^{\infty} |(\varphi(\lambda), \widehat{U}(t, t_0) \varphi(\lambda'))|^2 |c(\lambda', t_0)|^2 d\lambda', \quad (3.96)$$

Damit geht es bei obiger Frage genauer gesagt darum, wie aus der Superposition (3.95) bei der Messung der Zustand (3.96) wird.

In der Unschärfe-Arbeit erläutert Heisenberg im Anschluß an die im vorigen Abschnitt beschriebene Herleitung der nach ihm benannten Beziehung zunächst allgemein, daß nur bei Messungen an Systemen, die sich bereits vor der Messung in einem Eigenzustand der gemessenen Observablen befinden, eindeutig voraussagbare Meßwerte erhalten werden; andernfalls sei die Größe vor der Messung unbestimmt, und es würde durch dieselbe in zufälliger Weise „aus der Fülle der Möglichkeiten“ ein Meßwert ausgewählt, wobei lediglich in bekannter Weise mit Hilfe der Bornschen Regel Wahrscheinlichkeiten für die möglichen Meßwerte vorausgesagt werden können²⁰². Dabei wird jedoch weder deutlich, was diese Unbestimmtheit einer Größe bedeuten soll, noch, welcher Art der Zustand des Systems vor der Messung ist. Das Ganze wird anschließend speziell für den Fall von Energieeigenzuständen, also stationären Zuständen veranschaulicht, was gerade ein Beispiel für die oben beschriebene Situation liefert, wenn die Energie-Eigenzustände als vollständiges System $\{\varphi_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ gewählt werden. Anhand zweier

²⁰²Heisenberg verwendet hier parallel zur Schrödingerschen Wellenmechanik auch Matrizenmechanik und veranschaulicht die dort vorzunehmende Diagonalisierungen der Matrizen mit Hauptachsentransformationen bei Trägheitstensenoren.

aufeinanderfolgender Stern-Gerlach-Experimente mit zwei stark inhomogenen Magnetfeldern beschreibt Heisenberg, wie ein System von einem anfänglichen Energieniveau und der Wellenfunktion φ_n durch das erste Magnetfeld zu zufälligen Übergängen angeregt wird – dabei ist die Rede von einer „Schüttelwirkung“ des Magnetfelds auf die Energieniveaus – und daher durch einen Superpositionszustand

$$\psi = \sum_{m=0}^{\infty} c_{nm} \varphi_n$$

aus allen möglichen Energieeigenzuständen φ_n beschrieben wird, und sich das gleiche dann beim zweiten Magnetfeld wiederholt. Während das System ohne zwischenzeitliche Energiemessung nun durch eine doppelte Superposition

$$\chi = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} c_{nm} d_{ml} \varphi_l,$$

zu beschreiben ist, da die Energieniveaus erneut „durcheinandergeschüttelt“ werden, hätte eine Energiemessung zwischen den beiden Feldern im obigen Sinne eine zufällige Auswahl eines Energieeigenzustands φ_k zur Folge, sodaß die Ausgangssituation vor dem zweiten Magnetfeld jetzt wieder im Prinzip dieselbe wie ganz zu Beginn wäre. Die Größen c_{nm} und d_{mn} werden dabei als die Komponenten derjenigen Matrizen beschrieben, durch welche die Energiewerte vor dem ersten beziehungsweise dem zweiten Magnetfeld auf diejenigen nach dem ersten beziehungsweise dem zweiten Magnetfeld transformiert werden. Damit wird deutlich, daß sich Heisenberg die Atome, ohne daß er dies ausdrücklich sagt, jederzeit vor wie nach der Energiemessung und den Magnetfelddurchgängen in definierten Energieeigenzuständen vorstellt.

Die Wahrscheinlichkeit, nach dem zweiten Magnetfeld einen beliebigen Energiewert E_j zu messen, wäre im ersten Fall analog zu (3.95)

$$p_1(E_n, E_j) = \left| \sum_{m=0}^{\infty} c_{nm} d_{mj} \right|^2, \quad (3.97)$$

im zweiten dagegen in Analogie zu (3.96)

$$p_2(E_n, E_j) = \sum_{m=0}^{\infty} |c_{nm}|^2 |d_{mj}|^2.$$

Wieder sind die beiden Wahrscheinlichkeiten unterschiedlich. Heisenberg liefert hier eine Erklärung für diese Auswirkung des Meßprozesses zwischen den beiden Magnetfelddurchgängen, die keinen Zweifel daran läßt, daß es sich dabei nicht um einen wie auch immer gemeinten Kollaps der Wellenfunktionen handeln soll. Dazu betrachtet er die Phasen der komplexen Größen c_{mn} und führt das Verschwinden der Außerdiagonalelemente darauf zurück, daß diese Phasen durch die Messung der Energieeigenwerte „um unkontrollierbare Beträge“ geändert

werden. Wir werden gleich sehen, wie das rechnerisch funktioniert. In jedem Fall ergibt sich daraus der zu (3.96) analoge Ausdruck für die Wahrscheinlichkeit, den Wert E_j zu messen, *ohne daß irgendein Vorgang postuliert werden muß, der aus einem Superpositionszustand eine der diesen konstituierenden Komponenten macht.*

Im darauffolgenden Abschnitt illustriert Heisenberg den Superpositionszustand vor einer Messung erneut, diesmal exemplarisch anhand eines Gaußschen Wellenpakets, das man als Superposition aus verallgemeinerten Eigenzuständen des Ortsoperators auffassen kann²⁰³; die betrachteten Messungen sind hier folglich Ortsmessungen. Man kann sich dabei etwa Teilchen in einer Nebelkammer vorstellen, wobei die Streuungen derselben an den Nebeltröpfchen als Ortsmessungen aufgefaßt werden können und dadurch so etwas wie eine Bahn sichtbar wird. Wie eine solche Superposition zu interpretieren ist, wird nicht genauer erläutert, abgesehen davon, daß die klassischen Eigenschaften (wie Orte oder Impulse) in solchen Zuständen als unbestimmt bezeichnet werden. Ganz offensichtlich werden die Teilchen, die dabei beschrieben werden, zu jeder Zeit, vor wie nach irgendwelchen Messungen, als real betrachtet. Die Tatsache, daß das System nach der Messung in einem Eigenzustand der gemessenen Observablen zu demjenigen Eigenwert vorliegt, der als Meßergebnis herausgekommen ist, und damit der Übergang von (3.95) zu (3.96) – wieder ist von einer „Auswahl aus der Fülle der Möglichkeiten“ die Rede – wird durch eine, wie Heisenberg sich ausdrückt, Reduktion der Wellenfunktion durch den Akt der Beobachtung erklärt; „Ortsbeobachtungen reduzieren Wellenpakete auf ihre ursprüngliche Größe“, heißt es hier beispielsweise. Das scheint nichts anderes als die Einführung des Konzepts vom Kollaps der Wellenfunktion zu sein. Die im Abschnitt davor gemachten, oben beschriebenen Ausführungen lassen jedoch keinen Zweifel daran, daß die Verwendung des Begriffs „Reduktion“ nicht in diesem Sinn gemeint sein kann. Allerdings fügt Heisenberg anschließend hinzu, daß er glaubt sagen zu können, die Bahn der Teilchen entstehe erst dadurch, daß sie beobachtet werden. Das läßt, anders als im Fall der Energieeigenzustände, eigentlich keinen Raum für die Annahme, Heisenberg gehe davon aus, die Teilchen hätten zu jedem Zeitpunkt tatsächlich einen Ort, unabhängig davon, ob eine Ortsmessung erfolgt oder nicht; allerdings findet sich keine Aussage hierzu.

Im Solvay-Bericht wird die Sache detaillierter beschrieben. Es werden hierbei wiederum nur Energie-Eigenzustände diskutiert, die von Born und Heisenberg der Einfachheit halber (und für viele reale Systeme passend) als diskret angenommen werden, außerdem wird ausdrücklich auf die Schrödingergleichung als diejenige Gleichung Bezug genommen, welche die Zeitentwicklung der Wellenfunktionen und damit auch der Koeffizienten von Superpositionszuständen beschreibt. Ist

$$\psi(t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t_0) \varphi_n \quad (3.98)$$

²⁰³Daß es sich hierbei um verallgemeinerte Eigenzustände handelt, war zur Entstehungszeit der erwähnten Arbeit natürlich noch völlig unbekannt, ganz abgesehen davon, daß sich Heisenberg für solche Details nur sehr eingeschränkt interessierte. Wie so etwas mathematisch exakt funktioniert, wurde erst Jahrzehnte später klar, als Distributionen und Gelfandsche Raumtripel Einzug in die Quantenmechanik hielten. Siehe hierzu etwa [361] oder [631]. Vergleiche auch Anmerkung 87 in Abschnitt 3.7.2.

der anfängliche Zustand, dann liefert die Bornsche Regel den zu (3.95) analogen Ausdruck

$$\mathfrak{P}(a_n) = |c_n(t)|^2 = \left| \sum_{m=0}^{\infty} (\varphi_n, \hat{U}(t, t_0) \varphi_m) c_m(t_0) \right|^2, \quad (3.99)$$

während „Anwendung der üblichen Regeln der Wahrscheinlichkeitsrechnung“ [114] in Analogie zu (3.96) auf

$$p(a_n) = \sum_{m=0}^{\infty} |(\varphi_n, \hat{U}(t, t_0) \varphi_m)|^2 |c_m(t_0)|^2, \quad (3.100)$$

führt. Auch hier interpretieren Born und Heisenberg Zustände der Gestalt (3.98) *rein statistisch*, wobei dies diesmal explizit zum Ausdruck gebracht wird. Die Autoren gehen unter Berufung auf Bohr ausdrücklich davon aus, daß sich ein System stets nur *in einem* Quantenzustand, in diesem Fall also in einem der Energieeigenzustände φ_n befinden kann, unabhängig davon, ob eine Messung stattgefunden hat oder nicht. Sofern man diesen Zustand zu Beginn kennt, seien die Anfangsbedingungen so zu wählen, daß $c_n(t_0) = \delta_{nj}$ und damit $\psi(t_0) = \varphi_j$ gilt, wobei j der Index des anfänglichen Energieeigenzustands ist. Es sei sinnlos, so heißt es weiter, Superpositionszustände so zu deuten, als ob sich das System gleichzeitig in unterschiedlichen Zuständen befände; vielmehr käme durch die Superposition zum Ausdruck, daß das System aufgrund der Störung durch die Messung vom Anfangszustand in einen beliebigen, aber nicht vorhersagbaren anderen Zustand übergeht, und folglich seien die Größen $S_{nm}(t) \equiv (\varphi_n, \hat{U}(t, t_0) \varphi_m)$ als *Übergangswahrscheinlichkeiten* von φ_m nach φ_n aufzufassen. In diesem Fall folgt als Auswirkung der Messung unmittelbar

$$c_n(t) = S_{nj}(t),$$

und (3.99) geht ebenso unmittelbar in (3.100) über. Wenn jedoch nicht alle Koeffizienten $c_n(t_0)$ bis auf einen verschwinden, was nach Born und Heisenberg bedeutet, daß man den Anfangszustand des betrachteten Systems nicht genau kennt und nur die Wahrscheinlichkeiten $|c_n(t_0)|^2$ für das jeweilige anfängliche Auftreten der unterschiedlichen Zustände φ_n angeben kann, ist das nicht der Fall, und man muß nun erklären, wie der Übergang von (3.99) in (3.100) vor sich gehen soll. Von einem Kollaps der Wellenfunktion, mit dem man einen solchen Übergang typischerweise erzwingt, ist jedoch auch hier nirgends die Rede; stattdessen versuchen Born und Heisenberg hier so etwas wie eine Komplementarität zwischen den Besetzungszahlen der Energieniveaus und den Phasenfaktoren der komplexen Koeffizienten $c_n(t_0) = |c_n(t_0)| e^{i\gamma_n}$ zu etablieren²⁰⁴. Da eine völlige Unbestimmtheit der Phasenfaktoren dazu führt, daß sich Außerdiagonalelemente in Gleichung (3.99) herausmitteln und damit automatisch der Ausdruck (3.100) entsteht, müssen die komplementären Größen, also die Besetzungszahlen, völlig bekannt sein, das heißt, man muß vor der Messung die jeweiligen Anzahlen der Atome im Energieniveau E_n experimentell bestimmen. Die Autoren ergänzen,

²⁰⁴Darauf haben Guido Bacciagaluppi, Elise Crull und Antony Valentini 2009 erstmals hingewiesen [27], [28].

daß dieser Übergang auch dann erreicht wird, wenn das System ganz allgemein einer sich zeitlich völlig unregelmäßig entwickelten Störung ausgesetzt ist.

Formeln der Gestalt (3.95), (3.97) oder (3.99) repräsentieren in Borns und Heisenbergs Worten das Gesetz von der *Interferenz der Wahrscheinlichkeiten*. Sie berufen sich dabei auf Pauli, folgen aber begrifflich Jordan, der diese Sprechweise bei der Interpretation der Bornschen Regel einführte²⁰⁵. Es handelt sich hierbei um frühe, noch unbeholfene und in Borns und Heisenbergs Fall wie gesehen auch nicht ganz korrekte Versuche, eine der wesentlichen Besonderheiten der Quantenmechanik im Vergleich zur klassischen Physik in den Griff zu bekommen, nämlich die Existenz interferenzfähiger Superpositionen²⁰⁶.

Die Verwandlung von (3.99) in (3.100) mit Hilfe zufällig verteilter Phasenfaktoren ist Born und Heisenberg gerade einen Nebensatz wert, und in der Tat folgt ersteres aus letzterem, wie man sich leicht überzeugen kann, unmittelbar, wenn man der Unkenntnis der tatsächlichen Phasen Rechnung trägt, indem man über alle möglichen Phasenfaktoren mittelt. Dadurch erhält man anstelle von (3.99)

$$\begin{aligned}
 & \prod_{j=0}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \int |c_n(t)|^2 d\gamma_j \\
 &= \prod_{j=0}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \int \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (\varphi_n, \hat{U}(t, t_0) \varphi_m) (\hat{U}(t, t_0) \varphi_m, \varphi_n) |c_n(t_0)| |c_m(t_0)| e^{i(\gamma_n - \gamma_m)} d\gamma_j \\
 &= \prod_{j=0}^{\infty} \int \sum_{m=0}^{\infty} |(\varphi_n, \hat{U}(t, t_0) \varphi_m)|^2 |c_n(t_0)| |c_m(t_0)| \delta(\gamma_n - \gamma_m) d\gamma_j \\
 &= \sum_{m=0}^{\infty} |(\varphi_n, \hat{U}(t, t_0) \varphi_m)|^2 |c_m(t_0)|^2,
 \end{aligned}$$

also tatsächlich gerade (3.100)²⁰⁷. Inwieweit ein solches mathematisch korrektes Vorgehen auch physikalisch gerechtfertigt ist, wird noch zu diskutieren sein.

In jedem Fall ist das Verfahren verallgemeinerungsfähig, das heißt, nicht nur auf Energieeigenzustände, sondern auf Eigenzustände beliebiger Observablen anwendbar [28]. Sind \hat{A} und \hat{B} zwei nichtkommutierende selbstadjungierte Operatoren, $\{\varphi(\kappa)\}_{\kappa \in \mathbb{R}}$ und $\{\eta(\lambda)\}_{\lambda \in \mathbb{R}}$ die jeweils zugehörigen vollständigen Systeme verallgemeinerter Eigenfunktionen, und ist

²⁰⁵Vergleiche Abschnitt 3.7.3.

²⁰⁶Vergleiche auch hier Abschnitt 3.7.3.

²⁰⁷Bacciagaluppi, Krull und Valentini führen diese Rechnung in [27] beziehungsweise [28] unter Verwendung von Dichteoperatoren durch, was äquivalent zur hier beschriebenen Vorgehensweise ist. Wie sie betonen, handelt es sich dabei um eine Konditionalisierung von Wahrscheinlichkeitsfunktionen, das heißt um den Übergang von gewöhnlichen zu bedingten Wahrscheinlichkeiten. Auch hieran wird deutlich, daß dabei nicht an irgendeinen Kollapsprozeß gedacht sein kann. Vergleiche wieder Abschnitt 3.7.3.

$$\psi = \int_{-\infty}^{\infty} (\varphi(\kappa), \psi) \varphi(\kappa) d\kappa = \int_{-\infty}^{\infty} (\varphi(\kappa), \psi) \left(\int_{-\infty}^{\infty} (\eta(\lambda), \varphi(\kappa)) \eta(\lambda) d\lambda \right) d\kappa$$

ein Superpositionszustand aus Eigenfunktionen von \hat{A} , dann liefert die Bornsche Regel zunächst wieder für die Wahrscheinlichkeiten der Eigenwerte von \hat{A} Ausdrücke der Form

$$\mathfrak{P}(\alpha(\kappa)) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} (\varphi(\kappa), \psi) (\eta(\lambda), \varphi(\kappa)) d\lambda \right|^2$$

mit Interferenztermen. Die angesprochene Verallgemeinerung besteht nun in der These, daß eine Messung der Größe A bei der dazu komplementären Größe B zum Auftreten von zufälligen („unkontrollierbaren“) Phasenfaktoren $e^{i\gamma(\kappa)}$ führt, sodaß der Superpositionszustand die Gestalt

$$\tilde{\psi} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\gamma(\kappa)} (\varphi(\kappa), \psi) \varphi(\kappa) d\kappa$$

erhält. Bildet man den Mittelwert über die Phasenfaktoren, erhält man

$$\begin{aligned} p(\alpha(\kappa)) &= \prod_{\kappa} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (\varphi(\kappa), \psi) (\eta(\lambda), \varphi(\kappa)) (\psi, \varphi(\kappa)) (\varphi(\kappa), \eta(\lambda')) \times \\ &\quad \times e^{i[\gamma(\lambda) - \gamma(\lambda')]} d\lambda d\lambda' d\gamma(\kappa) \\ &= \prod_{\kappa} \int_{-\infty}^{\infty} (\varphi(\kappa), \psi) (\eta(\lambda), \varphi(\kappa)) (\psi, \varphi(\kappa)) (\varphi(\kappa), \eta(\lambda')) \times \\ &\quad \times \delta(\gamma(\lambda) - \gamma(\lambda')) d\lambda' d\gamma(\kappa) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |(\varphi(\kappa), \psi)|^2 |(\eta(\lambda), \varphi(\kappa))|^2 d\lambda \end{aligned}$$

und damit eine klassische Wahrscheinlichkeitsverteilung ohne Interferenzterme. Damit scheint eine Interpretation nahezuliegen, wonach nicht nur die Energie, sondern auch alle anderen klassisch wohlbekanntenen Größen bei Mikroobjekten zu jeder Zeit zwar statistisch verteilte, aber wohldefinierte Werte besitzen, die wir nur nicht wissen können – ganz im Sinne der klassischen statistischen Mechanik. Allerdings ist nicht nachweisbar, daß Born und Heisenberg eine solche Position vertreten haben, mit Ausnahme des Spezialfalls der Energieeigenwerte. Wir kommen etwas weiter unten erneut darauf zurück. Insgesamt besteht jedoch kein Zweifel daran, daß mikroskopische Objekte wie Elektronen oder Atome jederzeit und vor allen Dingen unabhängig von durchgeführten oder nicht durchgeführten Messungen als real existent

betrachtet werden, auch wenn das nirgends ausdrücklich gesagt wird. Das steht in scharfem Kontrast nicht nur zur Auffassung Bohrs, sondern auch zu derjenigen, die heutzutage in den meisten gängigen Interpretationen vertreten wird.

Die nächste deutliche Änderung erfuhr Heisenbergs Kopenhagener Deutung gegen Ende der zwanziger Jahre. Sie war mit einer vorsichtigen Abkehr von der oben beschriebenen realistischen Haltung und, zumindest ein Stück weit, mit einer Rückkehr zum Positivismus der Anfangsphase verbunden. Anders als zuvor erklärt Heisenberg nun, zwischen zwei Messungen könne man nicht davon sprechen, daß ein Atom in einem bestimmten stationären Zustand verweilt [406]. Was den Übergang von den Superpositionszuständen zu statistischen Gemischen mit klassischen Wahrscheinlichkeitsverteilungen angeht, bleibt er vorläufig noch bei der beschriebenen Erklärung mithilfe von Mittelwertbildungen über zufällige Phasen.

Heisenbergs nunmehr vertretene Auffassung kulminierte 1935 in seiner in Abschnitt 3.7.3 bereits kurz erwähnten, unveröffentlichten EPR-Entgegnung [403]. Zentraler Begriff ist dabei der *Heisenbergsche Schnitt*; mit diesem Schnitt trägt dessen Namensgeber Bohrs Forderung nach der Unverzichtbarkeit der klassischen Physik Rechnung, indem er der Trennung zwischen dem Bereich der Meßobjekte und demjenigen der Meßapparaturen einen Namen gibt. Denn der Heisenbergsche Schnitt soll auf dem Weg vom mikroskopischen System, an dem eine Messung vorgenommen wird, zum Beobachter, der die Messung durchführt, festlegen, bis wohin die Gesetze der Quantenmechanik gelten und ab wo die klassische Physik verwendet werden muß, mithin also, welcher Teil des Gesamtsystems als Meßobjekt und welcher als Meßgerät interpretiert werden soll. Das bedeutet gleichzeitig die Unterteilung der Welt in das Meßobjekt und den Rest der Welt. Hiermit scheint zwar einfach eine neue Terminologie eingeführt zu werden, es ist aber mehr als das, denn Heisenberg ergänzt sie durch zwei zusätzliche Forderungen, wonach erstens der genaue Ort des Schnitts *weitgehend willkürlich festlegbar* sein soll und zweitens der statistische Charakter der Quantenmechanik *erst mit dem Schnitt* auftritt. Beides bedarf näherer Erläuterung.

Die erste Forderung besagt, daß die Unterteilung des Gesamtsystems in Meßobjekt und Meßgerät in gewissen Grenzen frei verschiebbar sei, in der einen Richtung so weit, bis man bei einem Meßgerät mikroskopischer Natur landet, das dann notwendigerweise quantenmechanisch beschrieben werden muß, und in der anderen Richtung beliebig weit bis zum Bewußtsein des Beobachters. Heisenberg belegt diese Aussage exemplarisch anhand eines gedachten Systems aus einem beobachteten Objekt und einer Kette von Meßinstrumenten, wobei er sich hier der Einfachheit halber auf zwei Stück beschränkt [403]. Seine Rechnungen sind nicht ganz wasserdicht, das gleiche Argument findet sich jedoch in mathematisch strenger Form auch bei von Neumann [655], der allerdings, wie es für seine Auffassung der Quantenmechanik typisch ist, die Welt in drei Teile zerlegt, in das beobachtete System, das Meßgerät und den subjektiven Beobachter, oder genauer gesagt in das beobachtete System, die restliche äußere Welt und den subjektiven Beobachter. Damit steht bei von Neumann nicht eine etwaige Unvermeidbarkeit der klassischen Physik zur Diskussion; er betrachtet die Quantenmechanik als universell gültig und stellt lediglich die Frage, wann der Übergang von quantenmechanischen Superpositionen zu klassischen Wahrscheinlichkeitsverteilungen der möglichen Meßwerte und

damit zur Realisation eines bestimmten anstelle der Überlagerung aller möglichen Meßresultate stattfindet. Folglich handelt es sich gleichzeitig um den Übergang von der stetigen zeitlichen Entwicklung des gesamten Systems gemäß der Schrödingergleichung zur unstetigen Auswahl eines bestimmten, nämlich des tatsächlich bei der Messung herauskommenden Meßwerts aus der vormaligen Superposition aller möglicher Meßwerte²⁰⁸. Diesen Übergang bezeichnet er als *Grenze*, womit natürlich gerade wieder der Heisenbergsche Schnitt gemeint ist. Entsprechend ist bei von Neumann dann auch von der beliebigen Verschiebbarkeit dieser Grenze vom beobachteten System bis tief ins Innere des Bewußtseins des Beobachters die Rede. Bezeichnet man die drei Teile der Welt – beobachtetes System, Meßapparatur und Beobachter – mit I, II und III, so ist damit der Beweis zu erbringen, daß die Wahrscheinlichkeitsverteilung der möglichen Meßresultate unabhängig von der Position der erwähnten Grenze von I bis III ist. Dazu betrachtet man einerseits I einzeln und II + III als zusammengesetztes System, andererseits I + II sowie III, und zeigt sodann, daß man die Grenze sowohl zwischen I und II + III, als auch zwischen I + II und III ziehen kann.

Von Neumanns Argumentation läuft folgendermaßen: Im Hilbertraum \mathcal{H}_I sei \hat{A} der die zu messende Größe repräsentierende lineare selbstadjungierte Operator, $\sigma(\hat{A}) \subseteq \mathbb{R}$ dessen Spektrum und $\{\varphi(q, \lambda)\}_{\lambda \in \sigma(\hat{A})} \subset \mathcal{H}_I$ ein vollständiges Orthonormalsystem aus Eigenfunktionen von \hat{A} . Betrachtet man zunächst I und II + III, dann befindet sich das Meßobjekt I in einem unbekanntem Zustand $\psi(q) \in \mathcal{H}_I$ und das Meßgerät II im bekannten Zustand $\xi(r) \in \mathcal{H}_{II}$, nämlich in seinem „Einschaltzustand“. Nun entwickeln wir $\psi(q)$ nach dem System $\{\varphi(q, \lambda)\}_{\lambda \in \mathbb{R}}$,

$$\psi(q) = \int c(\lambda) \varphi(q, \lambda) d\lambda$$

und finden I + II im Hilbertraum \mathcal{H}_{I+II} folglich zu Anfang im Zustand

$$\Psi(q, r) = \psi(q) \xi(r) = \left(\int c(\lambda) \varphi(q, \lambda) d\lambda \right) \xi(r).$$

Die Messung geschieht nun in Form einer Wechselwirkung von I und II und wird durch den Hamiltonoperator \hat{H} des Systems I + II beschrieben, das heißt, $\Psi(q, r)$ geht über in

$$\Psi'(q, r) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} t \hat{H}\right) \Psi(q, r) \quad (3.101)$$

Geht man nun zur Betrachtung von I + II und III über, so kann der vorliegende Prozeß als Messung betrachtet werden, wenn es gelingt, einen Operator $\hat{U} = \exp(-it\hat{H}/\hbar)$ zu finden, so daß (3.101) die Form

$$\Psi'(q, r) = \int c(\lambda) \varphi(q, \lambda) \chi(r, \lambda) d\lambda \quad (3.102)$$

²⁰⁸Das ist wieder von Neumanns Übergang vom unitären Prozeß **2** zum unstetigen Prozeß **1**, wie er in Anmerkung 176 in Abschnitt 3.9.2 bereits erwähnt wurde.

annimmt, wobei $\{\chi(q, \lambda)\}_{\lambda \in \sigma(\hat{A})} \subset \mathcal{H}_I$ ein weiteres vollständiges Orthonormalsystem ist, diesesmal zu einem Operator \hat{B} auf \mathcal{H}_{II} , dessen Spektrum $\sigma(\hat{B})$ mit demjenigen von \hat{A} identisch ist. Definiert man nun den Operator \hat{U} durch

$$\hat{U} \iint x(\lambda, \mu) \varphi(q, \lambda) \chi(r, \mu) d\lambda d\mu = \iint x(\lambda, \mu) \varphi(q, \lambda) \chi(r, \lambda + \mu) d\lambda d\mu,$$

so erhält man wegen

$$\psi(q) = \int (\psi(q), \varphi(q, \lambda)) \varphi(q, \lambda) d\lambda$$

und

$$\Psi(q, r) = \psi(q) \xi(r) = \int (\psi(q), \varphi(q, \lambda)) \varphi(q, \lambda) \xi(r) d\lambda$$

mit $\xi(r) \equiv \chi(r, 0)$ für (3.101)

$$\Psi'(q, r) = \hat{U} \Psi(q, r) = \int (\psi(q), \varphi(q, \lambda)) \varphi(q, \lambda) \chi(r, \lambda) d\lambda,$$

also nicht nur das gewünschte Resultat, sondern zusätzlich auch noch $c(\lambda) = (\psi(q), \varphi(q, \lambda))$ und damit die richtige Wahrscheinlichkeitsverteilung der möglichen Meßergebnisse. Da die Einteilung in I. II und III weitgehend willkürlich ist, folgt daraus auch die Willkürlichkeit der Lage des Heisenbergschen Schnitts.

Auch wenn diese Aussage gleichermaßen bei Heisenberg und von Neumann auftaucht, sind dennoch deren Auffassungen der quantenmechanischen Wellenfunktionen gänzlich verschieden. Beide stimmen zwar natürlich im Hinblick auf die Bornsche Wahrscheinlichkeitsdeutung überein, während jedoch von Neumann Wellenfunktionen darüberhinaus uneingeschränkt die Aufgabe zuweist, einzelne Quantenobjekte zu beschreiben und damit eine ganz konkrete Kollapsvorstellung vertritt, wie sie in Abschnitt 3.9.2 vorgestellt wurde, sieht sie Heisenberg nach wie vor rein statistisch im Sinne der in Abschnitt 3.9.1 vorgestellten Ensemble-Interpretation, auch wenn er das selten wirklich klar zum Ausdruck bringt. Dabei kommt er ohne den eigentlich von ihm selbst eingeführten Kollaps-Begriff aus. Das ändert sich später erneut, als Heisenberg eine weitere Wandlung seiner Interpretation vollzieht, und zwar gleich in doppelter Hinsicht [408]. Einerseits geht er nun dazu über, quantenmechanische Wellenfunktionen als Maß für das *Wissen des Beobachters über das betrachtete System* aufzufassen²⁰⁹. Wellenfunktionen sollen nun sowohl Informationen über die Ausgangssituation oder Präparation des betrachteten Systems enthalten, als auch solche über den Grad unserer Kenntnis über die Eigenschaften des Systems und damit auch über die Genauigkeit des Experiments. Dabei hat dieser zweite Aspekt wieder doppelten Charakter, denn der Grad unserer Kenntnis wird als teilweise durch Beobachtungsfehler, also wie in der klassischen Physik, und teilweise durch die von der Unschärferelation vorgegebenen nichtklassischen fundamentalen Grenzen der Meßgenauigkeit beschränkt aufgefaßt²¹⁰. Nur im Sonderfall sogenannter *reiner Zustände*, also

²⁰⁹Vergleiche auch nächsten Abschnitt und Kapitel 4.

²¹⁰Man beachte hier das in Abschnitt 3.8 über Unschärferelationen gesagte.

solcher, über die man vollständig Bescheid weiß, hat die Begrenzung des Grads des Wissens nur die zweitgenannte Ursache²¹¹. Als etwas merkwürdige Konsequenz ergibt sich daraus, daß ein und dasselbe physikalische System für unterschiedliche Beobachter unterschiedliche Wellenfunktionen besitzen kann, wenn diese Beobachter über unterschiedliche Kenntnis der Eigenschaften des Systems verfügen. Was dabei im übrigen die ganze Zeit über unklar bleibt, ist Heisenbergs Haltung zur Frage, ob Wellenfunktionen darüberhinaus auch eine Beschreibung individueller Systeme zugeschrieben werden kann.

Das allein wäre eine antirealistische Haltung; die Quantenmechanik lieferte danach keine Beschreibung der Natur, sondern nur eine Beschreibung unseres Wissens von ihr. Heisenberg läßt es jedoch nicht damit bewenden. Er gesteht der Quantenmechanik in dieser Phase sehr wohl doch die Fähigkeit zu, in gewisser Weise die Wirklichkeit zu beschreiben. Hierzu versucht er, ihren akausalen Charakter zu berücksichtigen, indem er in bester Aristotelischer Tradition der Möglichkeit zu einem bestimmten Geschehen selbst in gewissem Sinne einen Wirklichkeitscharakter zuweist. Denn andererseits beschreiben Wellenfunktionen nach seiner Auffassung in der Zeit vor einer Messung die *Tendenz* oder die *Möglichkeit* für meßbare Vorgänge an dem betrachteten System. Heisenberg spricht auch von *Potentialitäten* oder der *Potentia* für das Eintreten von Vorgängen, womit er in der Tat einen deutlichen Bezug zur aristotelischen Philosophie herstellt²¹². Wellenfunktionen beschreiben in ihrer zeitlichen Entwicklung damit die Möglichkeiten eines Systems, die aber noch nicht zur Wirklichkeit geworden sind. Sie enthalten folglich sowohl ein objektives Element, eben der Tendenz oder Möglichkeit für Ereignisse, und ein subjektives Element der unvollständigen Kenntnis, unvollständig selbst im reinen Fall aufgrund der Unschärferelationen²¹³.

Besonders erwähnt werden sollte – darauf legte Heisenberg auch selbst großen Wert – der Unterschied zwischen Potentialitäten und quantenmechanischen Wahrscheinlichkeiten, auch und gerade, weil man leicht der Versuchung nachgeben könnte, erstere lediglich als literarische Veranschaulichung der letzteren zu betrachten. Eine solche Haltung ist empirisch vertretbar, sie wurde aber von Heisenberg nicht geteilt, der die beiden Begriffe ganz im Gegenteil stets strikt trennte. Quantenmechanische Wahrscheinlichkeiten treten bei ihm wie üblich und oben beschrieben als Voraussagen für relative Häufigkeiten bei Meßreihen in Erscheinung, sie beziehen sich damit auf faktische, also bereits realisierte Sachverhalte. Potentialitäten dagegen stellen die Form der Existenz quantenmechanischer Systeme zwischen Messungen dar und damit etwas, daß noch nicht in die empirische Realität übergreten ist. Sie sind folglich eine intrinsische Eigenschaft individueller Systeme und liegen in den Dingen selbst²¹⁴. Die Tatsa-

²¹¹Hier deutet sich bereits das Konzept der reinen und gemischten Zustände und der Ignoranzinterpretation des statistischen Operators an.

²¹²„Potentia“ ist der lateinische Ausdruck für das griechische Wort *δύναμις* („Dýnamis“), das man unter anderem mit „Möglichkeit“ im Sinne von „Fähigkeit“ oder „Disposition“ übersetzen kann. Der physikalische Begriff der *Dynamik* leitet sich natürlich ebenfalls hiervon ab.

²¹³Die Deutung quantenmechanischer Wellenfunktionen als Repräsentation von Potentialitäten taucht auch bei Fock auf, der damit jedoch im Gegensatz zu Heisenberg deren rein objektiven Charakter herausstellen möchte [300].

²¹⁴Hierin liegt auch der Unterschied zu Karl Poppers Begriff der *Propensitäten*, mit dem dieser eine objektivistische Interpretation der Wahrscheinlichkeitsrechnung vorschlug und damit einen Weg zurück zu einer

che der *Interferenzfähigkeit* dieser Potentialitäten kann als Hinweis darauf gedeutet werden, daß es sich bei ihnen dennoch um eine Form der Realität handelt. In der durch quantenmechanische Wahrscheinlichkeiten erfolgenden quantitativen Beschreibung dessen, was passiert, wenn ein System aus der empirisch unzugänglichen Wirklichkeit der Potentialitäten in die vertraute übertritt, liegt dann der Zusammenhang der beiden Begriffe.

Dieser Übergang vom Möglichen zum Faktischen findet während des Beobachtungsaktes statt. Genauer gesagt ist die Wechselwirkung des Meßobjekts mit der Meßanordnung, also mit dem Rest der Welt, der Auslöser. Entscheidend ist dabei die Irreversibilität des Aktes der Registrierung, aber nicht der Registrierung im Geist des Beobachters, sondern der Registrierung in Form einer Wechselwirkung mit dem Rest der Welt, und weil es sich dabei tatsächlich um den gesamten Rest der Welt handelt, ist die Registrierung wie oben beschrieben irreversibel. Hier ist Heisenbergs Auffassung scheinbar wieder ganz nahe bei derjenigen von Bohr. Denn wenn man sagt, „etwas geschieht“, dann ist damit wohl etwas faktisches gemeint, und folglich kann es sich nur auf eine Beobachtung beziehen, bei welcher der besagte Übergang vom Möglichen zum Faktischen stattfindet, nicht aber auf Situationen zwischen zwei Beobachtungen, die nur aus Möglichkeiten bestehen. Die „Bahn“ eines Teilchens beispielsweise entsteht hiernach erst dadurch, daß wir sie beobachten²¹⁵. Die Übereinstimmung mit Bohr ist allerdings in der Tat nur scheinbar, denn anders als Bohr verkneift sich Heisenberg inzwischen keineswegs Aussagen über die reale Welt, die über rein empirisches hinausgehen, wenn er etwa von Möglichkeiten und deren Überlagerung spricht. Besonders deutlich wird das, wenn er zum Schluß kommt, die Wirklichkeit sei unterschiedlich, je nachdem, ob wir sie beobachten oder nicht. Offensichtlich werden quantenmechanische Systeme, an denen gerade keine Messungen vorgenommen werden, dabei nicht als real im eigentlichen Sinn aufgefaßt; sie existieren stattdessen nur als Potentia, als noch nicht realisierte Möglichkeiten. Das wird jedoch nirgends klar ausgesprochen. Es könnte auch sein, daß sich Heisenberg lediglich spezielle Eigenschaften eines Quantensystems als nur potentiell existierend vorstellt. So oder so sind hier jedenfalls leichte idealistische Anklänge nicht zu übersehen.

gleichfalls objektivistischen Deutung der Quantenmechanik finden wollte [713] - [718]. Propensitäten sind ebenfalls ein Maß für die Tendenz einer Versuchsanordnung, bestimmte Meßergebnisse zu erbringen. Popper betrachtet seine Propensitäten sehr wohl als reale Eigenschaften physikalischer Systeme, im Gegensatz zu den Aristotelisch-Heisenbergschen Potentialitäten haben sie jedoch einen relationalen Charakter und sind daher nur sinnvoll im Zusammenhang mit der gesamten experimentellen Anordnung und genaugenommen mit der gesamten Umgebung des Systems, also eigentlich wieder mit dem gesamten restlichen Universum zu beschreiben, was eine auffällige Parallele zur Bohrschen Sicht der Dinge zu sein scheint. Das täuscht jedoch über die wirkliche Situation hinweg, erkennbar etwa an Poppers Deutung der Unschärferelationen. Die dort auftretenden Unschärfen interpretiert er zwar völlig richtig als Varianzen, womit er Bohr eigentlich etwas voraus hat, aber als Varianzen von eigentlich wohlbestimmten Größen [716], was natürlich nichts anderes als verborgene Variablen darstellt. Poppers Versuch, auf dieser Basis eine realistisch-objektivistische Deutung der Quantenmechanik aufzubauen, ist gescheitert, denn da er konsequenterweise Wellenfunktionen ausschließlich als Kodierung von Wahrscheinlichkeitsverteilungen betrachtet, ist seine Interpretation nicht in der Lage, zwischen echten quantenmechanischen Superpositionen und echten gemischten Zuständen zu unterscheiden. Wir werden später sehen, daß dieses Problem auch bei der Ensemble-Interpretation auftritt.

²¹⁵Diese Auffassung taucht wie gesehen auch schon viel früher bei Heisenberg auf [402], aber erst später wird wirklich klar, was damit gemeint sein soll. Vergleiche auch Aussagen von Philipp Frank [304], [305] und Pasqual Jordan [480], [481].

Mit der Auffassung, Wellenfunktionen seien unter anderem ein Maß des Wissens über das beschriebene System, taucht der von Heisenberg tatsächlich zuvor nirgends verwendete Kollaps der Wellenfunktion nun ganz automatisch in der Interpretation auf. Denn im Rahmen der hier beschriebenen Variante der Kopenhagener Deutung ist dieses Konzept gewissermassen unvermeidlich. Eine Beobachtung ändert die Wellenfunktion des betrachteten Systems un stetig, denn sie ändert die Kenntnis des Beobachters un stetig. Zuvor befand sich das System in einer „Superposition unterschiedlicher Möglichkeiten“, nach der Messung befindet es sich in einem objektiv beschreibbaren, faktischen Zustand, das heißt, sein Zustand hat sich geändert, und da wir durch die Messung davon Kenntnis erlangen, ändert sich gleichzeitig auch diese. Ist die Wellenfunktion ein Maß unserer Kenntnis des Systems, muß sie sich ebenfalls ändern – sie durchläuft den vielzitierten Kollaps, wobei hier natürlich ganz klar *kein* kinematischer, von irgendeiner Dynamik gesteuerter Vorgang gemeint ist.

Heisenberg formuliert insgesamt also eine Drei-Schritte-Theorie der quantenmechanischen Naturbeschreibung, die auch bei Bohr identifizierbar ist, dort jedoch unausgesprochen und ohne vergleichbaren philosophischen Stellenwert bleibt: Zunächst hat man die experimentelle Ausgangssituation in eine Wellenfunktion zu übersetzen, danach deren Zeitentwicklung durch Lösen der Schrödingergleichung zu verfolgen und mit Hilfe der Bornschen Regel die Wahrscheinlichkeiten für die möglichen Messwerte zu berechnen, um schließlich die beabsichtigte Messung vorzunehmen²¹⁶. Der zweite Schritt beschreibt dabei keinen in der empirischen Realität stattfindenden Prozeß, oder umgekehrt formuliert, es ist unmöglich, anzugeben, was mit dem System zwischen Präparation und Messung, das heißt während seiner Existenz als *Potentia* geschieht. Diesen Sachverhalt umschreibt man gemeinhin mit dem Begriff der *Nichtobjektivierbarkeit* des Zustands und der Eigenschaften eines quantenmechanischen Systems vor einer Messung. Man beachte dabei insbesondere, daß anders als bei Bohr sehr wohl von diesen Dingen gesprochen wird, wenn auch auf philosophisch verklausulierte Weise.

3.9.3.3 Carl Friedrich von Weizsäcker

Der dritte bedeutende Vertreter der Kopenhagener Deutung, der mit Recht von sich behaupten kann, eine wirklich eigene Variante derselben entwickelt zu haben²¹⁷, übernahm zwar

²¹⁶Das hat scheinbar starke Ähnlichkeit mit der in Anmerkung 168 des Abschnitts 3.9.1 bereits erwähnten axiomatischen Interpretation von Ludwig. Die Ähnlichkeit ist jedoch rein formal, da Ludwig zwar die drei Schritte ebenfalls beschreibt, dabei jedoch auf einer rein instrumentalistischen Position verharret und den mittleren Schritt strikt positivistisch nur als Formalismus zur quantitativen Beschreibung des Übergangs von der Präparation zur Registrierung verstanden wissen will.

²¹⁷Es ist bemerkenswert, spricht andererseits aber auch für das Selbstwertgefühl der drei Protagonisten, daß sie das selbst etwas anders gesehen haben und der Meinung waren, jeweils die einzige und richtige Kopenhagener Interpretation der Quantenmechanik zu vertreten. Das muß gar nichts mit *Selbstüberschätzung* zu tun haben; Bohr, Heisenberg und Weizsäcker waren einfach der Überzeugung, die notwendigerweise und alternativlos einzig richtige Auffassung gefunden zu haben und kamen damit wohl gar nicht auf die Idee, es könne davon noch andere Auffassungen geben. Insbesondere die beiden letzteren betrachteten die Interpretation des jeweils anderen als identisch mit der eigenen, trotz der nicht zu übersehenden Unterschiede.

natürlich von den anderen beiden wesentliche Details, seine Auffassung unterscheidet sich aber dennoch wiederum erheblich von der Konkurrenz [910] - [913]. Obwohl von Weizsäcker, zumindest was die hier betrachtete Thematik angeht, nicht mehr zur Anfangsphase der neueren Quantenmechanik zu rechnen ist, darf er hier gerade aufgrund der Eigenständigkeit seiner Interpretation nicht fehlen.

Um die Unterschiede zu verstehen, ist es sinnvoll, zunächst die Gemeinsamkeiten zu betrachten. Diese liegen nicht nur in der unmittelbaren physikalischen Anwendung der Theorie; natürlich akzeptiert von Weizsäcker sämtliche Elemente der Quantenmechanik wie die Schrödingergleichung als dynamische Gleichung für Wellenfunktionen, die Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation und ähnliches uneingeschränkt. Darüberhinaus gibt es auch zahlreiche Parallelen bezüglich der Interpretationen. Die wichtigsten Aspekte, die sich sowohl bei von Weizsäcker als auch bei seinen prominenten Kollegen finden, sind im Falle Bohrs der apriorische Charakter der klassischen Physik und im Falle Heisenbergs die Deutung der Wellenfunktion als Maß des Wissens über das betrachtete System. Die Parallelen sind dabei jedoch jeweils nur von vordergründiger Art.

Zunächst hält von Weizsäcker an der Bohrschen Konzeption fest, Experimente stets in der Sprache der klassischen Physik zu beschreiben; mehr noch, er erklärt diese These zum Zentrum der Kopenhagener Deutung. Auch seine Begründung dafür gleicht derjenigen Bohrs, wonach Meßergebnisse mitteilbar und damit objektivierbar sein müßten, was eine Beschreibung in raumzeitlichen Begriffen sowie das Prinzip der Kausalität erforderlich mache, und diese Dinge wiederum seien nur in der klassischen Physik miteinander vereinbar. Bei Bohr führt das wie gesehen zu einer Aufteilung der Welt in einen Bereich quantenmechanischer Meßobjekte und einen Bereich klassischer Meßgeräte. Die propagierte Unvermeidbarkeit der klassischen Physik wird damit zu einer unüberschreitbaren Grenze der Erkenntnisfähigkeit mit ontologischen Konsequenzen, denn Bohr zieht daraus den Schluß, daß es so etwas wie eine Quantenwelt gar nicht gibt; alles was die Quantenmechanik leisten kann, wäre dann die Beschreibung möglicher Ausgänge definierter experimenteller Anordnungen. Von Weizsäcker dagegen betrachtet das Apriori der klassischen Physik als eine rein methodische Angelegenheit, als eine zwar notwendige Voraussetzung für die Möglichkeit naturwissenschaftlicher Erkenntnis, bezogen jedoch auf einen Erkenntnisbereich, der ontologisch vorgeordnet ist²¹⁸. Auf diese Weise versucht er, einen Zusammenhang mit Kant herzustellen, das heißt, er betrachtet seine Version der Kopenhagener Deutung als etwas transzendentes²¹⁹. Damit tritt ein subtiler Unterschied zu Bohrs Auffassung zutage: Während letzterer davon spricht, daß Meßgeräte und Messungen klassisch beschrieben werden *müssen*, sagt von Weizsäcker stattdessen, sie *werden* klassisch beschrieben – einfach, weil wir nicht wissen, wie wir anders vorgehen sollen [910]. Aus einer erkenntnistheoretischen Notwendigkeit ist eine methodologische Maxime geworden.

Damit geht für von Weizsäcker nicht wie bei Bohr die klassische Physik der Quantenmechanik voraus, sondern es ist gerade umgekehrt: Die Quantenmechanik als Fundamentaltheo-

²¹⁸Sehr deutlich wird das, wenn von Weizsäcker sagt: „Die Natur ist älter als der Mensch, aber der Mensch ist älter als die Naturwissenschaft“ [913].

²¹⁹Vergleiche [211] und [212].

rie der gesamten Physik enthält mit dem Grenzfall der klassischen Physik gerade auch denjenigen Teil, der eine empirische Beschreibung ihres Gültigkeitsbereichs erst möglich macht. Von Weizsäcker räumt sehr wohl ein, daß das eigentlich ein erkenntnistheoretischer Zirkel ist, aber, wie er betont, ein notwendiger Zirkel. Das läßt sich exemplarisch am Beispiel der Unschärferelation veranschaulichen [503]. Da diese in der Auffassung der Kopenhagener Deutung aussagt, daß es keine Experimente gibt, mit der gewisse Größen gleichzeitig genau meßbar sind, bildet sie einerseits eine prinzipielle Grenze der Erkenntnisfähigkeit; andererseits ist sie ein Resultat der Quantentheorie und, was die Größe des Planckschen Wirkungsquantums angeht, sogar partiell ein Ergebnis von Messungen. Die Unschärferelation erweist sich hier also paradoxerweise gleichzeitig als transzendental und empirisch²²⁰.

Zur Bewältigung solcher scheinbarer Widersprüche verwendet von Weizsäcker ein von ihm entwickeltes Konzept, das er das *Prinzip der semantischen Konsistenz* nennt [911], [912]. Eine Theorie wird als semantisch konsistent bezeichnet, wenn das gesamte zur physikalischen Deutung des mathematischen Apparats der Theorie notwendige Vorverständnis selbst auch den Gesetzen der Theorie genügt. Das bedeutet insbesondere, daß die Theorie sämtliche zur Messung der in ihr vorausgesetzten Grundgrößen erforderliche Meßabläufe selbst als mögliche Naturvorgänge beschreibt [503]²²¹. Von Weizsäcker räumt ein, daß sich eine solche Forderung wohl stets nur in begrenztem Umfang erreichen lasse, vermutet anschließend aber, daß der Nachweis der semantischen Konsistenz für die Quantenmechanik in besonders weitem Umfang möglich sein sollte. Der oben erwähnte scheinbare logische Zirkel erweist sich damit in der Tat als notwendig, da er einen wesentlichen Anteil der semantischen Konsistenz der Quantenmechanik bildet, indem er die Möglichkeit garantiert, fundamentale, zunächst nur formal-mathematisch definierte Begriffe der Theorie auch experimentell interpretieren zu können. Insbesondere wird so auch die Eigenschaft der Unschärferelation, sowohl ein Urteil a priori als auch eines a posteriori zu sein, zu einer Forderung der semantischen Konsistenz. Der Anspruch der Quantenmechanik, eine fundamentale Theorie zu sein, macht die Unschärferelation und damit die Komplementarität gleichzeitig zu einer fundamentalen Einschränkung der Erkenntnisfähigkeit, die für jede mögliche Theorie gilt.

Jürgen Klüver konnte zeigen, daß sich mit der Forderung nach semantischer Konsistenz sämtliche Versuche, mit Hilfe verborgener Variablen die Quantenmechanik wieder in die klassischen Kategorien zurückzuführen, zurückweisen lassen [503]. Denn ihre Eigenschaft, verborgen zu sein, das heißt prinzipiell unbeobachtbar, bedeutet natürlich unmittelbar, daß die Theorie nicht mehr in der Lage ist, die Messung aller ihrer grundlegenden Größen im Rahmen ihrer selbst zu beschreiben. Dasselbe gilt für Kollapsmodelle, solange sie den Kollapsmechanismus ad hoc zur Quantenmechanik hinzufügen²²².

²²⁰Daß hier natürlich wieder eine *falsche* Interpretation der Unschärferelation verwendet wird, soll uns erst im nächsten Kapitel kümmern.

²²¹Als Beispiel für eine semantisch inkonsistente Theorie nennt von Weizsäcker die Hohlwelttheorie [913].

²²²Klüver beschreibt zusätzlich, wie die semantische Konsistenz als Argument gegen den Konventionalismus eingesetzt werden kann, indem man bei mehreren Theorien, welche die Erfahrung gleich gut wiedergeben, gerade nicht alle als gleichwertig betrachtet, sondern diejenige bevorzugt, die auch semantisch konsistent ist.

Die Auffassung der späteren Heisenbergschen Interpretation, Wellenfunktionen als Maß des Wissens über physikalische Systeme zu betrachten, wird durch von Weizsäcker nicht nur ausgebaut, sondern zur Grundlage der gesamten Interpretation gemacht, unabhängig davon, daß er selbst das soeben diskutierte Festhalten an der Sprache der klassischen Physik zur Beschreibung von Experimenten zum wichtigsten Aspekt ernennt. Das Wissen des Beobachters über ein System, subjektiv wie objektiv, wird zum alleinigen Gegenstand der Theorie erklärt: Die Quantenmechanik beschreibt, was der Beobachter über ein System wissen kann, und die Wellenfunktion dieses Systems wird als „Wissenskatalog“ betrachtet, das heißt, sie ist eine Liste aller möglichen Vorhersagen über das System. Wie bei Heisenberg ist auch bei von Weizsäcker der diskontinuierliche Informationsgewinn und damit die diskontinuierliche Änderung des Wissens verantwortlich für die unstetige Änderung der Wellenfunktion bei einer Messung und damit alles, was vom Kollaps der Wellenfunktion übrigbleibt. Anders als bei Heisenberg ist hier jedoch das Wissen über physikalische Systeme *alles*, worum es in der Quantenmechanik geht. Das geschieht im Prinzip in bester Kantscher Tradition, natürlich ohne starres Festhalten an dessen apriorischen Denkformen, aber sehr wohl mit der Überzeugung, daß Physik nichts mit der „wirklichen Wirklichkeit“ zu tun habe, sondern eben lediglich damit, was wir darüber wissen können²²³. Für exotische Realitätsformen wie Potentialitäten bleibt da kein Platz, denn um eine unbeobachtete Realität geht es an keiner Stelle. Davon unberührt bleibt natürlich die Feststellung, daß von Weizsäcker zu jeder Zeit die *Existenz* einer allerdings für den Menschen letztlich erkenntnistheoretisch unerreichbaren Realität voraussetzt.

Von Weizsäcker beansprucht, mit dieser Version der Kopenhagener Deutung die einzig konsistente Interpretation der Quantenmechanik zu vertreten. Insbesondere schiebt er sämtliche vermeintliche Paradoxien auf die nach seiner Ansicht unberechtigte Interpretationsten-

Seiner eigenen, strikt operationalistischen Linie folgend, verwirft er das ganze Konzept jedoch anschließend und vertritt stattdessen mit dem Argument, die Begründung eines jeden operationalistischen Ansatzes müsse die unmittelbare Praxis des handelnden Subjekts sein, deren Kategorien ausschließlich klassischer Natur seien, den Standpunkt, diese nicht nur beizubehalten, sondern gleich als ausschließlich verbindlich zu erklären. Damit müßten nichtklassische Theorien als fiktiv angesehen werden, selbst wenn sie empirisch richtige Vorhersagen machen, und folglich wären alle solche Theorien als gleichberechtigt anzusehen. Mehr noch, es müßten dann jenseits der klassischen Physik stets mehrere Theorien möglich sein; Klüver nennt als Beispiel die Kopenhagener Quantenmechanik und die Bohmsche Theorie. Das ist, wie er auch selbst ausführt, genau die Position des Konventionalismus. Wir kommen im nächsten Kapitel darauf zurück.

²²³Einen noch sehr viel deutlicher ausgeprägten und auch erklärtermaßen transzendentalphilosophischen Charakter weist Ernst Cassirers Interpretation der Quantenmechanik auf [150]. Cassirer nimmt zunächst eine Verschärfung der Kantschen Erkenntniskritik vor, indem er dieser nicht nur eine statische, sondern auch eine zusätzliche dynamische Form gibt, wonach sich das, was physikalisch existiert, erst nach und nach durch experimentelle und theoretische Bestimmbarkeit konstituiert. Diese Auffassung bringt er sehr pointiert zum Ausdruck, indem er die Vorstellung, naturwissenschaftliche Gesetzmäßigkeiten seien eine Folge der objektiven Wirklichkeit, verwirft und durch die These ersetzt, die Wirklichkeit existiere nur weil und sofern es Gesetzmäßigkeit gibt. In der Physik gehe es nicht um das Erkennen von Gegenständen, sondern um gegenständliches Erkennen, die Positionen von Gegenständlichkeit und Gesetzmäßigkeit werden folglich gerade vertauscht. Dieses Erkenntnisprinzip sieht Cassirer in der Quantenmechanik exakt verwirklicht. Letztere stellt in seiner Deutung das Idealbild der naturwissenschaftlichen Beschäftigung mit der Außenwelt dar, nämlich Systeme von Symbolen auszuarbeiten, welche die Wirklichkeit nicht abbilden, sondern erst konstituieren. – Zur transzendentalphilosophischen Deutung der Quantenmechanik vergleiche auch [844].

denz, Wellenfunktionen nicht nur als Maß des Wissens über ein System, sondern als eine reale physikalische Eigenschaft desselben zu betrachten. Die proklamierte Konsistenz seiner Interpretation belegt er mit dem Fehlen solcher Paradoxien in derselben.

Inwieweit diese und andere Deutungen der Quantenmechanik tatsächlich konsistent sind, werden wir im nächsten Abschnitt ein wenig diskutieren. Das geht dann zwar etwas über den gesteckten Rahmen des Buches hinaus, es ist aber eine für eine ihrerseits konsistente Darstellung der Anfänge der Quantenmechanik sinnvolle Ergänzung.

3.9.4 Kritik der Interpretationen

Die teilweise erheblichen Widersprüche der hier beschriebenen erkenntnistheoretischen Sichtweisen der Quantenmechanik machen es mehr als deutlich – es können nicht alle davon richtig sein. Der Autor des vorliegenden Buches vertritt die etwas radikalere Position, daß keine davon richtig ist, wohl wissend und mit der ausdrücklichen Zusatzbemerkung, daß diese Position selbst auch nur einen Bestandteil einer weiteren Interpretation darstellt und selbstverständlich keine apodiktische Gültigkeit beanspruchen kann, auch wenn mindestens einer dieser Meinungen ist. Ein paar Argumente dafür mögen aber immerhin zum Nachdenken anregen.

3.9.4.1 Alles nur Statistik?

Es dürfte wohl auf den ersten Blick widersprüchlich erscheinen, wenn man die statistische Deutung der Quantenmechanik einerseits als (nahezu) uneingeschränkt akzeptierte Minimalinterpretation der Quantenmechanik bezeichnet, sie aber andererseits unter dem Decknamen „Ensemble-Interpretation“ zu kritisieren trachtet. Der Widerspruch löst sich auf, wenn man sich daran erinnert, daß erstere eine rein technische Angelegenheit ohne jede weitergehende metaphysische Aussage ist, während letztere den durch und durch metaphysischen Standpunkt vertritt, sämtliche weitergehenden metaphysischen Aussagen seien sinnlos. Daher müssen hier auf den ersten Blick identische Inhalte jeweils ganz unterschiedlich bewertet werden.

Die Ensemble-Interpretation wird in der Tat genau dadurch problematisch, daß sie gewisse, eigentlich als Gebrauchsanleitung zur Produktion empirisch überprüfbarer Zahlenwerte aus dem quantenmechanischen Formalismus gedachte Sachverhalte weltanschaulich verabsolutiert. Ins Zentrum der Kritik rückt dabei die namengebende Behauptung, Wellenfunktionen seien stets als Beschreibung von Ensembles sehr vieler identischer Systeme, niemals aber von individuellen Einzelsystemen aufzufassen. Das beginnt schon damit, daß genaubesehen unklar ist, was man sich unter einem Ensemble überhaupt im Detail vorstellen soll [41]. Aus experimenteller Sicht sind darunter wohl Kollektionen von endlich vielen Systemen zu verstehen; aus mathematischer Sicht benötigt man jedoch Grenzprozesse und damit unendliche Ensembles, um Wahrscheinlichkeiten zu definieren. Bei endlichen Ensembles kommen im allgemeinen relative Häufigkeiten heraus, die von den theoretischen, durch die Betragsquadrate der Koeffizienten in den entsprechenden Superpositionen gegebenen Wahrscheinlichkeiten abweichen, wobei man annimmt, daß sich umso kleinere Abweichungen ergeben, je größer die Ensembles sind. Diese Annahme ist jedoch keineswegs zwingend, denn bei unendlichen En-

sembles stimmen die beiden Größen zwar im Prinzip überein, die Existenz der Grenzwerte ist dagegen generell keineswegs gesichert und im allgemeinen ein nichttriviales mathematisches Problem. Damit wird die Quantenmechanik entweder zu einer Theorie, die in wesentlichen Bereichen *prinzipiell nur Näherungsaussagen machen kann*, oder aber, was auf dasselbe hinausläuft, zwar exakte Aussagen macht, die aber *prinzipiell nur näherungsweise überprüfbar sind*²²⁴. Soll die Quantenmechanik die fundamentale Theorie sein, für die man sie mit guten Gründen hält, dann wären solche Einschränkungen inakzeptabel.

Nun ist das beschriebene Argument zwar eines, welches nicht auf die Ensemble-Interpretation beschränkt bleibt, sondern die Bornsche Wahrscheinlichkeitsdeutung der Quantenmechanik genauso trifft²²⁵; für eine Minimalinterpretation, die weitergehende Konzepte zuläßt, ist das jedoch in Ordnung. Wenn diese Auffassung allerdings als einzig zulässige angesehen wird, müssen andere Anforderungen gestellt werden. Zudem unterwirft man sich damit einer Beschränkung auf die Betrachtung von Ensembles vieler identischer Systeme, die nicht nur eine Beschreibung individueller einzelner Quantenobjekte ausschließt, sondern der Quantenmechanik die Zuständigkeit hierfür glattweg abspricht. Man steht dann allerdings ziemlich machtlos da, wenn man feststellt, daß es sehr wohl experimentelle Situationen und quantenmechanische Systeme gibt, bei welchen gerade individuelle Objekte ihren Auftritt haben und an diesen jeweils nur eine Messung und keinesfalls etwa ganze Meßreihen durchgeführt werden. Äußerst spektakuläre Fälle dieser Art sind mit dem Rastertunnelmikroskop²²⁶ erzeugte Konstellationen aus einzelnen Atomen, Elektronen oder dergleichen²²⁷. Weitere Beispiele liefern verschränkte Zustände aller Art. Verschränkung ist stets eine Eigenschaft individueller Quantensysteme, was ganz besonders beispielsweise an den in Abschnitt 3.7.3 bereits kurz erwähnten GHZ-Zuständen und den mit ihnen möglichen Entscheidungsexperimenten zu Ungunsten von Theorien mit lokalen verborgenen Parametern erkennbar ist. Solche Experimente liefern bereits bei *einzelnen* Messungen an *individuellen* Systemen Resultate, die zwar von der Quantenmechanik, nicht aber von ihren vermeintlichen klassischen Konkurrenten korrekt vorhergesagt werden.

Noch deutlicher wird der individuelle Charakter der Verschränkung bei der Dekohärenz, jenem Phänomen, mit dem sich das Auftreten einer scheinbar klassischen Welt als rein quantenmechanischer Effekt erweist. Ausgangspunkt ist hierbei das Postulat der universellen Gültigkeit der Schrödingergleichung und damit des Superpositionsprinzips²²⁸. Zwar folgt daraus

²²⁴Man beachte, daß das nichts mit der für alle physikalischen Theorien selbstverständlichen Einschränkung zu tun hat, daß deren Voraussagen aus technischen Gründen experimentell stets nur näherungsweise bestätigt werden können.

²²⁵Zum Problem der Interpretation des Begriffs „Wahrscheinlichkeit“ siehe auch Anmerkung 92 in Abschnitt 3.7.2.

²²⁶Diese raffinierteste aller Mikroskoptechnologien wurde 1982 von Binnig und Rohrer vorgestellt [65], [66].

²²⁷Insbesondere die Gruppe um Don Eigler in San Jose hat es hierbei zu wahrer Perfektion gebracht; die Positionierung einzelner Atome [233] oder das Einschließen einzelner Elektronen in „Quantenpferchen“ aus Eisenatomen auf Metalloberflächen [308] sind nur wenige Nachweise für ein Repertoire, das nicht nur aus physikalischer, sondern auch aus künstlerischer Sicht beeindruckend ist.

²²⁸Wie weitgehend das tatsächlich inzwischen nicht nur im mikro-, sondern auch im meso- und makroskopischen Bereich experimentell bestätigt ist, kann man eindrücklich in [772] nachlesen.

zunächst einmal, daß beliebige interferenzfähige Überlagerungszustände und damit insbesondere auch solche, deren Komponenten klassisch sich ausschließende Eigenschaften aufweisen, die Regel und keineswegs die Ausnahme sind; das würde beispielsweise solch verrückte Dinge beinhalten wie makroskopische Objekte, die sich an mehreren räumlich getrennten Orten gleichzeitig aufhalten oder ähnliches. Die Universalität geht jedoch noch viel weiter und führt zu einer Verschränkung aller nicht isolierter Objekte mit der gesamten Umgebung, da erstere mit letzterer stets wechselwirken. Die Konsequenz daraus ist die effektive Unbeobachtbarkeit makroskopischer Interferenzeffekte, da diese nur durch alle Freiheitsgrade der gesamten Umgebung berücksichtigende und damit technisch völlig undurchführbare Messungen nachweisbar wären. Die Verschränkung mit der Umgebung spielt sich dabei auf extrem kurzen Zeitskalen ab, das heißt, man beobachtet einen äußerst schnell ablaufenden Übergang des Systems in einen Zustand, in dem es sich völlig klassisch zu verhalten scheint, also beispielsweise scheinbar lokalisiert ist²²⁹. Das ist aber ein Vorgang, der fast genauso aussieht wie eine Zustandsreduktion, das heißt, er führt zu einem scheinbaren Kollaps der nur als Idealisierungen denkbaren Wellenfunktionen nicht isolierter Objekte, die in Wirklichkeit nicht durch eigene Zustände beschreibbar sind, da sie als Teilsysteme des verschränkten Gesamtsystems aus Objekt und Umgebung betrachtet werden müssen. Dessen Wellenfunktion wird niemals reduziert und existiert als globale Superposition. Dekohärenz-Prozesse sind damit Prozesse, die stets an einzelnen, individuellen Systemen stattfinden.

All das ist im Rahmen der Ensemble-Interpretation nicht zu verstehen. Die erfolgreiche Beschreibung der erwähnten Prozesse mit Hilfe von Wellenfunktionen ordnet letztere natürlich jeweils explizit den dabei betrachteten Systemen zu, sodaß mit ihnen notwendigerweise einzelne, individuelle Objekte beschrieben werden. Daß es sich dabei je nachdem, wie wenig man von der Idealisierung isolierter Zustände Gebrauch macht, möglicherweise um die ganze Welt handelt, ändert daran grundsätzlich nichts; auch wenn sich kein Physiker so recht vorstellen kann, wie die Wellenfunktion des Universums aussieht, kommt man aus erkenntnistheoretischer Sicht nicht daran vorbei, die Existenz von so etwas zu akzeptieren.

Die Frage, ob in der Quantenmechanik nur statistische Ensembles oder doch individuelle einzelne Systeme Gegenstand der Betrachtung sind, stellt nicht den einzigen Streitpunkt zwischen der Ensemble-Interpretation und weitergehenden Interpretationen dar. Erstere behauptet darüberhinaus, Wellenfunktionen beschreiben nur statistische Verteilungen der möglichen Ergebnisse zukünftiger Messungen und damit nichts reales. Eine solche Auffassung wird jedoch durch gewichtige Argumente für eine realistische Interpretation quantenmechanischer Wellenfunktionen zumindest stark erschüttert²³⁰. Das erkennt man bereits am Formalismus selbst. Betrachtet man beispielsweise zwei Wellenfunktionen der Form

$$\begin{aligned}\Psi &= N_1 (\alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2), & |\alpha_1| &= |\alpha_2| = 1, \\ \Phi &= N_2 (\beta_1 \psi_1 + \beta_2 \psi_2), & |\beta_1| &= |\beta_2| = 1,\end{aligned}$$

²²⁹Einige quantitative Beispiele findet man in [861] vorgerechnet.

²³⁰Sehr detailliert hierzu [947]; vergleiche auch [775] und [945].

(N_1 und N_2 sind dabei Normierungsfaktoren), so sind diese für $\alpha_1 \neq \beta_1$ oder $\alpha_2 \neq \beta_2$ im allgemeinen *physikalisch unterschiedlich* – man denke etwa an unterschiedlich kombinierte Superpositionen von Spinzuständen –, folglich sind Zustände, deren Wellenfunktionen sich nur um einen Phasenfaktor unterscheiden, ebenfalls physikalisch unterschiedlich, auch wenn sie experimentell ununterscheidbar sind²³¹. Das bedeutet, daß statistische Operatoren

$$\rho = (\psi, \cdot) \psi,$$

bei denen sich solche Phasenfaktoren herausheben²³², *nicht ausreichen, um quantenmechanische Zustände vollständig zu charakterisieren*²³³. Die Bedeutung der Wellenfunktionen kann daher nicht auf reine Statistik beschränkt sein. Sie müssen stattdessen als etwas *physikalisch reales* betrachtet werden, schon deshalb, weil sie mit ihren Eigenschaften reale Dinge, nämlich quantenmechanische Systeme aller Art, beeinflussen.

Das gilt dann notwendigerweise auch für Superpositionszustände, selbst wenn das dem klassisch geschulten gesunden Menschenverstand noch so sehr Hohn spricht²³⁴. Das Superpositionsprinzip ist wie schon mehrfach bemerkt die wichtigste Grundlage der Quantenmechanik überhaupt, denn das, was die Quantenmechanik so fremdartig und scheinbar paradox macht, liegt gerade an der Existenz interferenzfähiger Superpositionen. Dennoch ist jede Superposition genauso real wie jede ihrer Komponenten, denn einzelne Komponenten sind stets auch wieder als Superpositionen in geeigneten anderen Basen darstellbar. In dieser abstrakten Betrachtungsweise sind Wellenfunktionen als Superpositionen von Ortseigenzuständen in einem geeigneten Gelfandschen Raumtripel darstellbar, also als Überlagerungen eines Quantenobjekts an allen möglichen Orten. Die möglichen Orte eines durch eine Wellenfunktion beschriebenen Objekts wird man wohl als real akzeptieren, dann muß man aber auch Wellenfunktionen als deren Superpositionen als real betrachten [946], [950]. Sie können damit auf keinen Fall nur Wahrscheinlichkeitsamplituden und nichts weiter sein. Insbesondere beschreiben solche Superpositionen, deren Komponenten nicht gleichzeitig einfach Wellenfunktionen von räumlich getrennten Teilsystemen des Gesamtsystems sind, also beispielsweise Zustände,

²³¹Eine weiterer, ganz anderer Sachverhalt, der zeigt, daß Phasenfaktoren eben nicht bedeutungslos sind, ist das in Abschnitt 2.4.2 kurz erwähnte Auftreten von geometrischen Phasen bei Zustandsänderungen quantenmechanischer Systeme.

²³²In der weitverbreiteten Diracschen *Bra-Ket-Schreibweise* erhält das die Gestalt

$$\rho = |\psi\rangle \langle\psi|.$$

Eine ausführliche Darstellung dieser Schreibweise findet man in Diracs eigenem Lehrbuch der Quantenmechanik [206]. Der Bra-Ket-Formalismus ist jedoch mathematisch unpräzise und daher nur mit Vorsicht zu gebrauchen – ein Problem, das vielen seiner sehr zahlreichen Anwender gar nicht bewußt sein dürfte. Ursache dafür sind spezielle Eigenschaften unendlichdimensionaler Hilberträume und insbesondere auf ihnen definierter unbeschränkter linearer Operatoren. Näheres dazu findet man in [330] und [352]; vergleiche auch [841]. Versuche, den Bra-Ket-Formalismus wasserdicht zu machen, wie man sie etwa in [77] - [80], [234] und [235] oder [736] und [737] finden kann, sind mathematisch sehr aufwendig und nur bedingt als erfolgreich zu bezeichnen.

²³³Darauf hat Hans Dieter Zeh 1996 erstmals hingewiesen [946].

²³⁴Siehe hierzu insbesondere [946] und [947].

bei denen sich ein System an mehreren oder sogar unendlich vielen Orten gleichzeitig befindet, ebenfalls individuell beobachtbare und nicht nur statistische Eigenschaften.

Die Ensemble-Interpretation lehnt aber gerade eine solche Auffassung kategorisch ab und ist damit außerstande, gewisse quantenmechanische Subtilitäten zu beschreiben. Beispielsweise sind für sie klassische statistische Korrelationen und solche quantenmechanischer Art ununterscheidbar; erstere sind jedoch stets auf fehlende Informationen zurückzuführen, während letztere aufgrund von verschränkter Wellenfunktionen reale Sachverhalte darstellen [41]. Die Ensemble-Interpretation kann ganz generell nicht erklären, worin der Unterschied zwischen Superpositionszuständen und gemischten Zuständen besteht. Betrachtet man etwa ein vollständiges System $\{\varphi_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ von Eigenfunktionen eines selbstadjungierten Operators \hat{A} , eine Superposition in Form des reinen Zustands

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n \quad (3.103)$$

sowie den gemischten Zustand, der durch den Dichteoperator

$$\rho = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 (\varphi_n, \cdot) \varphi_n \quad (3.104)$$

beschrieben wird²³⁵, dann ist das, was diese beiden aus der Sicht der Ensemble-Interpretation im Hinblick auf eine Messung der durch \hat{A} repräsentierten Observablen statistisch und damit überhaupt beschreiben, ununterscheidbar. Der Dichteoperator des reinen Zustands hat jedoch die Gestalt

$$\rho_\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} c_n^* c_m (\varphi_n, \cdot) \varphi_m$$

und weist im Gegensatz zu demjenigen des gemischten Zustands, der diagonal ist, auch Außerdiagonalelemente auf²³⁶. Diese stehen bekanntlich für die Interferenzfähigkeit des betrachteten Zustands. Für die Ensemble-Interpretation ist ein solcher Ausdruck schlicht *nicht interpretierbar*. Sie muß sich auf ausweichende Aussagen zurückziehen, wie zum Beispiel, die durch den Operator \hat{A} beschriebene Eigenschaft sei bei einem System im obigen Zustand ψ „nicht objektivierbar“, womit gerade die Besonderheiten der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeiten gegenüber den klassischen ignoriert werden.

²³⁵Im Bra-Ket-Formalismus wird das zu

$$\rho = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|.$$

²³⁶Das schreibt sich

$$\rho_\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} c_n^* c_m |\varphi_n\rangle \langle \varphi_m|$$

im Bra-Ket-Formalismus.

Damit kann die Ensemble-Interpretation keine aus dem quantenmechanischen Formalismus begründbaren Aussagen über quantenmechanische Meßprozesse liefern, denn diese machen gerade aus Superpositionszuständen gemischte Zustände. Im Rahmen der Ensemble-Interpretation werden Ausdrücke der Form (3.103) ohne weitere Rechtfertigung nicht so wie sie dastehen, sondern stattdessen im Sinne von (3.104) verwendet, um damit zum Ausdruck zu bringen, daß durch eine Messung aus dem gesamten Ensemble das zum erhaltenen Meßwert gehörende Subensemble ausgewählt wird, das dann natürlich mit der richtigen Wahrscheinlichkeit vorkommt. Hierdurch wird eine quantenmechanische Messung jedoch von einem klassischen Zufallsexperiment ununterscheidbar, denn das ganze sieht nun so aus, als seien die Wahrscheinlichkeiten Eigenschaften der Subensembles, das heißt, als enthielte das gesamte Ensemble bereits im richtigen Mengenverhältnis Representanten aller möglichen Meßwerte, die dann jedoch als Eigenschaften der betrachteten Systeme bereits vor der Messung real sein müßten – das wären jedoch nichts anderes als verborgene Variablen²³⁷. Die Ensemble-Interpretation wehrt sich natürlich gegen diesen Vorwurf, indem sie sagt, alle Subensembles seien vor der Messung identisch. Dann ist man jedoch wieder bei der Bornschen Wahrscheinlichkeitsregel und steht völlig ohne Interpretation da, man braucht somit wieder einen Kollaps der Wellenfunktionen.

Die Ensemble-Interpretation ist folglich entweder identisch mit der Minimalinterpretation der Quantenmechanik, sodaß eine weitergehende Interpretation erforderlich ist, oder sie führt auf verborgene Variable; beides sind Dinge, die sie eigentlich gerade überflüssig zu machen verspricht. Ein Ausweg aus diesem Dilemma scheint höchstens darin zu liegen, daß man postuliert, bei quantenmechanischen Messungen erfolge ein physikalischer Prozeß, der zur Auswahl des richtigen Subensembles führt. Wenn das jedoch kein Kollaps der Wellenfunktion sein soll, müßte im Prinzip ein Zurückverfolgen des bei der Messung gefundenen Subensembles auf den ursprünglichen Zustand gemäß der Schrödingergleichung möglich sein. Also erfordert die Ensemble-Interpretation einen komplizierten und geheimnisvollen nichtlokalen Hintergrundmechanismus, um konsistent zu arbeiten [946]. Abgesehen davon, daß das ihrer eigentlichen Intention diametral zuwiderlaufen würde, gibt es für so etwas selbstverständlich keinerlei experimentelle Hinweise.

Der so unbestreitbare wie uneingeschränkte Erfolg der Bornschen Wahrscheinlichkeitsregel sollte konsequenterweise nicht dahingehend mißverstanden werden, gleich eine ganze physikalische Weltanschauung daraus zu machen. Dabei ist die beschriebene Argumentation gleichzeitig als generelle Kritik an sämtlichen instrumentalistisch-positivistischen Interpretationen der Quantenmechanik zu verstehen. Insbesondere die Indizien, die für eine realistische Deutung quantenmechanischer Wellenfunktionen sprechen, lassen eine ebensolche Deutung des gesamten Formalismus der Quantenmechanik als sehr viel aussichtsreichere Grundlage für deren Interpretation erscheinen. Wir kommen im vierten Kapitel darauf zurück.

²³⁷Details hierzu findet man in [272] und [774].

3.9.4.2 Klassische Meßgeräte und nichtklassische Meßobjekte?

Es wurde bereits erwähnt, welchen Stellenwert die Kopenhagener Deutung oder das, was zuweilen dafür gehalten wird, bei einer großen Anzahl der Fachkolleginnen und -kollegen genießt; Kritik daran könnte daher durchaus den Verdacht der Anmaßung hervorrufen. Allein, es gibt keine Mehrheitsentscheidungen in der Physik, und so können wir dem großen Nebel aus dem Norden [775] eine Auflistung seiner problematischen Aspekte nicht ersparen.

Das Beharren auf die Unverzichtbarkeit der klassischen Physik ist gleich einmal der erste und wohl auch der schwerwiegendste Anlaß zur Kritik. Die Feststellung, daß das Prinzip der Einheitlichkeit der Naturgesetze ein Nebeneinander zweier sich völlig widersprechender Theorien inakzeptabel macht, ist dabei eher unwesentlich, da sich Bohr wie beschrieben eine rein semantische Koexistenz vorstellt. Das macht die Sache jedoch nicht besser, wie wir gleich sehen werden.

Die besonders ausgezeichnete, weil klassisch beschreibbare Rolle, die Meßgeräte spielen sollen, wird von Bohr zwar unter anderem durch eine erkenntnistheoretische Analyse des Meßprozesses begründet (man muß mitteilen können, was man gemessen hat [96]), diese Begründung ist jedoch inkonsistent – es sei denn, man unterstellt Bohr jene positivistische Einstellung, die er selbst zweifellos stets von sich gewiesen hätte, und akzeptiert, daß die Quantenmechanik nicht eine Beschreibung der Eigenheiten der Mikrowelt, sondern der Möglichkeiten von Beobachtern liefert, die mit makroskopischen Größen und Begriffen arbeiten [75]. Diese Beschreibung wäre weder eine solche des betrachteten Quantensystems noch eine des verwendeten Meßgeräts, sondern lediglich von Beziehungen zwischen diesen beiden [414]. Kurz gesagt beschreibt die Quantenmechanik nach Bohr Korrelationen zwischen klassischen Phänomenen und sonst nichts [321], weil sie und mit ihr das erkennende Subjekt gemäß seiner Auffassung prinzipiell gar nicht mehr leisten kann und auch niemals leisten können wird [91].

Wie unhaltbar eine solche These ist, hat Paul Feyerabend besonders deutlich gezeigt. Dazu liefert er zunächst eine interpretierende Zusammenfassung der wie üblich kryptischen Begründungen, die Bohr für sein Festhalten an den klassischen Begriffen liefert [284]: Danach führt erstens die Wirkung der historisch-langzeitigen Verwendung klassisch-physikalischer Begriffsbildungen zu einer entscheidenden Beeinflussung nicht nur unseres Denkens, sondern insbesondere auch unserer Verfahrensweisen und Experimentierverfahren. Zweitens führt die Tatsache, daß nur Theorien gebildet werden, die durch Beobachtungen gestützt werden, zu einer psychologischen Unmöglichkeit, nichtklassische Begriffssysteme zu entwickeln. Und drittens schließlich sorgen die vorhandenen klassischen Methoden und Wahrnehmungsformen dafür, daß nur klassische, keineswegs jedoch nichtklassische Weltbilder logisch und psychologisch mit der Beobachtungssprache und deren Interpretation vereinbar sind²³⁸. Anschließend

²³⁸ Jürgen Habermas formuliert das in [369] kürzer und anders, aber inhaltlich ähnlich, allerdings ohne daraus eine Gegenposition zur Kopenhagener Deutung zu formulieren. Dazu paßt sie vermeintlich zu gut in seine eigene Ideologie der interessengesteuerten Erkenntnis, wonach „radikale Erkenntniskritik nur als Gesellschaftskritik möglich ist“ – ein klassischer naturalistischer Fehlschluß. Das Konzept scheitert auch an der grundsätzlichen Selbstwidersprüchlichkeit jeder konstruktivistischen Erkenntnistheorie. Zur Kritik des Konstruktivismus ausführlich [914] und [915].

hebelt Feyerabend diese Argumente elegant durch ein paar Gegenbeispiele aus [284], [290]. Eine solche Argumentation ließe sich nämlich völlig analog auf die aristotelische Physik oder das geozentrische Weltbild anwenden; deren Überwindung und Ablösung durch neue Begriffsbildungen wäre dann völlig unverständlich.

Akzeptieren wir Bohrs Haltung dennoch für einen Moment, so müssen wir auch akzeptieren, daß es eine Art a priori Verständnis für experimentelle Resultate gibt, das sich unter anderem in der sachgemäßen Verwendung einer fachlich verfeinerten Umgangssprache äußert; vereinfacht gesagt meint Bohr genau das und nichts anderes mit seinem Postulat der Unverzichtbarkeit der klassischen Physik²³⁹. Eine solche Vorstellung ist jedoch gänzlich unhaltbar, denn die theoretische Physik selbst entscheidet erst, was was tatsächlich beobachtbar ist²⁴⁰. Ohne Theorie kann man nicht einmal zum Ausdruck bringen, was man bei Experimenten überhaupt zu messen gedenkt. Der Weg der Erkenntnis verläuft trotz vermeintlich gegenteiliger Erfahrungen eben nicht von irgendwelchen theorieunabhängigen Phänomenen zu einer Theo-

²³⁹Hier findet man eine zwar nur entfernte, aber dennoch auffällige Parallele von Bohrs Ansichten zu denjenigen einer speziellen wissenschaftstheoretischen Randgruppe, die Jahrzehnte nach Bohr das Ziel einer apriorischen Begründung gewisser Konzepte der Experimentalphysik in ganz anderer Weise erneut anvisierte. Im Rahmen des sogenannten *Erlanger Programms* versuchten unter anderem R. Inhetveen [452], P. Janich [465], [466], [467], F. Kambartel [485], P. Lorenzen [558], [559] und H. Tetens [862] - [865], [867], die Physik generell als reine Technikwissenschaft, genauer gesagt als Disziplin zur Bereitstellung von technischem Verfügungswissen zu beschreiben. Sie bewegten sich dabei auf der Basis der unter anderem auf Hugo Dingler [189] - [192] zurückgehenden und später insbesondere auch von Bruno Thüring [877], [878], [879] vertretenen sogenannten *Protophysik*, einer Variante der konstruktivistischen Wissenschaftstheorie, welche sich der Lösung des *Begründungsproblems* der Wissenschaften für den speziellen Fall der Physik verschrieben hat. Dieses Begründungsproblem ist der Ausdruck der Tatsache, daß man streng betrachtet nicht wirklich wissen kann, ob Wissenschaft wahre Erkenntnis liefert. Die Protophysik beansprucht eine partielle Lösung dieses Problems, indem sie die Physik allein aus den an grundlegende Meßverfahren zu stellenden Vorschriften zu rekonstruieren versucht. Dabei kommt in letzter Konsequenz die vermeintlich alleinige Gültigkeit der euklidischen Geometrie und der klassischen nichtrelativistischen Physik heraus sowie eine entsprechend strikte Ablehnung der speziellen und allgemeinen Relativitätstheorie – was allein schon genügt, das gesamte Programm zu diskreditieren. Die bewußte oder unbewußte Bezugnahme auf derart obskure Gestalten wie Dingler und Thüring sollte zusätzliches Mißtrauen wecken; daß diese beiden im dritten Reich überzeugte Nationalsozialisten waren, sei nur am Rande vermerkt und hat mit Kritik an ihrer wissenschaftlichen Tätigkeit nur insofern, aber dafür umso drastischer zu tun, als sie sich der jeweils antisemitisch geprägten Hetze gegen Relativitätstheorie und Quantenmechanik und der Forderung nach einer „deutschen“ Physik anschlossen, die von Lennard, Stark und anderen ausging. Ziel der protophysikalischen Bemühungen war im wesentlichen die klassische Physik; ein zaghafter Versuch, die Sache auf die Quantenmechanik auszudehnen, wurde von Tetens veröffentlicht [866], der dabei jedoch mit Hinweis auf den vorgeblich „fiktionalen Charakter der Mikroobjekte“ vorsätzlich und gleichermaßen im Konstruktivismus steckenblieb. Befürworter wie Gegner der Protophysik kommen in [38] und [76] zu Wort, einen allerdings eher unkritischen Überblick der Thesen der Erlanger Schule findet man bei [459]. Beides, das Erlanger Programm wie auch die Protophysik, dürfen als gescheitert betrachtet werden, was sowohl an physikalischen Unzulänglichkeiten im speziellen als auch an der erwähnten Selbstwidersprüchlichkeit konstruktivistischer Erkenntnistheorien im allgemeinen liegt, wie sie etwa auch in der selbstreferentiellen Formulierung von obiger Charakterisierung des Begründungsproblems erkennbar ist. Zur Kritik der Protophysik siehe exemplarisch [137], [218] und [219].

²⁴⁰„Erst die Theorie entscheidet darüber, was überhaupt beobachtbar ist.“ Das Zitat stammt von Einstein, der es 1926 in Berlin bei einem Kolloquium von Heisenberg über Quantenmechanik zu diesem sagte [405]. Einsteins Intention dabei entspricht allerdings nicht genau der hier vertretenen.

rie, sondern umgekehrt von einer Theorie zur Fähigkeit, Phänomene zu beobachten und sie zu erklären²⁴¹. Die Theorie ist jedoch uneingeschränkt quantenmechanisch und mit ihr alles, was in ihren Gültigkeitsbereich fällt²⁴². Physikalische Systeme sind folglich längst quantenmechanisch beschrieben, *bevor* irgendein Experimentator, dessen Fixierung des Meßapparates und seine anschließenden Beobachtungen überhaupt ins Spiel kommen²⁴³. Damit erweist sich die Forderung, der klassischen Physik eine Unentbehrlichkeit zur Beschreibung von Messungen einzuräumen, als unhaltbar. Prinzipiell ist eine quantenmechanische Beschreibung auch dort erforderlich, wo Bohr klassisches Vorgehen für unumgänglich hält. Die klassische Beschreibung von Meßgeräten und Meßergebnissen ist eine *Näherung*, wie jede andere klassische Beschreibung physikalischer Phänomene. Ganz im Gegenteil stellt sich nun die neue, weiter oben bereits diskutierte und weiter unten erneut zu diskutierende Frage, wie es eigentlich sein kann, daß es überhaupt Sachverhalte gibt, die klassisch beschrieben werden können.

Diese Frage dürfte zwar für positivistisch eingestellte Gesellen irrelevant erscheinen, aber so wollen wir ja gerade nicht argumentieren. Auch Bohr selbst hegte gewisse Zweifel an seiner eigenen Courage²⁴⁴. Er erklärte mehrfach, Meßgeräte seien große, schwere, starre Geräte, die deshalb eine praktisch völlig klassische Beschreibung gestatteten. Das mag für sich genommen und zum Teil richtig sein, ist jedoch als Begründung für Bohrs Unverzichtbarkeit der klassischen Physik ebenfalls unbrauchbar, denn auch für solche Geräte gilt in Wirklichkeit nur die Quantenmechanik; außerdem gibt es sehr wohl auch Meßapparate, die selbst keine klassische Beschreibung mehr gestatten. Und selbst wenn das doch der Fall ist, hat man es tatsächlich mit nur scheinbar klassischem Verhalten der Meßgeräte zu tun, wie die Theorie der Dekohärenz lehrt. Insbesondere löst sich damit der in Bohrs Deutung unvermeidliche Widerspruch auf, wonach Meßgeräte gleichzeitig klassisch (als Registriergeräte) und quantenmechanisch (in ihrer Wechselwirkung mit dem Meßobjekt) betrachtet werden müßten²⁴⁵.

²⁴¹Wieder fällt eine Analogie zu einem ganz anderen Gebiet auf, nämlich von Bohrs phänomenologisch geprägtem Prioritätsanspruch klassisch zu beschreibender Messungen und Martin Wagenscheins vergeblichem Versuch, die gesamte (Schul-)physik aus vorgeordneten, unmittelbaren Phänomenen erhalten zu können [900], [901]. Kritisches hierzu bei H. Muckenfuß in [623] und [624]. Auch Wagenschein übersieht, daß das vermeintlich unmittelbare gar nicht unmittelbar ist.

²⁴²In dieser Hinsicht widerspricht sich Bohr bei seinen Gegenargumenten zu Einsteins Versuchen, die Unschärferelation auszuhebeln, wiederholt selbst. Die Idee ist dabei stets die selbe, Einstein schlägt die gleichzeitige Messung komplementärer Größen eines Systems an zwei korrelierten Objekten vor, eine direkt am ersten, eine indirekt am zweiten. Bohrs Reaktion ist ebenfalls immer gleich, er wendet ein, daß auch für das zweite Objekt Unschärferelationen gelten. Aber das zweite Objekt dient hierbei als Meßgerät und müßte dann nach Bohrs eigener Philosophie klassisch beschrieben werden.

²⁴³Hierin findet sich der Ausgangspunkt für eine auch heute noch weitverbreitete Fehlinterpretation, nämlich die Unterscheidung der Fixierung der Meßapparatur und des Meßprozesses, die später bei Günther Ludwig die erwähnte, formal virtuose, aber extrem artifizielle Ausarbeitung in Gestalt seiner Theorie der Präparations- und Registrierungsverfahren und deren Relationen zueinander erfuhr. Eine solche Unterscheidung ist nicht zu rechtfertigen, denn Präparationen sind Messungen, genau wie Messungen neue Zustände präparieren.

²⁴⁴Bohr hatte keine positivisten Absichten, argumentierte aber positivistisch, um Interpretationsprobleme zu umgehen, die er glaubte, nicht anders lösen zu können, wie Peter Mittelstaedt einmal treffend bemerkte [618]. Zum Verhältnis von Kopenhagener Deutung und Positivismus siehe auch [136].

²⁴⁵Zwei weitere, von Carsten Held stammende, sehr geistreiche Einwände gegen Niels Bohrs Sicht der Welt

Das ganze kulminiert in dem begründeten Vorwurf, die Kopenhagener Deutung in der Bohrschen Fassung postuliere eine Beschränkung der physikalischen Realität, welche anzuerkennen die völlige Aufgabe jeder Form des erkenntnistheoretischen Realismus zur Folge hätte und überdies eine Kapitulation vor dem quantenmechanischen Meßproblem darstellt. Nimmt man zur Kenntnis, welche Fortschritte die Theorie der Dekohärenz inzwischen gemacht hat, findet man keinerlei Anlaß, sich einer derartigen freiwilligen Erkenntnisbeschränkung zu unterwerfen²⁴⁶. Ganz allgemein erweist sich eine realistische Einstellung als einzig vernünftige Arbeitshypothese, um dem überwältigenden Einfallsreichtum der Natur angemessen zu begegnen; mehr dazu im nächsten Kapitel.

Kann man Bohrs Plädoyer für die Unvermeidlichkeit der klassischen Physik trotz all der beschriebenen Kritik zumindest in sich noch eine gewisse Konsequenz zugestehen, so sind seine Auffassungen zur Natur des Meßprozesses einfach unverständlich. Die seiner Ansicht nach prinzipiell unkontrollierbaren Dinge, die bei Messungen passieren, sollen Ursache des statistischen Charakters der Aussagen der Quantenmechanik sein. Das kann nicht funktionieren, ganz egal was man sich genaueres unter dieser diffusen Aussage vorzustellen versucht. Entweder sind die unkontrollierbaren Wechselwirkungen physikalischer Natur, dann wäre die Quantenmechanik jedoch nicht vollständig, sondern nur eine merkwürdige klassische statistische Mechanik, hinter der verborgene Variablen lauern²⁴⁷. Oder sie sind nicht physikalisch, dann kommt jedoch, da der Experimentator schließlich stets ein Meßresultat erhält, ein noch merkwürdigeres, subjektivistisches Element ins Spiel, das schnell ins esoterische abdriftet, wie die psychophysikalischen Ideen etwa von Wigner und von Neumann in diesem Zusammenhang zeigen²⁴⁸. Es bleibt uns einfach nichts anderes übrig, als der statistischen Natur der Quantenmechanik den Status einer nicht weiter hinterfragbaren Eigenschaft der physikalischen Welt zuzugestehen.

Mit der Ganzheitlichkeit quantenmechanischer Phänomene und der Komplementarität sollte man weniger unbarmherzig umgehen; ähnlich wie Heisenberg bei seiner Unschärfere-lation muß man auch Bohr zugestehen, daß er noch viel zu wenig über Quantenmechanik wissen konnte, um die richtigen Ideen, die er beim Konzept der Relationalität quantenmecha-

sollen hier ergänzend ebenfalls Erwähnung finden [411]. Zum einen moniert er die von Bohr gleichzeitig postulierte Begrenztheit und Unentbehrlichkeit der klassischen Begriffe. Denn das würde bedeuten, daß die Quantenmechanik zwar zu einer Begrenztheit der Erkenntnisformen führt, aber gerade damit jenseits der Grenzen der Erkenntnis liegt, was absurd ist. Zum anderen erkennt Held den extremen Anthropozentrismus, der in der Kopenhagener Deutung liegt, da dort die Begrenztheit des menschlichen Erkenntnisvermögens zur Begrenztheit der Realität erhoben wird. Intelligente Lebewesen, die in der Lage sind, quantenmechanische Effekte wahrzunehmen, würden eine völlig andere Naturbeschreibung liefern.

²⁴⁶Schlosshauer und Camilleri vertreten in [777] die Auffassung, die Dekohärenz rechtfertige zumindest eine pragmatische Interpretation der Behauptung, Experimente und Meßgeräte müßten klassisch beschrieben werden. Auch diese eingeschränkte Zustimmung zu Bohrs These ist nicht haltbar. Richtig ist vielmehr, daß die Dekohärenztheorie erklärt, warum Experimente und Meßgeräte in bestimmten Fällen und in gewissem Rahmen klassisch beschrieben werden *können*.

²⁴⁷Überdies wäre die relativistische Kausalität damit zumindest in Frage gestellt.

²⁴⁸Bohr selbst hätte auf diese Kritik natürlich mit dem Hinweis reagiert, die Wechselwirkungen bei quantenmechanischen Messungen seien keines von beiden, es gehe schließlich nur um die Bedingungen der Erkenntnisgewinnung an sich und nicht um die Natur selbst. Das bedeutet jedoch wieder Positivismus.

nischer Zustände und seiner Version der Komplementarität sehr wohl hatte, in auch heutigen Ansprüchen genügende korrekte Physik zu übertragen. Bei ersterem könnte man mit etwas Wohlwollen sogar von einer vagen Vorahnung der Dekohärenztheorie sprechen, mit zwei drastischen Einschränkungen allerdings. Erstens fehlt der Bezug auf die gesamte Umgebung des betrachteten Objekts, und zweitens wäre Bohr niemals davon abgewichen, die Sache rein epistemisch und eben nicht realistisch aufzufassen²⁴⁹. Ähnlich sieht es bei letzterer aus; wie bereits angedeutet läßt sich das Komplementaritätsprinzip inzwischen als eine präzise Aussage der mathematischen Physik formulieren, was jedoch erst in den neunziger Jahren des vorigen Jahrhunderts wirklich deutlich wurde. Die von Scully, Englert und Walther [263], [805] eingeführte moderne Definition des Begriffs „komplementär“ lautet folgendermaßen: *Zwei Observablen heißen komplementär, falls bei genauer Kenntnis der einen alle möglichen Meßwerte der anderen mit gleicher Wahrscheinlichkeit vorkommen.* Sind zwei Meßgrößen komplementär, dann streuen die Meßwerte der einen beliebig, wenn die andere streuungsfrei gemessen wird und umgekehrt. Das Komplementaritätsprinzip besagt dann, daß in der Quantenmechanik zu jedem Freiheitsgrad zwei dynamische Variablen existieren, die komplementär sind [263], [805]²⁵⁰. Daraus folgt insbesondere bei jedem quantenmechanischen System und jeder möglichen Präparierung desselben die Existenz einer Meßgröße, bei deren Messung das Ergebnis nicht vorhergesagt werden kann. Formal bringt das Komplementaritätsprinzip für zwei komplementäre Observablen A und B und beliebige Eigenzustände ψ_A und ψ_B der zugehörigen Operatoren \hat{A} und \hat{B} zum Ausdruck, daß die bedingten Wahrscheinlichkeiten, einen Eigenzustand von A anzutreffen, wenn vor der Messung von A ein solcher von B vorliegt oder umgekehrt, also die Größen $|(\psi_A, \psi_B)|^2 = |(\psi_B, \psi_A)|^2$, unabhängig von den Eigenwerten von \hat{A} und \hat{B} sind²⁵¹. Beispiele für komplementäre Größen sind – wenig überraschend – Ort und Impuls, oder auch unterschiedliche Komponenten quantenmechanischer Drehimpulse²⁵².

²⁴⁹Michael Esfeld versucht aufbauend auf der Idee der Relationalität quantenmechanischer Zustände in Verbindung mit Verschränkung und Dekohärenz, daraus gleich eine komplette Naturphilosophie der Relationen zwischen physikalischen Systemen zu entwickeln, welche die traditionelle Auffassung einer Welt aus voneinander unabhängigen Dingen mit intrinsischen Eigenschaften ablösen soll [267] - [270]. Die Aufgabe der Vorstellung der Unabhängigkeit ist natürlich nichts neues und gerade Ausdruck der universellen Existenz von Verschränkungen. Wie man jedoch ganz ohne intrinsische Eigenschaften auskommen soll, ist eine ganz andere Frage.

²⁵⁰Vergleiche auch [144]. Englert und Walther betonen in [263], daß das von ihnen formulierte Komplementaritätsprinzip von Schwinger in einer früheren Arbeit [804] in gewissem Sinn bereits vorweggenommen wurde. Ein weiterer früher Versuch der Formalisierung stammt von Bedau und Oppenheim [46], die allerdings ähnlich wie Bohr über das Ziel hinausschossen, indem sie ihre Bemühungen weit über die Physik hinaus auf andere Wissenschaftsdisziplinen ausdehnten. Zur mathematischen Rekonstruktion des Komplementaritätsprinzips vergleiche auch [379], [808] und [809].

²⁵¹Man beachte, daß diese Formulierungen des Komplementaritätsprinzips nichts mit der Heisenbergschen Unschärferelation zu tun haben. Eine Kommutatorrelation der Form $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar \mathbf{1}$, wie sie die Grundlage der allgemeinen Unschärferelation darstellt, ist für die Eigenschaft von A und B , komplementär zu sein, weder notwendig noch hinreichend [263]. Beispiele für nichtkomplementäre Observablen, die kanonische Vertauschungsrelationen erfüllen, liefern [56] und [314].

²⁵²Das kann man jeweils durch direkte Berechnung gemischter Skalarprodukte der entsprechenden Eigenzustände beweisen, siehe beispielsweise [263]. Dabei wird insbesondere auch deutlich, daß es sich beim Kom-

Man sieht sofort, daß dieses mathematische Komplementaritätsprinzip ziemlich genau dem entspricht, was sich aus dem diffusen Wirrwar der zahlreichen Aussagen Bohrs hierzu an konkreter Physik herauslesen läßt. Das zeigt zwar, daß Bohr dabei eine bedeutende Entdeckung gemacht hat, ändert aber nichts an der bereits erwähnten, unter anderem durch das damalige unzureichende Verständnis der neueren Quantenmechanik bedingten unbefriedigenden bis fehlerhaften Umsetzung seiner Idee. Erkennbar wird das in erster Linie an Bohrs Zielsetzung, das Komplementaritätsprinzip zur Überwindung des vermeintlich drängendsten Problems der noch jungen Theorie heranzuziehen, nämlich dem vergeblichen Versuch, mit dem Welle-Teilchen-Dualismus klarzukommen. Dabei unterlaufen ihm Fehleinschätzungen sowohl was die experimentelle, als auch was die theoretische Seite der Sache angeht²⁵³. Bohr setzt einerseits unerlaubterweise voraus, daß mit der Teilchen- und der Wellenvorstellung zwei klassisch sich vollständig widersprechende Theorien experimentell wohletabliert seien, was er bei ersterer mit dem Energieerhaltungssatz, bei letzterer mit der Deutung von Interferenzphänomenen mit Hilfe des Wellenmodells rechtfertigt. Das führt zur falschen Strategie, zunächst die widersprüchlichen Bilder ganz zu akzeptieren, um dann den Widerspruch durch die Unterschiedlichkeit und daraus folgende fehlende gleichzeitige Durchführbarkeit der entsprechenden Experimente aufzulösen. Eine solche Strategie funktioniert aber nicht, was an Experimenten erkennbar ist, bei welchen beide Bilder zur Beschreibung erforderlich sind oder solche, bei denen beide nicht funktionieren. Man muß dabei allerdings das Zugeständnis machen, daß das erst in neuerer Zeit auch experimentell richtig deutlich wurde, etwa anhand von Interferenzexperimenten mit einzelnen Photonen oder einzelnen materiellen Teilchen. Außerdem versucht Bohr, die beiden Bilder formal durch die fehlerhafte Gleichsetzung von Wellen mit Wellenmechanik und Teilchen mit Matrizenmechanik in den Griff zu bekommen. Wieder verfolgt er daraufhin eine falsche Strategie, nämlich diejenige, mit Hilfe der Äquivalenz der Theorien den Widerspruch zwischen Wellen- und Teilchenbild aus der Welt zu schaffen. Dabei bedeutet diese Äquivalenz gerade im Gegenteil, daß beide Theorien mathematisch isomorph, damit physikalisch identisch und folglich auf alle Systeme gleichermaßen anwendbar sind. Es zeigte sich schließlich, daß das Komplementaritätsprinzip nicht „Lösung“ des Welle-Teilchen-Dualismus ist (was immer das heißen soll), sondern dessen Ausdruck.

Eine ganz andere Form der Kritik an Bohrs Umgang mit dem Konzept der Komplementarität wiegt weitaus schwerer. Nach und nach verwendet er den Begriff auch außerhalb der Physik in allen möglichen Kontexten, beispielsweise in der Biologie, Psychologie oder Anthropologie, um sich schließlich zu der Behauptung zu versteigen, das Komplementaritätsprinzip sei ein ganz allgemeines, fundamentales philosophisches Prinzip, das in allen wissenschaftlichen Disziplinen Gültigkeit beanspruchen könne [91], [93], [94]. Man muß gar nicht erst

plementaritätsprinzip in seiner mathematisch-formalen Gestalt nicht wirklich um ein eigenes Naturprinzip, sondern eher um eine Folgerung aus dem statistischen Charakter der Quantenmechanik handelt. Das soll die Leistung von Scully, Englert und Walther keinesfalls schmälern, die in erster Linie darin besteht, einem bis dahin diffusen Begriff eine präzise Definition verschafft zu haben.

²⁵³Eine ausführliche Darstellung dieses hier nur kurz erwähnten Sachverhalts findet man in [411].

moderne mathematische Versionen des Komplementaritätsprinzips zu Rate ziehen, um zu sehen, daß das kompletter esoterischer Unsinn ist²⁵⁴.

Man fügt Niels Bohr gewiß kein Unrecht zu und macht sich auch keiner mangelnden Würdigung seiner zweifellos bedeutenden Beiträge zur modernen Physik schuldig, wenn man nichtsdestotrotz der allgemeinen Ehrfurcht vor seinen Werken und Aussagen ein wenig entgegentritt. Die Schwierigkeiten, die jede und jeder bei der Lektüre und dem Verständnis eines nicht unerheblichen Teils seiner Schriften hat, ganz gleich ob zugegebenermaßen oder nicht, haben nichts mit einer nur angeblich vorhandenen spektakulären, das Fassungsvermögen der meisten Menschen überschreitenden Tiefsinnigkeit und Genialität zu tun, sondern vielmehr mit einer verbreiteten obskuren Argumentation, einem kryptischen, äußerst unklaren Stil und der Tendenz, ins Irrationale abzudriften. Bohr war ein großer Physiker, aber ein mäßiger Philosoph.

Heisenberg und von Weizsäcker pflegten sich wesentlich klarer auszudrücken; soweit sie in ihren Interpretationen der Quantenmechanik mit Bohr übereinstimmten, trifft jedoch aus inhaltlicher Sicht die selbe Kritik auch auf sie zu. Wie gesehen war Heisenberg trotz seiner anfänglich erklärten Absicht, von jeglichen anschaulichen und damit klassischen Vorstellungen Abstand zu nehmen, zunächst noch sehr viel mehr als Bohr in ebendiesen verhaftet. Insofern lassen sich erst seine späteren Ausführungen sinnvoll philosophisch kritisieren. Im Rahmen der Ergänzungen und Veränderungen, die er und von Weizsäcker jeweils an der Kopenhagener Deutung vornahmen, fallen zwei grundlegende Positionen besonders auf. Gemeint ist hier einerseits die Charakterisierung nicht gemessener physikalischer Größen als „objektiv unbestimmt“ und andererseits die Deutung quantenmechanischer Wellenfunktionen als Maß für das menschliche Wissen über die jeweils betrachteten physikalischen Systeme. Beide Interpretationen sind im günstigsten Fall als äußerst problematisch einzustufen.

Ersteres wird von Heisenberg wie gesagt auch mit dem aus der Aristotelischen Philosophie entlehnten Begriff der Potentialität umschrieben. Es stellt sich dabei trotz solcher zugegebenermaßen eleganter Verklausulierungen die Frage, was mit dem Attribut „objektiv unbestimmt“ eigentlich zum Ausdruck gebracht werden soll. Auch wenn sich das zunächst nach mehr anhört als die Bohrsche Aussage, da sei gar nichts hinter den Meßresultaten, worüber man reden könne – der Versuch, die Eigenschaften quantenmechanischer Systeme zwischen zwei Messungen dadurch zu erklären, daß man sie erklärtermaßen nicht erklärt, ist genau besehen auch nichts anderes. Wieder handelt es sich um eine indirekte, aber nicht weniger gründliche Absage an den erkenntnistheoretischen Realismus. Gegen die Feststellung, daß sich, was immer quantenmechanische Objekte zwischen Messungen tun, mit klassischer Physik nicht beschreiben läßt, ist schwerlich etwas einzuwenden; möchte man sich jedoch dadurch nicht zur Aufgabe einer realistischen Auffassung zwingen lassen, dann ist die Aussage, eine Eigenschaft oder eine physikalische Größe sei objektiv unbestimmt, völlig unverständlich, es sei denn, man stellt sich vor, die betrachteten Objekte oder auch gewisse ihrer physikalischen Eigenschaften befänden sich in einem seltsam irrealen Reich der Möglichkeiten, bevor

²⁵⁴Bohr war leider nicht der einzige, der einen Hang zu derlei wissenschaftlichen Verirrungen hatte. Von Born, Heisenberg, Jordan, Pauli und manchen anderen gibt es ähnlich abwegiges zu lesen; einen Überblick findet man bei [51].

Messungen durchgeführt werden, und würden erst durch letztere in die Realität geholt. Das ist ein schönes, idealistisches Bild, aber wir haben im vorigen Abschnitt gesehen, daß hierfür überhaupt kein Bedarf besteht. Die Idee der Potentialitäten entstammt einer unzulässigen Anwendung des Satzes vom Widerspruch. Quantenobjekte können sehr wohl klassisch sich widersprechende Eigenschaften gleichzeitig aufweisen; die Tatsache, daß das unserer Alltagserfahrung zuwiderläuft, beweist keinesfalls das Gegenteil, sondern zeigt nur, wie sehr letztere zur Naturbeschreibung nicht ausreicht. Quantenmechanische Superpositionen – und damit genau das, womit unter anderem Zustände mit sich klassisch gegenseitig ausschließenden Eigenschaften beschrieben werden können, was die Theorie der „objektiven Unbestimmtheit“ jedoch in einen nur potentiell möglichen Bereich oder wer weiß wohin verfrachten will – sind aus gewichtigen, sowohl experimentell als auch theoretisch motivierten Gründen als reale physikalische Objekte anzusehen.

Die zweite der erwähnten Positionen, die Deutung der Wellenfunktion als Maß für menschliches Wissen, taucht bei Heisenberg erst später auf, wird dann aber zu einem der Grundpfeiler seiner Interpretation. Noch deutlicher wird das bei von Weizsäcker, der zwar stets betont, das Zentrum der Kopenhagener Deutung sei das Komplementaritätsprinzip, seine Interpretation aber nichtsdestotrotz ganz wesentlich auf diese epistemische Auffassung quantenmechanischer Wellenfunktionen stützt. Auch hier gerät man schnell in Konflikt mit dem erkenntnistheoretischen Realismus, denn die Behauptung, Wellenfunktionen repräsentieren ausschließlich Wissen über die durch sie beschriebenen Systeme, ist schwer mit der Vorstellung vereinbar, daß ständig Prozesse unter Beteiligung quantenmechanischer Objekte stattfinden, ganz egal, ob irgendjemand etwas davon weiß oder nicht. Zusätzlich gibt es aber auch hier unausweichliche experimentell wie theoretisch belegbare direkte physikalische Einwände. Wenn man schon Wissen über die betrachteten Systeme in die quantenmechanische Beschreibung einfließen lassen will, dann ist nicht entscheidend, was man tatsächlich über dieselben *weiß*, sondern lediglich, was man über sie *wissen kann*. Wenn Wellenfunktionen jedoch alles beschreiben, was man über physikalische Systeme wissen kann, stellen sie gerade nicht eine Beschreibung des aktuellen menschlichen Wissens über die Eigenschaften der Systeme dar, sondern eine vollständige Beschreibung dieser Eigenschaften selbst, und das entspricht genau einer realistischen Auffassung der Wellenfunktionen. Dazu paßt auch die schon bei Bohr präsente Tatsache, daß für quantenmechanische Messungen keineswegs bewußte Beobachter, sondern nur vorhandene Registriergeräte erforderlich sind, die unauslöschliche Aufzeichnungen welcher Art auch immer anfertigen. Ob davon jemand etwas weiß, ist von keinerlei Bedeutung. Besonders deutlich wird das beim Welle-Teilchen-Dualismus in der modernen Bedeutung dieses Begriffs. Bekanntlich werden Interferenzmuster bei Zweiwegeinterferometern auch dann beeinflußt, wenn Welcher-Weg-Information möglich ist, aber nicht zur Kenntnis genommen wird. Genausowenig funktioniert die Interpretation des Kollapses der Wellenfunktion als reine Zunahme der Information. Denn das würde entweder bedeuten, daß das, was man nach einer quantenmechanischen Messung zusätzlich weiß, davor unbekannterweise bereits realisiert war, was nichts weniger als eine Theorie verborgener Variablen voraussetzen würde, oder aber man interpretiert die Zunahme des Wissens über das betrachtete System als Heraussortieren eines

die gemessene Eigenschaft repräsentierenden Subensembles aus einem gesamten Ensemble, was einer klassischen statistischen Theorie und einer reinen Ensemble-Ignoranz-Interpretation entspricht. Deren Unhaltbarkeit war weiter oben bereits Gegenstand der Diskussion.

Kritik sollte stets konstruktiv sein, und einem Buch über historische Entwicklungen der Quantenmechanik, seiner Zielsetzung entsprechend mit Aspekten der Theorie befaßt, wie sie sich noch in vorläufigen Stadien befanden, kann ein zusätzlicher Abschnitt, in welchem dem Leser aktuelle Entwicklungen vorgestellt und insbesondere Alternativen zu den kritisierten Interpretationen vorgeschlagen werden, sicher nicht schaden. Im folgenden kurzen Abschlußkapitel wird daher beschrieben, wie man die soeben als inakzeptabel eingeschätzten traditionellen Interpretationen durch eine andere, insbesondere dem erkenntnistheoretischen Realismus verpflichtete Auffassung ersetzen kann.

Kapitel 4

Ausblick und philosophische Bewertung

Nachdem wir uns nun auf rund 300 Seiten einen Überblick über die Anfangsphase der Quantenmechanik verschafft haben, dürfte trotz der ganzen Vielfalt der Neuerungen, welche die neue Theorie brachte, eine gemeinsame Linie erkennbar geworden sein, die gleichzeitig den im Vergleich zur klassischen Physik völlig anderen Charakter der Quantenmechanik verdeutlicht. Deren Entwicklung erfolgte schrittweise von anschaulichen zu immer unanschaulicheren Konzepten, denn alle anschaulichen Versuche erwiesen sich mehr und mehr als untauglich. Das ist ein Indiz für eine notwendige Unanschaulichkeit der Quantenmechanik, wenn auch noch kein Beweis. Einen solchen liefern erst das Bellsche Theorem und die zugehörigen Experimente. Es ist jedoch entgegen weitverbreiteten Behauptungen kein Indiz für eine etwaige Unvereinbarkeit der Quantenmechanik mit einer realistischen Erkenntnistheorie.

Ganz im Gegenteil sollte man eine konsistente Interpretation der Quantenmechanik auf zwei Grundannahmen aufbauen. Die erste Grundannahme ist ein *uneingeschränkter erkenntnistheoretischer Realismus*, das heißt, es soll angenommen werden, daß sämtliche Bestandteile der Theorie eine Entsprechung in der Realität besitzen. Die zweite Grundannahme besteht darin, das *Superpositionsprinzip als Basisgesetz der gesamten Quantenmechanik* zu betrachten. Aus beiden Grundannahmen zusammen folgt dann, daß Superpositionen keine klassischen Ensembles ihrer Komponenten, sondern individuelle, reale Zustände der zugehörigen Systeme beschreiben. Alle Komponenten sind in nichtklassischer Weise gleichzeitig real vorhanden. Insgesamt führt das auf eine *platonistische Sichtweise der Physik*.

Genau hier findet sich der zentrale Unterschied zu sämtlichen Quantenmechanik-Interpretationen der orthodoxen Prägung. Sie bauen auf dem genauen erkenntnistheoretischen Gegenteil des Platonismus auf, dem Operationalismus, wonach die Grundlage jeder wissenschaftlichen Erkenntnis das menschliche Handeln sein muß. „Jetzt endlich“, so triumphiert der Operationalismus im Angesicht der Quantenmechanik, „spricht die Indizienlage klar zu unseren Gunsten.“¹. Diese Haltung basiert jedoch auf einer gravierenden Fehlannahme, indem sie davon ausgeht, die Realität der Begriffe, die der physikalische Platonismus postuliert, sei grundsätzlich auf klassische Kategorien beschränkt. Das ist Unsinn, verursacht durch ei-

¹Das ist eine Kurzfassung der Darstellung von Klüver, der jedoch wie in Abschnitt 3.9.3.3 gesehen noch wesentlich weiter geht und beim Konventionalismus landet.

ne unzulässige Verabsolutierung der menschlichen Erfahrung. Der physikalische Platonismus umfaßt sehr wohl auch eine realistische Quantenmechanik und damit auch nichtklassische Kategorien. Nicht unsere Erfahrung bestimmt, was real sein kann, sondern die Realität bestimmt und überschreitet gleichzeitig unsere Erfahrung.

Die zentrale Fehlannahme der Kopenhagener Deutung (und des Positivismus, obwohl sich ihr erster Protagonist Niels Bohr wie beschrieben selbst nicht als Positivist gesehen hat) steht damit in engem Zusammenhang. „Nur über meßbares kann gesprochen werden“... Das ist ebenfalls Unsinn. Der operationalistische Versuch, alle Erkenntnis nur auf tatsächlich durchgeführte Messungen gründen zu wollen, scheitert allein schon daran, daß nichts direkt meßbar ist. Erst die Theorie bestimmt, was real ist². Die Empirische Realität ist eine echte Teilmenge der hypothetischen Realität und nicht umgekehrt. Mit dieser Auffassung erspart man sich so diffuse Begriffsbildungen wie diejenige der „objektiven Unbestimmtheit“. Wellenfunktionen und insbesondere Superpositionen sind reale physikalische Objekte. Sie beschreiben keine Systeme, deren Eigenschaften nicht definiert sind, sondern solche, die sich in einem Überlagerungszustand aus mehreren oder sogar unendlich vielen sich womöglich aus klassischer Sicht gegenseitig ausschließenden Eigenschaften befinden. In gewissem Sinn besitzen sie diese sich widersprechenden Eigenschaften gleichzeitig, etwa unterschiedliche quantitative Werte einer bestimmten physikalischen Größe. Objektiv unbestimmt ist dabei allenfalls, welcher dieser Werte bei einer Messung der zugehörigen Größe an diesem System vom verwendeten Meßgerät geliefert wird, und auch das ist nicht uneingeschränkt der Fall. Denn die Quantenmechanik lehrt in Gestalt der Bornschen Wahrscheinlichkeitsregel, daß sich bei sehr vielen Messungen eine objektiv vorhersagbare Verteilung der möglichen Meßwerte einstellt.

Eine solche erkenntnistheoretische Haltung des Theorienrealismus vermag in Verbindung mit der Theorie der Dekohärenz³ nun auch die Stellung der klassischen Physik innerhalb des Theorienrahmens der Quantenmechanik zu klären. Die Kopenhagener Deutung in ihrer Bohrschen Fassung behauptet hierzu, die klassische Physik sei nicht als Grenzfall der Quantenmechanik aufzufassen, vielmehr müsse letztere die Gültigkeit von ersterer voraussetzen, die dadurch in die Position eines erkenntnistheoretischen a priori gelangt, das heißt transzendental wird. Später postulieren Heisenberg und von Weizsäcker eine Einschränkung der Gültigkeit des Superpositionsprinzips, um zur beobachteten klassischen Welt zu gelangen, wodurch sie den transzendentalen Charakter wieder abschwächen. Die Einschränkung des Superpositionsprinzips für Wellenfunktionen wird durch deren Interpretation als Maß des menschlichen Wissens über die betrachteten Systeme erreicht, genauer gesagt durch das Konzept der Reduktion der Wellenfunktion, womit die abrupte Zunahme der Information durch Meßvorgänge beschrieben werden soll⁴. Beide Auffassungen sind jedoch falsch. Weder ist die klassische Physik eine

²Man sieht nur, was man weiß [911].

³Diese ist, wie immer wieder betont werden muß, *keine* Interpretation der Quantenmechanik, sondern selbst ein Bestandteil des mathematisch-physikalischen Apparats der Theorie.

⁴Diese Idee ist seit einigen Jahren in verschärfter Form wieder in Mode gekommen und wird inzwischen unter dem Begriff *informationstheoretische Interpretation der Quantenmechanik* gehandelt; Pioniere sind dabei insbesondere Brukner und Zeilinger [127], [128], [129], [953], [954]; vergleiche auch Fuchs [309] und Goyal [343], [344], [345]. [954]. Populärwissenschaftliche Darstellungen findet man ebenfalls bei Zeilinger

notwendige Voraussetzung der Quantenmechanik, noch entsteht die klassische Welt durch eine Außerkraftsetzung der Schrödingergleichung bei Meßprozessen. Die Quantenmechanik und mit ihr die Schrödingergleichung gelten *universell*⁵. Die daraus folgende Universalität des Superpositionsprinzips liefert per Dekohärenz die beobachtete klassische Welt. Erst die Quantenmechanik kann erklären, wie überhaupt klassische Eigenschaften und damit Gegenstände klassischer Beschreibung zustande kommen. Damit ist auch die semantische Konsistenz maximal gewährleistet, denn wenn sämtliche Prozesse im Rahmen der Theorie, die ja als universell betrachtet wird, beschreibbar sind, dann sind es auch diejenigen der Meßvorgänge, was gerade von der semantischen Konsistenz gefordert wird.

Was die Theorie der Dekohärenz für sich allein nicht lösen kann, ist das Problem des quantenmechanischen Meßprozesses – es sei denn, man kombiniert sie mit der vielzitierten und seit Jahren auch wieder vieldiskutierten Viele-Welten-Theorie. Ausgangspunkt dieser spektakulärsten aller Interpretationen der Quantenmechanik sind Arbeiten von Hugh Everett [275], [276], der selbst noch nicht von unterschiedlichen Welten, sondern von relativen Zuständen sprach; die global-kosmologische Deutung der sich immerfort spaltenden Myriaden von Universen wurde von Bryce DeWitt hinzugefügt [188]⁶. Ohne diese Kombination kann die Dekohärenz nicht erklären, wie bei Messungen definierte Werte herauskommen, sie kann nicht einmal erklären, was überhaupt eine Messung ist. Hans Dieter Zeh entdeckte den möglichen Zusammenhang der Viele-Welten-Interpretation mit der Theorie der Dekohärenz schon früh, zunächst, ohne von Everetts und DeWitts Vorarbeit zu wissen und noch bevor der Begriff „Dekohärenz“ überhaupt geprägt wurde [944], [949], [951]. Dieser Zusammenhang entsteht durch Betrachtung einer einzigen universellen Wellenfunktion, die zu keiner Zeit reduziert wird und in beiden Konzepten im Mittelpunkt steht. Sie repräsentiert eine globale Verschränkung des gerade betrachteten Systems mit dessen gesamter Umgebung und damit genau genommen mit der gesamten Welt. Auf den ersten Blick scheint ihre Interpretation jeweils eine andere zu sein; während im Rahmen der Viele-Welten-Interpretation, wie der Name schon sagt, von vielen, bei jeder Messung sich weiter verzweigenden Parallelwelten die Rede

[955], [956], der die Grundidee beschreibt, indem er erklärt, Bohrs klassische Konzepte beschrieben die Grenze der Information, die von der Natur herausgerückt wird, und daraus folgert, die Quantenmechanik sei eine Theorie über Information. Eine frühere Version der informationstheoretischen Interpretation entwickelte von Weizsäcker in Gestalt seiner Theorie der Ur-Alternativen [911], [912]; vergleiche auch Lyre [570]. Auf Fock geht ein noch älterer Ansatz zurück, allerdings in rein semantischer und nicht ontologischer Form [299]. Die Auffassung der Quantenmechanik als eine reine Informationstheorie ist jedoch Unsinn. Information ohne Realität ist leeres Gerede. Etwas, das so wie etwa quantenmechanische Wellenfunktionen in der Lage ist, reale Objekte zu beeinflussen und reale Phänomene zu erklären, muß selbst Bestandteil der Realität sein. Kritische Haltungen zur informationstheoretischen Interpretation findet man unter anderem bei [370], [371] und [810]. Im übrigen darf die Sache nicht mit dem Modewort „Quanteninformation“, verwechselt werden; hierbei handelt es sich um einen populären Sammelbegriff für technische Anwendungen der Verschränkung, wie Quantencomputer, Quantenteleportation oder Quantenkryptographie (letztere gibt es mit und ohne Verschränkung), die keine metaphysische Verklärung des Informationsbegriffs erforderlich machen. Einen Überblick hierzu liefern beispielsweise [54], [410], [656] oder [770].

⁵Allgemeiner und relativistisch invariant: Die Quantenfeldtheorie und mit ihr die Klein-Gordon-, die Dirac- und die Proca-Gleichung gelten universell.

⁶Die Aufsatzsammlung [764] liefert einen aktuelle Überblick über die Thematik.

ist, beschreibt die Dekohärenztheorie eine globale Superposition in einer Welt. Doch besteht hier tatsächlich ein Unterschied? Zehs Idee betrachtet beide Konzepte als identisch, wobei der Begriff „Welt“ eine sehr weitgehende Verallgemeinerung erfährt. Gemeint ist damit nicht mehr die gewohnte dreidimensionale anschauliche Welt, sondern ein unendlichdimensionales Gebilde, eine Quantenwelt, welche die gesamte, uns so bizarr vorkommende Quantenrealität mit Verschränkungen und Nichtlokalitäten beinhaltet. Diese durch eine globale Wellenfunktion beschriebene Quantenrealität umfaßt nichtklassische Superpositionen in beliebigem Ausmaß. Der Mechanismus der Dekohärenz sorgt jedoch bei allen nicht weitgehend von ihrer Umgebung abgeschirmten Teilsystemen durch eine globale Verschränkung für eine überaus wirksame und vor allem schnelle Delokalisierung solcher Superpositionen. Sie sind dann nur noch wahrnehmbar, wenn man bei Messungen das gesamte System, also die ganze Umgebung mit all ihren extrem vielen Freiheitsgraden berücksichtigt – was technisch völlig undurchführbar ist. Das ändert aber nichts daran, daß auch nach einer Messung die Superpositionen aller möglichen Meßergebnisse weiterhin da sind. Damit gaukelt uns die Quantenmechanik die Existenz einer klassischen Welt mit den uns vertrauten Eigenschaften lediglich vor. Anders gesagt: *Daß wir eine klassische Welt wahrnehmen, ist ein rein quantenmechanischer Effekt.*

Möglicherweise schließt dieser Effekt sogar die beobachtete allgemein-relativistische Raumzeit mit ein. Bei einer universellen Gültigkeit der Quantenmechanik müßte stattdessen auch eine Superposition sich klassisch unterscheidender Raumzeiten vorliegen. Der empirische Sachverhalt einer sich zwar zeitlich verändernden, aber zu jedem Zeitpunkt klassisch-eindeutigen Raumzeit ist vermutlich das Resultat eines globalen Dekohärenzeffektes, der uns diese klassische Raumzeit in einer tatsächlich vorhandenen Superposition aus vielen Raumzeiten ebenfalls nur vorspielt. Das ist zwar bis jetzt reine Spekulation, aber eine sehr gut begründete.

Die Quantenmechanik entwickelte sich von Beginn an entgegen der erklärten Zielsetzungen ihrer Entdecker, wie Domenico Giulini einmal bemerkte [331]. Das ist ein starkes Indiz gegen die Auffassung, Physik sei ein geistiges Konstrukt zur Beschreibung irgendwelcher Naturphänomene. Die Natur läßt sich nicht durch geistige Konstrukte beschreiben, sondern gibt die Art und Weise ihrer Beschreibung selbst vor. Das heißt, sie zwingt uns zur Verwendung ganz bestimmter formaler mathematischer Strukturen, die sich somit in der Natur manifestieren und selbst ebenfalls keine geistigen Konstrukte sind. Immer wieder in physikalischen Theorien unerwartet oder gar unerwünscht auftretende mathematische Objekte, für die später Gegenstücke in der Realität gefunden werden, untermauern diese Auffassung zusätzlich. Prominente Beispiele hierfür sind der Maxwellsche Verschiebungsstrom, die kosmologische Konstante oder die herausgehobene Rolle, welche glatte 4er-Mannigfaltigkeiten gegenüber solchen mit beliebigen anderen Dimensionen im Rahmen der globalen Differentialgeometrie spielen. Die weiter oben vertretene realistische Deutung der theoretischen Physik und damit der physikalische Platonismus werden dadurch überzeugend gestützt.

Dasselbe gilt darüberhinaus auch für die platonistische Auffassung der Mathematik. Klüver erkannte als erster die Analogie, die hier dahinter steckt, indem er eine begriffliche Verhältnisgleichung aufstellte [503]. Die Kopenhagener Deutung verhält sich danach zur Physik, wie der Intuitionismus zur Mathematik. Als überzeugter Operationalist lehnt er jedoch jeg-

lichen Platonismus ab; stattdessen sieht er hierin die Veranschaulichung des vermeintlich erfolgreichen Versuchs, fiktive Elemente sowohl aus der Physik als auch aus der Mathematik herauszuhalten, was er durch eine zweite Verhältnisgleichung zu veranschaulichen sucht, wonach sich verborgene Variable zur Physik verhalten, wie transfinite Kardinalzahlen zur Mathematik. Im Gegensatz zur ersten ist diese zweite Verhältnisgleichung jedoch falsch und muß durch eine andere ersetzt werden. Der oben beschriebene physikalische Platonismus und die Manifestation mathematischer Objekte ist nur eines von vielen Argumenten dafür, diese Auffassung auf die Mathematik auszudehnen. Wir können das hier nur anhand weniger Beispiele kurz andeuten. Wäre die Mathematik ein reines Konstrukt des Verstandes, müßte sie ähnlich strukturiert sein wie Sprachen, was sie aber nicht ist. Es wäre unverständlich, daß unabhängig voneinander verschiedene Mathematiker zu exakt denselben Resultaten gelangen. Die logische Unerbittlichkeit und überraschende Vielfalt und Wendigkeit der Mathematik wären unerklärbar. Außerdem führt nicht jeder Versuch, etwas mathematisches zu machen, zum Erfolg. Versuche können falsch sein, falsch kann jedoch nur etwas sein, was anders als das richtige ist, und dazu muß das richtige existieren. Axiomatische Mathematik bedeutet nicht, daß man beliebige Axiomensysteme aufstellen und daraus Theorien ableiten kann. Axiomensysteme müssen sich erst als widerspruchsfrei oder zumindest konsistent erweisen, und das ist eine objektive Eigenschaft derselben. Folglich werden Axiomensysteme entdeckt und nicht erfunden. Die richtige zweite Verhältnisgleichung besagt folglich, daß sich die universelle Wellenfunktion zur Physik verhält, wie transfinite Kardinalzahlen zur Mathematik. In dem Maß, wie die uneingeschränkte Gültigkeit der Quantenmechanik unnötige erkenntnistheoretische Selbstbeschränkungen in der Physik vermeidet, leistet das die transfinite Mengenlehre für die Mathematik.

Literaturverzeichnis

- [1] *Proceedings of the International Congress of the International Union for the Philosophy of Science (Zürich 1954)*, Editions du Griffon, Neuchâtel 1955
- [2] M. Abraham, *Theorie der Elektrizität, Band II: Elektromagnetische Theorie der Strahlung*, Teubner, Leipzig 1905
- [3] J. Acacio de Barros und P. Suppes, *Revista Internacional de Filosofia*, Campinas **33**, 55, 2010
- [4] J. W. Addison, L. Henkin und A. Tarski, *The Theory of Models. Proceedings of the 1963 International Symposium at Berkeley*, North-Holland, Amsterdam 1965
- [5] Y. Aharonov und D. Bohm, *Physical Review* **122**, 1649, 1961, abgedruckt in [924], 715
- [6] I. J. R. Aitchison, D. A. MacManus und T. M. Snyder, arXiv: quant-ph/0404009
- [7] M. H. Andersen, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman und E. A. Cornell, *Science* **269**, 198, 1995
- [8] A. Angelow, in [153], 305
- [9] A. Angelow, *NeuroQuantology* **7**, 325, 2009
- [10] A. Angelow und D. Trifonow, ICTP Preprint 44, 1995
- [11] A. K. Angelow und D. A. Trifonow, arXiv: quant-ph/1009.5593v1
- [12] S. Antoci und D.-E. Liebscher, *Annales de la Fondation de Broglie* **21**, 349, 1996
- [13] S. Antoci und D.-E. Liebscher, *International Journal of Theoretical Physics* **37**, 531, 1998
- [14] H. Araki, *Mathematical Theory of Quantum Fields*, Oxford University Press, New York 2009
- [15] M. Arndt und O. Nairz, *Plus Lucis* 3/1999, 5

- [16] M. Arndt, O. Nairz, J. Voss-Andreae, C. Keller, G. van der Zouw und A. Zeilinger, *Nature* **401**, 680, 1999
- [17] V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1989
- [18] H. F. Arnoldus und T. F. George, *Physica A* **222**, 330, 1995
- [19] H. Atmanspacher, H. Römer und H. Walach, *Foundations of Physics* **32**, 273, 2002
- [20] J. Audretsch (Hrsg.), *Verschränkte Welt. Faszination der Quanten*, Wiley-VCH, Weinheim 2002
- [21] J. Audretsch, *Verschränkte Systeme. Die Quantenphysik auf neuen Wegen*, Wiley-VCH, Weinheim 2005
- [22] J. Audretsch und K. Mainzer, *Wieviele Leben hat Schrödingers Katze? Zur Physik und Philosophie der Quantenmechanik*, B. I. Wissenschaftsverlag, Mannheim, Wien, Zürich 1990
- [23] J. Audretsch, *Quantenmechanik 2*, Vorlesungsmanuskript, Universität Konstanz 1994, unveröffentlicht
- [24] J. Audretsch und R. Müller, *Physical Review A* **50**, 1755, 1994
- [25] G. Auletta, *Foundations and Interpretation of Quantum Mechanics. In the Light of a Critical-Historical Analysis and of a Synthesis of the Results*, World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong 2001
- [26] G. Bacciagaluppi, in [472], 269
- [27] G. Bacciagaluppi und E. Crull, *Studies in History and Philosophy of Science, Part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics* **40**, 374, 2009
- [28] G. Bacciagaluppi und A. Valentini, *Quantum Theory at the Crossroads: Reconsidering the 1927 Solvay Conference*, Cambridge University Press, Cambridge 2009
- [29] A. Bach, *Physics Letters A* **104**, 251, 1984
- [30] A. Bach, *Lettere al Nuovo Cimento* **42**, 443, 1985
- [31] A. Bach, *Lettere al Nuovo Cimento* **43**, 383, 1985
- [32] A. Bach, *Physics Letters A* **121**, 1, 1987
- [33] A. Bach, *Foundations of Physics* **18**, 639, 1988
- [34] A. Bach, *Archive for History of Exact Sciences* **40**, 173, 1989

- [35] L. E. Ballentine, *Review of Modern Physics* **42**, 358, 1970
- [36] L. E. Ballentine, *Quantum Mechanics. A Modern Development*, World Scientific, Singapore 2008
- [37] J. J. Balmer, *Annalen der Physik* **25**, 80, 1885
- [38] W. Balzer und A. Kamlah (Hrsg.), *Aspekte der physikalischen Begriffsbildung. Theoretische Begriffe und operationale Definitionen*, Vieweg, Braunschweig, Wiesbaden 1979
- [39] S. J. Barnett, *Reviews in Modern Physics* **7**, 129, 1935
- [40] J. D. Barrow, P. C. W. Davies und C. L. Harper jr. (Hrsg.), *Science and Ultimate Reality. Quantum Theory, Cosmology and Complexity*, Cambridge University Press, Cambridge 2005
- [41] A. Bartels, *Grundprobleme der modernen Naturphilosophie*, Schöningh, Paderborn, München, Wien, Zürich 1996
- [42] K. Baumann und R. U. Sexl, *Die Deutungen der Quantentheorie*, Vieweg, Braunschweig 1992
- [43] F. Bayen, M. Flato, C. Frønsdal, A. Lichnerowicz und D. Sternheimer, *Annals of Physics* **111**, 61, 1978
- [44] F. Bayen, M. Flato, C. Frønsdal, A. Lichnerowicz und D. Sternheimer, *Annals of Physics* **111**, 111, 1978
- [45] G. Beck, *Zeitschrift für Physik* **41**, 443, 1927
- [46] H. Bedau und P. Oppenheim, *Synthese* **13**, 201, 1961
- [47] F. J. Belinfante, *Physica* **6**, 870, 1939
- [48] J. S. Bell, *Physics* **1**, 195, 1964, abgedruckt in [50], 14 und in [924], 403
- [49] J. S. Bell, *Reviews of Modern Physics* **38**, 447, 1966, abgedruckt in [50], 1 und in [924], 397, deutsche Übersetzung in [42], 193
- [50] J. S. Bell, *Speakable and unspeakable in quantum mechanics*, Cambridge University Press, Cambridge 1993
- [51] M. Beller, *Physics Today* 9/1998, 29, deutsche Übersetzung in *Die Zeit* 13/1999, 59
- [52] M. Beller, *Quantum Dialogue: The Making of a Revolution*, University of Chicago Press, Chicago 2001

- [53] D. W. Belousek, *Studies in History and Philosophy of Science, Part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics* **27**, 437
- [54] F. Benatti, M. Fannes, R. Floreanini und D. Petritis (Hrsg.), *Quantum Information, Computation and Cryptography. An Introductory Survey of Theory, Technology and Experiments*, Springer, Berlin, Heidelberg 2010
- [55] I. Bengtsson und K. Życzkowski, *Geometry of Quantum States. An Introduction to Quantum Entanglement*, Cambridge University Press, Cambridge 2008
- [56] J. Bergou und B.-G. Englert, *Annals of Physics* **209**, 479, 1991
- [57] J. Bernoulli, *Histoire de l'Académie Royale des Sciences (Paris)* **1732**, 521, 1710
- [58] M. V. Berry, *Proceedings of the Royal Society (London)* **A 392**, 45, 1984
- [59] R. A. Bertlmann und A. Zeilinger, *Quantum [Un]speakables. From Bell to Quantum Information*, Springer, Berlin, Heidelberg 2002
- [60] E. Berz, *Verallgemeinerte Funktionen und Operatoren*, B. I. Hochschultaschenbücher, Mannheim 1967
- [61] R. A. Beth, *Physical Review* **50**, 115, 1939
- [62] I. Bialynicki-Birula, *Progress in Optics* **36**, Elsevier, Amsterdam 1996
- [63] I. Bialynicki-Birula, *Acta Physica Polonica* **B 37**, 935, 2006
- [64] I. Bialynicki-Birula, M. Cieplak und J. Kaminski, *Theory of Quanta*, Oxford University Press, New York, Oxford 1992
- [65] G. Binnig und H. Rohrer, *Helvetica Physica Acta* **55**, 726, 1982
- [66] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber und E. Weibel, *Physical Review Letters* **49**, 57, 1982
- [67] G. Birkhoff, *Lattice Theory*, The American Mathematical Society, Providence, Rhode Island 1995
- [68] G. Birkhoff und J. von Neumann, *Annals of Mathematics* **37**, 823, 1936
- [69] S. Björck, *Zeitschrift für Physik* **73**, 541, 1932
- [70] G. Björk, J. Söderholm, A. Trifonov, T. Tsegaye und A. Karlson, *Physical Review A* **60**, 1874, 1999
- [71] J. D. Bjorken und S. D. Drell, *Relativistische Quantenmechanik*, Bibliographisches Institut, Mannheim, Leipzig, Wien, Zürich 1992

- [72] J. D. Bjorken und S. D. Drell, *Relativistische Quantenfeldtheorie*, Bibliographisches Institut, Mannheim, Wien, Zürich 1990
- [73] P. Blanchard, D. Giulini, E. Joos, C. Kiefer und I.-O. Stamatescu, *Decoherence: Theoretical, Experimental, and Conceptual Problems*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 2000
- [74] E. Bloch, *Das Materialismusproblem, seine Geschichte und Substanz*, Suhrkamp, Frankfurt am Main 1985
- [75] D. I. Blochinzew, *Grundlagen der Quantenmechanik*, Harri Deutsch, Thun, Frankfurt am Main 1988
- [76] G. Böhme (Hrsg.), *Protophysik. Für und wider eine konstruktive Wissenschaftstheorie der Physik*, Suhrkamp, Frankfurt am Main 1976
- [77] A. Bohm, *Physica A* **236**, 485, 1966
- [78] A. Bohm, *The Rigged Hilbert Space and Quantum Mechanics*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1978
- [79] A. Bohm und M. Gadella, *Dirac Kets, Gamow Vectors and Gel'fand Triplets. The Rigged Hilbert Space Formulation of Quantum Mechanics*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1989
- [80] A. Bohm, H. D. Doebner und P. Kielanowski (Hrsg.), *Irreversibility and Causality: Semigroups and Rigged Hilbert Space*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1998
- [81] D. Bohm, *Physical Review* **85**, 166, 1952
- [82] D. Bohm, *Physical Review* **85**, 180, 1952
- [83] D. Bohm und J. P. Vigier, *Physical Review* **96**, 208, 1954
- [84] N. Bohr, *Philosophical Magazine* **26**, 1, 1913
- [85] N. Bohr, *Philosophical Magazine* **26**, 476, 1913
- [86] N. Bohr, *Philosophical Magazine* **26**, 857, 1913
- [87] N. Bohr, *Philosophical Magazine* **29**, 332, 1915
- [88] N. Bohr, *Zeitschrift für Physik* **13**, 117, 1923
- [89] N. Bohr, *Naturwissenschaften* **16**, 245, 1928
- [90] N. Bohr, *Nature* **121**, 580, 1928, abgedruckt in [924], 85

- [91] N. Bohr, *Atomtheorie und Naturbeschreibung*, Springer, Berlin 1931
- [92] N. Bohr, *Physical Review* **48**, 696, 1935, abgedruckt in [924], deutsche Übersetzung in [42]
- [93] N. Bohr, *Dialectica* 2, **3-4**, 312, 1948
- [94] N. Bohr, *Atomphysik und menschliche Erkenntnis*, Vieweg, Braunschweig 1958
- [95] N. Bohr, *Atomphysik und menschliche Erkenntnis II*, Vieweg, Braunschweig 1966
- [96] N. Bohr, in [769], 199
- [97] N. Bohr, H. Kramers und J. Slater, *Zeitschrift für Physik* **24**, 69, 1924
- [98] L. Boltzmann, *Sitzungsberichte der Kaiserlichen Akademie der Wissenschaften in Wien, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Classe* **66**, 275, 1872
- [99] L. Boltzmann, *Sitzungsberichte der Kaiserlichen Akademie der Wissenschaften in Wien, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Classe* **76**, 373, 1877
- [100] L. Boltzmann, *Wissenschaftliche Abhandlungen* **3**, 122, 1884
- [101] L. Boltzmann, *Annalen der Physik und Chemie* **22**, 291, 1884
- [102] L. Boltzmann, *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin*, 1016, 1897
- [103] J. Bordet (Hrsg.), *Electrons et Photons: Rapports et Discussions de cinquième Conseil de Physique Solvay*, Gauthier-Villars, Paris 1928
- [104] M. Born, *Vorlesungen über Atommechanik*, Springer, Berlin 1925
- [105] M. Born, *Zeitschrift für Physik* **37**, 863, 1926, abgedruckt in [42], 48
- [106] M. Born, *Zeitschrift für Physik* **38**, 803, 1926
- [107] M. Born, *Zeitschrift für Physik* **40**, 167, 1926
- [108] M. Born, *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse*, 146, 1926
- [109] M. Born, *Die Naturwissenschaften* **10**, 238, 1927, abgedruckt in [111], 6
- [110] M. Born, *Atti del Congresso Internazionale dei Fisici, Como, Settembre 1927 (V), Bologna 1927*, abgedruckt in [111], 15
- [111] M. Born *Physik im Wandel meiner Zeit*, Vieweg, Braunschweig 1983

- [112] M. Born und P. Jordan, Zeitschrift für Physik **34**, 858, 1925
- [113] M. Born, W. Heisenberg und P. Jordan, Zeitschrift für Physik **35**, 557, 1926
- [114] M. Born und W. Heisenberg, in [103], 143, englische Übersetzung in [28], 407
- [115] S. N. Bose, Zeitschrift für Physik **26**, 178, 1924
- [116] K. Boström, *Digging in the Mud: A Time Operator in Quantum Mechanics*, Manuskript, Universität Potsdam 2002, unveröffentlicht
- [117] R. B. Braithwaite, in [508], 3
- [118] S. L. Braunstein und A. K. Pati (Hrsg.), *Quantum Information Theory with Continuous Variables*, Kluwer, Dordrecht 2003
- [119] J. Brendel, *Quantenphänomene in der Welt des Lichts. Quantenoptische Grundlagenexperimente mit Photonenpaaren*, Harri Deutsch, Thun, Frankfurt am Main 1994
- [120] L. Brillouin, Comptes Rendues de l' Académie des sciences **183**, 24, 1926
- [121] L. V. de Broglie, Nature **112**, 540, 1923
- [122] L. V. de Broglie, Comptes Rendus **177**, 507, 1923
- [123] L. V. de Broglie, Philosophical Magazine **47**, 446, 1924
- [124] L. V. de Broglie, Annales de Physique **3**, 22, 1925
- [125] L. V. de Broglie, in [103], 105, englische Übersetzung in [28], 372
- [126] L. M. Brown (Hrsg.), *Feynman's Thesis. A New Approach to Quantum Theory*, World Scientific, New Jersey, London, Singapore 2005
- [127] Č. Brukner und A. Zeilinger, Physical Review Letters **83**, 3354, 1999
- [128] Č. Brukner und A. Zeilinger, Physical Review A **63**, 022113, 2001
- [129] Č. Brukner und A. Zeilinger, Philosophical Transactions of the Royal Society of London **A 360**, 1061, 2002
- [130] R. Brunetti und K. Fredenhagen, Reviews in Mathematical Physics **14**, 897, 2002
- [131] J. Bub, *Interpreting the Quantum World*, Cambridge University Press, Cambridge 1997
- [132] M. Bucher, arXiv: physics/0605258v2
- [133] M. Bucher, arXiv: physics/0705.4321v2

- [134] M. Bucher, arXiv: physics/0802.1366v1
- [135] A. Budo, *Theoretische Mechanik*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1969
- [136] W. Büchel, *Philosophische Probleme der Physik*, Herder, Freiburg, Basel, Wien 1965
- [137] W. Büchel, in [76], 235
- [138] M. Bunge, *Foundations of Physics*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1967
- [139] M. Bunge (Hrsg.), *Quantum Theory and Reality*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1967
- [140] M. Bunge, in [139], 105
- [141] M. Bunge, *Canadian Journal of Physics* **48**, 1410, 1970
- [142] N. Burgoyne, *Il Nuovo Cimento* **8**, 807, 1958
- [143] P. Busch, in [632], 73
- [144] P. Busch und P. J. Lahti, *Rivista del Nuovo Cimento* **18**, 1, 1995
- [145] K. Camilleri, *Heisenberg and the Interpretation of Quantum Mechanics. The Physicist as Philosopher*, Cambridge University Press, Cambridge 2009
- [146] F. Capra, *Das Tao der Physik. Die Konvergenz von westlicher Wissenschaft und östlicher Philosophie*, Droemer Knauer, München 1997
- [147] F. Capra, *Wendezeit. Bausteine für ein neues Weltbild*, Droemer Knauer, München 1999
- [148] F. Carlini, *Schumacher Astronomische Nachrichten* **28**, 257, 1817
- [149] F. Carlini, *Schumacher Astronomische Nachrichten* **30**, 197, 1817
- [150] E. Cassirer, *Göteborgs Högskolas Årsskrift* **42**, 1936, abgedruckt in [151], 127
- [151] E. Cassirer, *Zur modernen Physik*, Wissenschaftliche Buchgesellschaft, Darmstadt 1994
- [152] C. M. Caves, *Physical Review D* **23** 1693, 1981
- [153] S. A. Cetin und I. Hikmet, *Sixth International Conference of the Balkan Physical Union. AIP Conference Proceedings 899*, AIP Press, Melville, New York 2007
- [154] S. S. Chabysheva und R. Hiller, *Physical Review D* **81**, 074030, 2010
- [155] S. Chandrasekhar, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **91**, 456, 1931

- [156] S. Chandrasekhar, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **95**, 207, 1935
- [157] D. Chruściński und A. Jamiołkowski, *Geometric Phases in Classical and Quantum Mechanics*, Birkhäuser, Basel, Boston, Berlin 2004
- [158] J. F. Clauser, *Physical Review D* **9**, 853, 1974
- [159] J. F. Clauser, M. A. Horne, A. Shimony und R. A. Holt, *Physical Review Letters* **23**, 880, 1969, abgedruckt in [924], 409
- [160] R. Clausius, *Annalen der Physik und Chemie* **125**, 353, 1865
- [161] L. Cohen, *Philosophy of Science* **33**, 317, 1966
- [162] R. G. Colodny (Hrsg.), *Frontiers of Science and Philosophy*, University of Pittsburgh Press, Pittsburgh 1983
- [163] A. H. Compton, *Physical Review* **19**, 267, 1922
- [164] A. H. Compton, *Physical Review* **21**, 207, 1923
- [165] A. H. Compton, *Physical Review* **21**, 483, 1923
- [166] E. U. Condon, *Science*, **69**, 573, 1929
- [167] F. Constantinescu, *Distributionen und ihre Anwendung in der Physik*, Teubner, Stuttgart 1974
- [168] R. Courant und D. Hilbert, *Methoden der mathematischen Physik I*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1968
- [169] R. Courant und D. Hilbert, *Methoden der mathematischen Physik II*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1968
- [170] W. E. Curtis, *Proceedings of the Royal Society* **A 90**, 605, 1914
- [171] J. Dalton, *A new system of chemical philosophy*, Bickersstaff, London 1842
- [172] O. Darrigol, *From c-Numbers to q-Numbers: The Classical Analogy in the History of Quantum Theory*, University of California Press, Berkeley, Los Angeles 1992
- [173] C. G. Darwin, *Proceedings of the Royal Society (London)* **A 115**, 1, 1927
- [174] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn und W. Ketterle, *Physical Review Letters* **75**, 3969, 1995
- [175] C. J. Davisson und L. H. Germer, *Physical Review* **15**, 330, 1920
- [176] C. J. Davisson und L. H. Germer, *Nature* **119**, 558, 1927

- [177] C. J. Davisson und L. H. Germer, *Physical Review* **30**, 705, 1927
- [178] C. J. Davisson und L. H. Germer, *Proceedings of the National Academy of Science USA* **14**, 317, 1928
- [179] C. J. Davisson und L. H. Germer, *Proceedings of the National Academy of Science USA* **14**, 619, 1928
- [180] C. J. Davisson und L. H. Germer, *Physical Review* **31**, 155, 1928
- [181] C. J. Davisson und L. H. Germer, *Physical Review* **38**, 124, 1931
- [182] P. Debye, *Annalen der Physik* **33**, 1427, 1910
- [183] P. Debye, *Annalen der Physik* **39**, 789, 1912
- [184] P. Debye, *Physikalische Zeitschrift* **17**, 507, 1916
- [185] C. E. Delaunay, *Sur une nouvelle théorie analytique du mouvement de la lune*, 1846
- [186] E. Deotto und G. C. Ghirardi, *Foundations of Physics* **28**, 1, 1998
- [187] D. Deutsch, *Proceedings of the Royal Society (London)* **A 455**, 3129, 1999
- [188] B. S. DeWitt und N. Graham (Hrsg.), *The Many-Worlds Interpretation of Quantum Mechanics*, Princeton University Press, Princeton 1973
- [189] H. Dingler, *Die Methode der Physik*, Ernst Reinhardt, München 1938
- [190] H. Dingler, *Aufbau der exakten Fundamentalwissenschaft*, Eidos, München 1964
- [191] H. Dingler, *Die Grundlagen der Naturphilosophie*, Eidos, München 1967
- [192] H. Dingler, *Aufsätze zur Methodik*, Felix Meiner, Hamburg 1987
- [193] P. A. M. Dirac, *Proceedings of the Royal Society (London)* **A 109**, 642, 1925
- [194] P. A. M. Dirac, *Proceedings of the Royal Society (London)* **A 110**, 561, 1926
- [195] P. A. M. Dirac, *Proceedings of the Royal Society (London)* **A 111**, 405, 1926
- [196] P. A. M. Dirac, *Proceedings of the Royal Society (London)* **A 112**, 661, 1926
- [197] P. A. M. Dirac, *Proceedings of the Royal Society (London)* **A 113**, 621, 1926
- [198] P. A. M. Dirac, *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **23**, 500, 1927
- [199] P. A. M. Dirac, *Proceedings of the Royal Society (London)* **A 113**, 621, 1927
- [200] P. A. M. Dirac, *Proceedings of the Royal Society (London)* **A 114**, 243, 1927

- [201] P. A. M. Dirac, Proceedings of the Royal Society (London) **A 117**, 610, 1928
- [202] P. A. M. Dirac, Proceedings of the Royal Society (London) **A 118**, 351, 1928
- [203] P. A. M. Dirac, Proceedings of the Royal Society (London) **A 126**, 360, 1930
- [204] P. A. M. Dirac, Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion **3**, 64, 1933, abgedruckt in [126], 111
- [205] P. A. M. Dirac, Review of Modern Physics **17**, 195, 1945
- [206] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford University Press, Oxford 1995
- [207] R. W. Ditchburn, Proceedings of the Royal Irish Academy **39**, 73, 1930
- [208] R. W. Ditchburn, *Light*, Dover, New York 1991
- [209] J. N. Dodd, *Atoms and Light: Interactions*, Plenum Press, New York 1991
- [210] V. V. Dodonov, E. V. Kurmishev und V. I. Man'ko, Physics Letters **A 79**, 150, 1980
- [211] M. Drieschner, *Voraussage - Wahrscheinlichkeit - Objekt: Über die begrifflichen Grundlagen der Quantenmechanik*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1979
- [212] M. Drieschner, *Einführung in die Naturphilosophie*, Wissenschaftliche Buchgesellschaft, Darmstadt 1991
- [213] I. Duck und E. C. G. Sudarshan, *Pauli and the Spin-Statistics-Theorem*, World Scientific, Singapore 1998
- [214] D. Dürr, *Bohmsche Mechanik als Grundlage der Quantenmechanik*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 2001
- [215] S. Dürr, T. Nonn und G. Rempe, Nature **395**, 33, 1998
- [216] S. Dürr, T. Nonn und G. Rempe, Physical Review Letters **26**, 5705, 1998
- [217] S. Dürr und G. Rempe, Optics Communications **179**, 323, 2000
- [218] K. J. Düsberg, in [76], 265
- [219] K. J. Düsberg, *Zur Messung von Raum und Zeit. Eine Kritik der sogenannten Proto-physik*, Anton Hain, Königstein 1980
- [220] A. Duncan und M. Janssen, arXiv: physics/0610192v1
- [221] A. Duncan und M. Janssen, arXiv: physics/0610193v1

- [222] A. Duncan und M. Janssen, arXiv: physics.hist-ph/0709.3812v1
- [223] A. Dvurecenskij, *Gleason's Theorem and its Applications*, Springer, Dordrecht 2010
- [224] R. S. Van Dyck, P. B. Schwinberg und H. G. Dehmelt, *Physical Review Letters* **59**, 26, 1987
- [225] A. R. Edmonds, *Drehimpulse in der Quantenmechanik*, Bibliographisches Institut, Mannheim 1964
- [226] C. Eckart, *Physical Review* **28**, 711, 1926
- [227] P. Ehrenfest, *Physikalische Zeitschrift* **7**, 528, 1906
- [228] P. Ehrenfest, *Annalen der Physik* **341**, 91, 1911
- [229] P. Ehrenfest, *Zeitschrift für Physik* **34**, 362, 1925
- [230] P. Ehrenfest, *Zeitschrift für Physik* **45**, 455, 1927
- [231] P. Ehrenfest und T. Ehrenfest, in [501], vierter Teilband, 1
- [232] P. Ehrenfest und H. Kammerlingh Onnes, *Annalen der Physik* **46**, 1021, 1915
- [233] D. M. Eigler und E. K. Schweizer, *Nature* **344**, 524, 1990
- [234] S. J. L. van Eijndhoven und J. de Graaf, *Trajectory Spaces, Generalized Functions and Unbounded Operators*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo 1985
- [235] S. J. L. van Eijndhoven und J. De Graaf, *A Mathematical Introduction to Dirac's Formalism*, North-Holland, Amsterdam, New York, Oxford, Tokyo 1986
- [236] A. Einstein, *Annalen der Physik* **11**, 170, 1903
- [237] A. Einstein, *Annalen der Physik* **17**, 132, 1905
- [238] A. Einstein, *Annalen der Physik* **20**, 199, 1906
- [239] A. Einstein, *Annalen der Physik* **22**, 180, 1907
- [240] A. Einstein, *Physikalische Zeitschrift* **10**, 817, 1909
- [241] A. Einstein, *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* **7**, 482, 1909
- [242] A. Einstein, *Physikalische Zeitschrift* **10**, 817, 1909
- [243] A. Einstein, *Annalen der Physik* **35**, 679, 1911
- [244] A. Einstein, *Annalen der Physik* **37**, 832, 1912

- [245] A. Einstein, Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft **18**, 318, 1916
- [246] A. Einstein, Physikalische Zeitschrift **18**, 121, 1917
- [247] A. Einstein, Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft **19**, 8, 1917
- [248] A. Einstein, Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin, 261, 1924
- [249] A. Einstein, Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin, 3, 1925
- [250] A. Einstein, Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin, 18, 1925
- [251] A. Einstein und W. J. de Haas, Verhandlungen der deutschen Physikalischen Gesellschaft 152, 1915
- [252] A. Einstein und L. Infeld, *Die Evolution der Physik*, Rowohlt, Reinbek 1987
- [253] A. Einstein, B. Podolsky und N. Rosen, Physical Review **47**, 777, 1935, abgedruckt in [924], deutsche Übersetzung in [42]
- [254] G. Eisenstein, Journal für reine und angewandte Mathematik **28**, 49, 1844
- [255] W. Eisner, Physikalische Blätter **57**, 75, 2001
- [256] G. G. Emch, *Algebraic Methods in Statistical Mechanics and Quantum Field Theory*, Wiley-Interscience, New York, London, Sydney, Toronto 1972
- [257] G. G. Emch, *Mathematical and Conceptual Foundations of 20th-Century Physics*, North-Holland, Amsterdam, New York, Oxford 1984
- [258] E. Emter, *Literatur und Quantentheorie: Die Rezeption der modernen Physik in Schriften zur Literatur und Philosophie deutschsprachiger Autoren (1925 - 1970)*, de Gruyter, Berlin, New York 1995
- [259] P. Enders, *Von der klassischen Physik zur Quantenphysik. Eine historisch-kritische deduktive Ableitung mit Anwendungsbeispielen aus der Festkörperphysik*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 2006
- [260] B.-G. Englert, Physical Review Letters **77**, 2154, 1996
- [261] B.-G. Englert, Zeitschrift für Naturforschung **54a**, 11, 1998
- [262] B.-G. Englert, M. O. Scully, G. Süßmann und H. Walther, Zeitschrift für Naturforschung **47a**, 1175, 1992

- [263] B.-G. Englert und H. Walther, *Physik in unserer Zeit* **23**, 213, 1992
- [264] B.-G. Englert, H. Walther und M. O. Scully, *Applied Physics* **B 54**, 366, 1992
- [265] P. S. Epstein, *Annalen der Physik* **51**, 168, 1916
- [266] P. S. Epstein, *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin*, 435, 1918
- [267] M. Esfeld, *Metaphilosophy* **30**, 319, 1999
- [268] M. Esfeld, *Einführung in die Naturphilosophie*, Wissenschaftliche Buchgesellschaft, Darmstadt 2002
- [269] M. Esfeld, *Metaphysica: International Journal for Ontology & Metaphysics* **4**, 5, 2003
- [270] M. Esfeld, *Naturphilosophie als Metaphysik der Natur*, Suhrkamp, Frankfurt am Main 2007
- [271] B. d'Espagnat, *Conceptual Foundations of Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Menlo Park, New York 1989
- [272] B. d'Espagnat, *Veiled Reality. An Analysis of Present-Day Quantum Mechanical Concepts*, Westview, Boulder 2003
- [273] L. Euler, *Methodus Inveniendi Lineas Curvas Maximi Minimive Proprietate Gaudentes*, Bousquet, Lausanne, Genf 1744
- [274] L. Euler, *Acta Academiae Scientiarum Petropolitana* **2**, 29, 1783
- [275] H. Everett III, *The Theory of the Universal Wave Function*, Dissertation, Princeton University, Princeton 1957, abgedruckt in [188], 3
- [276] H. Everett III, *Reviews of Modern Physics* **29**, 454, 1957, abgedruckt in [188], 141, und in [924], 315
- [277] J. Faye und H. Folse, *Niels Bohr and Contemporary Philosophy*, Kluwer, Dordrecht 1994
- [278] P. N. Fedoseev et al. (Hrsg.), *Filosofskie problemy sovremennogo estestvoznaniija*, Akademij nauk SSSR, Moskau 1959
- [279] I. Fényes, *Zeitschrift für Physik* **132**, 81, 1952
- [280] E. Fermi, *Rendiconti Lincei* **3**, 145, 1926
- [281] E. Fermi, *Zeitschrift für Physik* **36**, 902, 1926

- [282] E. Fermi, *Nuclear Physics*, University of Chicago Press, Chicago 1950
- [283] P. K. Feyerabend, in [508], 121, deutsche Übersetzung in [289], 253
- [284] P. K. Feyerabend, *Proceedings of the Aristotelian Society* **58**, 143, 1958, deutsche Übersetzung in [288], 4
- [285] P. K. Feyerabend, in [906], 351
- [286] P. K. Feyerabend, *Philosophy of Science* **35**, 309, 1968, deutsche Übersetzung in [289], 365
- [287] P. K. Feyerabend, *Philosophy of Science* **36**, 82, 1969, deutsche Übersetzung in [289], 365
- [288] P. K. Feyerabend, *Der wissenschaftstheoretische Realismus und die Autorität der Wissenschaften. Ausgewählte Schriften, Band 1*, Vieweg, Braunschweig, Wiesbaden 1978
- [289] P. K. Feyerabend, *Probleme des Empirismus. Schriften zur Theorie der Erklärung, der Quantentheorie und der Wissenschaftsgeschichte. Ausgewählte Schriften, Band 2*, Vieweg, Braunschweig, Wiesbaden 1981
- [290] P. K. Feyerabend, in [162], 189
- [291] R. P. Feynman, *The Principle of Least Action in Quantum Mechanics*, Dissertation, Princeton University, Princeton 1942, abgedruckt in [126], 1
- [292] R. P. Feynman, *Review on Modern Physics* **20**, 367, 1948, abgedruckt in [126], 71
- [293] R. P. Feynman und A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York 1965
- [294] M. Fierz, *Helvetica Physica Acta* **12**, 3, 1939
- [295] B. de Finetti, *Theory of Probability. A Critical Introductory Treatment. Vol. 1*, Wiley, Chichester 1990
- [296] B. de Finetti, *Theory of Probability. A Critical Introductory Treatment. Vol. 2*, Wiley, Chichester 1990
- [297] E. Fischer, *Comptes Rendues de l'Académie des sciences* **144**, 1022, 1907
- [298] S. Flügge (Hrsg.), *Handbuch der Physik. Band V, Teil 1: Prinzipien der Quantentheorie I*, Springer, Berlin 1958
- [299] V. A. Fock, *Uspekhi fizicheskikh nauk* **4**, 437, 1936
- [300] V. A. Fock, in [278], 212

- [301] V. A. Fock, *Fundamentals of Quantum Mechanics*, MIR, Moskau 1978
- [302] P. Forman, *Historical Studies in the Physical Sciences* **2**, 153, 1970
- [303] R. H. Fowler, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, **87**, 114, 1926
- [304] P. Frank, *Erkenntnis* **6**, 303, 1936
- [305] P. Frank, *Das Kausalgesetz und seine Grenzen*, Suhrkamp, Frankfurt am Main 1988
- [306] A. P. French und P. J. Kennedy (Hrsg.), *Niels Bohr. A Centenary Volume*, Harvard University Press, Cambridge, London 1985
- [307] J. I. Frenkel, *Wave Mechanics. Elementary Theory*, Clarendon Press, Oxford 1932
- [308] M. F. Crommie, C. P. Lutz und D. M. Eigler, *Science* **262**, 218, 1993
- [309] C. Fuchs, arXiv: quant-ph/0205039
- [310] W. R. Fuchs, *Knaurs Buch der modernen Physik*, Knauer, München, Zürich 1965
- [311] E. A. Galapon, *Proceedings of the Royal Society (London)* **A 458**, 451, 2002
- [312] E. A. Galapon, *Proceedings of the Royal Society (London)* **A 487**, 2671, 2002
- [313] R. Gans, *Annalen der Physik* **47**, 709, 1915
- [314] J. C. Garrison und J. Wong, *Journal of Mathematical Physics* **11**, 2242, 1970
- [315] H. Geiger und K. Scheel (Hrsg.), *Handbuch der Physik. Band XXIII Erster Teil: Quanten*, Springer, Berlin 1926
- [316] H. Geiger und K. Scheel (Hrsg.), *Handbuch der Physik. Band XXIV, Erster Teil: Quantentheorie*, Springer, Berlin 1933
- [317] I. M. Gelfand und G. E. Schilow, *Verallgemeinerte Funktionen, Band I*, Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1960
- [318] I. M. Gelfand und G. E. Schilow, *Verallgemeinerte Funktionen, Band II*, Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1962
- [319] I. M. Gelfand und G. E. Schilow, *Verallgemeinerte Funktionen, Band III*, Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1964
- [320] I. M. Gelfand und N. J. Wilenkin, *Verallgemeinerte Funktionen, Band IV*, Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1967
- [321] H. Genz, *Physik in unserer Zeit* **28**, 251, 1997

- [322] H. Genz, *Gedankenexperimente*, Wiley-VCH, Weinheim, New York, Chichester, Brisbane, Singapore, Toronto 1999
- [323] W. Gerlach und O. Stern, Zeitschrift **8**, 10, 1921
- [324] W. Gerlach und O. Stern, Zeitschrift für Physik **9**, 349, 1922
- [325] W. Gerlach und O. Stern, Annalen der Physik **74**, 673, 1924
- [326] P. Ghose, arXiv: quant-ph/0003037v3
- [327] P. Ghose, arXiv: quant-ph/0103126v8
- [328] P. Ghose, *Testing Quantum Mechanics on New Ground*, Cambridge University Press, Cambridge 2006
- [329] J. W. Gibbs und E. B. Wilson, *Vector Analysis*, Scribners, New York 1901
- [330] F. Gieres, Reports on Progress in Physics **63**, 1893, 2000
- [331] D. Giulini, in [451], 141
- [332] R. J. Glauber, Physical Review Letters **10**, 84, 1963
- [333] R. J. Glauber, Physical Review **130**, 2529, 1963
- [334] R. J. Glauber, Physical Review **131**, 2766, 1963
- [335] A. M. Gleason, Journal of Mathematical Mechanics **6**, 885, 1957
- [336] W. Görlich, I. Hoffmann und T. Schürmann, arXiv: 0812.4775v4 [quant-ph]
- [337] P. Goggans und C.-Y. Chan (Hrsg.), *Bayesian Inference and Maximum Entropy Methods in Science and Engineering*, Oxford, MS, USA, 2009, AIP Conference Proceedings 1193, American Institute of Physics, Melville 2009
- [338] H. Goldstein, *Klassische Mechanik*, Aula, Wiesbaden 1985
- [339] H. Goldstein, C. P. Poole und J. L. Safko, *Klassische Mechanik*, Wiley-VCH, Weinheim 2006
- [340] S. Goudsmit, Zeitschrift für Physik **32**, 111, 1925
- [341] S. A. Goudsmit, Nederlands Tijdschrift voor Natuurkunde **37**, 386, 1971
- [342] S. Goudsmit und G. E. Uhlenbeck, Physica **6**, 273, 1926
- [343] P. Goayl, Physical Review A **78**, 052120, 2008

- [344] P. Goyal, arXiv: 0805.2765v1 [quant-ph]
- [345] P. Goyal, New Journal of Physics **12**, 023012, 2010
- [346] P. Goyal, K. H. Knuth und J. Skilling, in [337], 89
- [347] P. Goyal, K. H. Knuth und J. Skilling, Physical Review A **81**, 022109, 2010
- [348] P. Goyal und K. H. Knuth, Symmetry **3**, 171, 2011
- [349] L. R. Graham, Slavic Review **25**, 381, 1966
- [350] L. R. Graham, *Dialektischer Materialismus und Naturwissenschaften in der UdSSR. Erster Teil: Quantenmechanik - Relativitätstheorie - Ursprung und Aufbau des Weltalls*, S. Fischer, Frankfurt am Main 1982
- [351] L. R. Graham, in [306], 332
- [352] D. Grau, *Übungsaufgaben zur Quantentheorie. Quantentheoretische Grundlagen*, Hanser, München, Wien 1988
- [353] G. Green, Transactions of the Cambridge Philosophical Society **6**, 457, 1837
- [354] H. S. Green, *Quantenmechanik in algebraischer Darstellung*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1966
- [355] D. Greenberger, K. Hentschel und F. Weinert (Hrsg.) *Compendium of Quantum Physics. Concepts, Experiments, History and Philosophy*, Springer, Dordrecht, Heidelberg, London, New York 2009
- [356] D. M. Greenberger, M. A. Horne, A. Shimony und A. Zeilinger, American Journal of Physics **58**, 1131, 1990
- [357] D. M. Greenberger, M. A. Horne und A. Zeilinger, in [842], 69
- [358] D. M. Greenberger, M. A. Horne und A. Zeilinger, American Journal of Physics **58**, 1131, 1990
- [359] W. Greiner, *Theoretische Physik. Band 4 A: Quantentheorie – Spezielle Kapitel*, Harri Deutsch, Thun, Frankfurt am Main 1993
- [360] H. J. Groenewold, Physica **12**, 405, 1946
- [361] S. Großmann, *Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik*, Aula, Wiesbaden 1988
- [362] B. Gruber, R. S. Millman (Hrsg.), *Symmetries in Science*, Plenum Press, New York 1980

- [363] P. Gschwind, *Methodische Grundlagen zu einer projektiven Quantenphysik*, Verlag am Goetheanum, Dornach 1989
- [364] M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Springer, New York 1991
- [365] D. ter Haar, *Quantentheorie. Einführung und Originaltexte*, Vieweg, Braunschweig 1969
- [366] L. Hackermüller, S. Uttenthaler, K. Hornberger, E. Reiger, B. Brezger, A. Zeilinger und M. Arndt, *Physical Review Letters* **91**, 090408, 2003
- [367] R. Haag, *Local Quantum Physics. Fields, Particles, Algebras*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1996
- [368] R. Haag und D. Kastler, *Journal of Mathematical Physics* **5**, 848, 1964
- [369] J. Habermas, *Erkenntnis und Interesse*, Suhrkamp, Frankfurt am Main 1973
- [370] A. Hagar, *Philosophy of Science* **70**, 752, 2003
- [371] A. Hagar und M. Hemmo, *Foundations of Physics* **36**, 1295, 2006
- [372] G. E. Hahne, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **36**, 7149, 2003
- [373] H. Haken und H. C. Wolf, *Atom- und Quantenphysik. Eine Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1987
- [374] M. J. W. Hall, *Journal of Physics A* **37**, 9549, 2004
- [375] W. Hallwachs, *Wiedmann'sche Annalen* **29**, 1, 1886
- [376] W. Hallwachs, *Wiedmann'sche Annalen* **32**, 64, 1887
- [377] W. Hallwachs, *Wiedmann'sche Annalen* **33**, 301, 1888
- [378] H. Halvorson, *Letters on Mathematical Physics* **53**, 321, 2000
- [379] H. Halvorson, *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* **35**, 45, 2004
- [380] H. Halvorson und R. Clifton, *International Journal of Theoretical Physics* **38**, 2441, 1999
- [381] H. Halvorson und R. Clifton, in [696], 3
- [382] W. R. Hamilton, *Dublin University Review and Quarterly Magazine* **1**, 795, 1833
- [383] W. R. Hamilton, *Philosophical Transactions of the Royal Society II*, 247, 1834
- [384] W. R. Hamilton, *British Association for the Advancement of Science Report*, 513, 1834

- [385] W. R. Hamilton, *Philosophical Transactions of the Royal Society I*, 95, 1835
- [386] W. R. Hamilton, *Proceedings of the Royal Irish Academy* **3**, 344, 1847
- [387] W. R. Hamilton, *Proceedings of the Royal Irish Academy* **3**, Appendix, xxxvi, 1847
- [388] D. Han, J. Janszky, Y. S. Kim und V. I. Man'ko (Hrsg.), *Proceedings of the Fifth International Conference on Squeezed States and Uncertainty Relations*, NASA Conference Publication NASA/CP-1998-206855, NASA, Washington, DC 1998
- [389] D. Hanneke, F. Fogwell und G. Gabrielse, *Physical Review Letters* **100**, 120801, 2008
- [390] S. Hartmann und P. Suppes, in [848], 93
- [391] R. Havemann, *Dialektik ohne Dogma? Naturwissenschaft und Weltanschauung*, Rowohlt, Reinbek 1982
- [392] O. Heaviside, *Proceedings of the Royal Society (London)* **52**, 504, 1893
- [393] O. Heaviside, *Proceedings of the Royal Society (London)* **54**, 104, 1893
- [394] G. F. W. Hegel, *Wissenschaft der Logik. Erster Band: Die objective Logik*, Johann Leonhard Schrag, Nürnberg 1812
- [395] G. F. W. Hegel, *Wissenschaft der Logik. Zweiter Band: Die subjective Logik oder Lehre vom Begriff*, Johann Leonhard Schrag, Nürnberg 1816
- [396] M. Heidegger, *Vorträge und Aufsätze*, Klett-Cotta, Stuttgart 2009
- [397] M. Heidegger, in [396], 9
- [398] M. Heidegger, in [396], 41
- [399] W. Heisenberg, *Zeitschrift für Physik* **33**, 879, 1925
- [400] W. Heisenberg, *Zeitschrift für Physik* **40**, 501, 1926
- [401] W. Heisenberg, *Mathematische Annalen* **95**, 683, 1926
- [402] W. Heisenberg, *Zeitschrift für Physik* **43**, 172, 1927
- [403] W. Heisenberg, in [604], 404
- [404] W. Heisenberg, in [687], 12
- [405] W. Heisenberg, *Schritte über Grenzen. Gesammelte Reden und Aufsätze*, Piper, München, Zürich 1989

- [406] W. Heisenberg, *Physikalische Prinzipien der Quantentheorie*, Bibliographisches Institut, Mannheim, Wien, Zürich 1991
- [407] W. Heisenberg, *Der Teil und das Ganze. Gespräche im Umkreis der Atomphysik*, Deutscher Taschenbuch-Verlag, München 1993
- [408] W. Heisenberg, *Physik und Philosophie*, Hirzel, Stuttgart 2000
- [409] W. Heisenberg und P. Jordan, *Zeitschrift für Physik* **37**, 263, 1926
- [410] D. Heiss (Hrsg.), *Fundamentals of Quantum Information. Quantum Computation, Communication, Decoherence and All That*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 2002
- [411] C. Held, *Die Bohr-Einstein-Debatte. Quantenmechanik und physikalische Wirklichkeit*, Schöningh, Paderborn, München, Wien, Zürich 1998
- [412] R. W. Henry und S. C. Glotzer, *American Journal of Physics* **56**, 318, 1988
- [413] K. Hentschel, *Physikalische Blätter* **52**, 1232, 1996
- [414] N. Herbert, *Quantenrealität. Jenseits der neuen Physik*, Birkhäuser, Basel, Boston 1987
- [415] A. Hermann, *Frühgeschichte der Quantentheorie*, Physik-Verlag, Mosbach 1969
- [416] G. Hermann, *Die Naturwissenschaften* **23**, 718, 1935
- [417] J. Hermann, *Giornale de Letterati D'Italia* **2**, 447, 1710
- [418] J. Hermann, *Histoire de l'Académie Royae des Sciences (Paris)* **1732**, 519, 1710
- [419] H. Herrmann und M. Laukenmann, *Physik in der Schule* **32**, 718, 1994
- [420] F. Herrmann und H. Hauptmann, *Karlsruher Physikkurs S II, Band 1*, Aulis, Köln 2008
- [421] H. Hertz, *Annalen der Physik* **31**, 421, 1887
- [422] H. Hertz, *Sitzungsberichte der Königlich-Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin*, II, 487, 1887
- [423] H. Hertz, *Wiedmann'sche Annalen* **31**, 983, 1887
- [424] H. Hertz, *Annalen der Physik* **34**, 155, 1888
- [425] H. Hertz, *Annalen der Physik* **34**, 551, 1888
- [426] D. Hilbert, L. Nordheim und J. von Neumann, *Mathematische Annalen* **98**, 1, 1927
- [427] J. Hilgevoord, *American Journal of Physics* **64**, 1451, 1996

- [428] J. Hilgevoord, *American Journal of Physics* **66**, 396, 1998
- [429] J. Hilgevoord, *American Journal of Physics* **70**, 301, 2002
- [430] J. Hilgevoord, *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* **36**, 29, 2005
- [431] O. Hittmair, *Lehrbuch der Quantentheorie*, Thiemig, München 1972
- [432] H. Høffding, *Philosophische Probleme*, Reisland, Leipzig 1903
- [433] H. Høffding, *Moderne Philosophen*, Reisland, Leipzig 1905
- [434] H. Høffding, *Der menschliche Gedanke, seine Formen und Aufgaben*, Reisland, Leipzig 1911
- [435] H. Høffding, *Der Relationsbegriff*, Reisland, Leipzig 1922
- [436] D. Hoffmann, *Physikalische Blätter* **56**, 23, 2000
- [437] P. R. Holland, *The Quantum Theory of Motion. An Account of the de Broglie-Bohm Causal Interpretation of Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, Cambridge 1995
- [438] P. Holland, *Foundations of Physics* **35**, 177, 2005
- [439] G. Holton, *Daedalus* **99**, 1015, 1970
- [440] G. Holton, *Thematische Analyse der Wissenschaft. Die Physik Einsteins und seiner Zeit*, Suhrkamp, Frankfurt am Main 1981
- [441] D. Home und M. A. B. Whitaker, *Physics Reports* **210**, 223, 1992
- [442] J. Honerkamp und H. Römer, *Klassische Theoretische Physik. Eine Einführung*, Springer, Berlin 1993
- [443] C. A. Hooker, *The Logico-Algebraic Approach to Quantum Mechanics*, Reidel, Dordrecht 1975
- [444] M. Horkheimer und T. W. Adorno, *Dialektik der Aufklärung. Philosophische Fragmente*, Fischer, Frankfurt am Main 2003
- [445] D. Howard, *Complementarity and Ontology: Niels Bohr and the problem of scientific realism in quantum physics*, Dissertation, Boston University, Boston 1979
- [446] D. Howard, in [277], 201
- [447] D. Howard, *Philosophy of Science* **71**, 669, 2004
- [448] D. Howard, *IYYUN The Jerusalem Philosophical Quarterly* **56**, 57, 2007

- [449] K. Hübner und A. Menne (Hrsg.), *Natur und Geschichte. X. Deutscher Kongreß für Philosophie, Kiel 8. - 12. Oktober 1972*, Felix Meiner, Hamburg 1973
- [450] F. Hund, *Geschichte der Quantentheorie*, Bibliographisches Institut, Mannheim, Wien, Zürich 1984
- [451] H. Hunziker, *Der jugendliche Einstein und Aarau. Einsteins letztes Schuljahr, Relativität, Brownsche Bewegung, Lichtquanten und Astrophysik*, Birkhäuser, Basel. Boston, Berlin 2005
- [452] R. Inhetveen, *Konstruktive Geometrie. Eine formentheoretische Begründung der euklidischen Geometrie*, Bibliographisches Institut, Mannheim 1983
- [453] J. Ishiwara, Tokyo Suggaku Buturigakkawi Kizi **8**, 106, 1915
- [454] J. D. Jackson, *Klassische Elektrodynamik*, De Gruyter, Berlin 2006
- [455] C. G. J. Jacobi, Comptes rendus de l'Académie des sciences de Paris **5**, 61, 1837
- [456] C. G. J. Jacobi, Journal für die reine und angewandte Mathematik **26**, 115, 1843
- [457] C. G. J. Jacobi, Journal für die reine und angewandte Mathematik **60**, 1, 1862
- [458] C. G. J. Jacobi, *Vorlesungen über Dynamik*, G. Reimer, Berlin 1866
- [459] M. Jäger, *Die Philosophie des Konstruktivismus auf dem Hintergrund des Konstruktionsbegriffs*, Olms, Hildesheim, Zürich, New York 1998
- [460] G. Jaeger, A. Khrennikov und M. Schlosshauer, *Advances in Quantum Theory. AIP Conference Proceedings 1327*, American Institute of Physics, Melville 2011
- [461] W. James, *The Principles of Psychology, vol. 1*, Holt, New York 1890
- [462] W. James, *The Principles of Psychology, vol. 2*, Holt, New York 1890
- [463] M. Jammer, *The Conceptual Development of Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York 1966
- [464] M. Jammer, *The Philosophy of Quantum Mechanics: The Interpretations of Quantum Mechanics in Historical Perspective*, Wiley, Hoboken 1974
- [465] P. Janich, *Zweck und Methode der Physik aus philosophischer Sicht*, Universitätsverlag, Konstanz 1973
- [466] P. Janich, in [76], 83
- [467] P. Janich, *Das Maß der Dinge. Protophysik von Raum, Zeit und Materie*, Suhrkamp, Frankfurt am Main 1997

- [468] J. M. Jauch, *Helvetica physica acta* **37**, 193, 1964
- [469] J. M. Jauch, *Foundations of Quantum Mechanics*, Addison.Wesley, Reading 1968
- [470] J. H. Jeans, *Philosophical Magazine* **10**, 91, 1905
- [471] H. Jeffreys, *Proceedings of the London Mathematical Society* **23**, 428, 1924
- [472] C. Joas, C. Lehner und J. Renn (Hrsg.), *HQ-1: Conference on the History of Quantum Physics (Vol. II)*, Max-Planck-Institut für Wissenschaftsgeschichte, Berlin 2008
- [473] H. Jonas, *Macht oder Ohnmacht der Subjektivität? Das Leib-Seele-Problem im Vorfeld des Prinzips Verantwortung*, Suhrkamp, Frankfurt am Main 1987
- [474] E. Joos und H. D. Zeh, *Zeitschrift für Physik B* **59**, 223, 1985
- [475] E. Joos, H. D. Zeh, C. Kiefer, D. Giulini, J. Kupsch und I.-O. Stamatescu, *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 2003
- [476] P. Jordan, *Zeitschrift für Physik* **40**, 661, 1926
- [477] P. Jordan, *Zeitschrift für Physik* **40**, 809, 1926
- [478] P. Jordan, *Die Naturwissenschaften* **15**, 105, 1927
- [479] P. Jordan, *Zeitschrift für Physik* **40**, 809, 1927
- [480] P. Jordan, *Anschauliche Quantentheorie. Eine Einführung in die moderne Auffassung der Quantenerscheinungen*, Springer, Berlin 1936
- [481] P. Jordan, *Die Physik des 20. Jahrhunderts. Einführung in den Gedankeninhalt der modernen Physik*, Vieweg, Braunschweig 1936
- [482] P. Jordan und J. von Neumann, *Annals of Mathematics* **36**, 3, 719, 1935
- [483] T. F. Jordan, *Quantum Mechanics in Simple Matrix Form*, Wiley, New York 1986
- [484] H. Kallman und H. Mark, *Ergebnisse der exakten Naturwissenschaften* **5**, 267, 1926
- [485] F. Kambartel, in [449], 154, wiederabgedruckt in [76], 351
- [486] H. Kayser und C. Runge, *Annalen der Physik und Chemie* **41**, 302, 1890
- [487] H. Kayser und C. Runge, *Annalen der Physik und Chemie* **43**, 385, 1891
- [488] H. Kayser und C. Runge, *Annalen der Physik* **282**, 225, 1892
- [489] H. Kayser und C. Runge, *Annalen der Physik und Chemie* **48**, 126, 1893

- [490] H. Kayser und C. Runge, *Annalen der Physik und Chemie* **52**, 93, 1894
- [491] J. B. Keller, *SIAM Reviews* **27**, 48, 1985
- [492] E. H. Kennard, *Zeitschrift für Physik* **44**, 326
- [493] S. Keppeler, *Annals of Physics (New York)* **304**, 40, 2003
- [494] S. Keppeler, *Spinning Particles: Semiclassics and Spectral Statistics*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 2010
- [495] S. Keppeler, *Physik Journal* **3**, 45, 2004
- [496] G. Kirchhoff, *Sitzungsberichte der Königlich Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin*, 641, 1882
- [497] G. Kirchhoff, *Vorlesungen über mathematische Physik, Band II*, Teubner, Leipzig 1891
- [498] S. Kierkegaard, *Stadien auf des Lebens Weg I*, Gütersloher Verlagshaus, Gütersloh 1982
- [499] S. Kierkegaard, *Stadien auf des Lebens Weg II*, Gütersloher Verlagshaus, Gütersloh 1982
- [500] J. R. Klauder und B. Skagerstam, *Coherent States*, World Scientific, Singapore 1985
- [501] F. Klein und C. Müller, *Encyklopädie der mathematischen Wissenschaften mit Einschluß ihrer Anwendungen. Vierter Band in vier Teilbänden: Mechanik*, Teubner, Leipzig 1911
- [502] O. Klein und Y. Nishina, *Zeitschrift für Physik* **52**, 853, 1929
- [503] J. Klüver, *Operationalismus. Kritik und Geschichte einer Philosophie der exakten Wissenschaften*, Frommann-Holzboog, Stuttgart 1971
- [504] J. Klüver und F. O. Wolf (Hrsg.), *Wissenschaftskritik und sozialistische Praxis. Konsequenzen aus der Studentenbewegung*, Frommann-Holzboog, Stuttgart 1972
- [505] J. Klüver, in [504], 77
- [506] H. Kneser, *Mathematische Annalen* **84**, 277, 1921
- [507] S. Kochen und E. Specker, *Journal of Mathematics and Mechanics* **17**, 59, 1967
- [508] S. Körner (Hrsg.), *Observation and Interpretation. A Symposium of Philosophers and Physicists. Proceedings of the Ninth Symposium of the Colston Research Society held in the University of Bristol, April 1st - April 4th, 1957*, Butterworths, London 1957
- [509] R. von Kövesligethy, *Proceedings of the Hungarian Academy of Sciences* **XII**, 1, 1885

- [510] R. von Kövesligethy, *Grundzüge einer theoretischen Spektralanalyse*, H. W. Schmidt, Halle an der Saale 1890
- [511] A. Kolmogorov, *Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung*, Springer, Berlin 1973
- [512] H. Kopfermann und R. Ladenburg, *Zeitschrift für Physik* **A 48**, 51, 1928
- [513] H. A. Kramers, *Zeitschrift für Physik* **39**, 828, 1926
- [514] H. A. Kramers und W. Heisenberg, *Zeitschrift für Physik* **31**, 681, 1925
- [515] B. Kuckert, *Spin & Statistics, Localization Regions, and Modular Symmetries in Quantum Field Theory*, Dissertation, Universität Hamburg, Hamburg 1998
- [516] O. Künler und H. D. Zeh, *Annals of Physics* **76**, 405, 1973
- [517] W. Kuhn, *Zeitschrift für Physik* **33**, 408, 1925
- [518] W. Kuhn, *Praxis der Naturwissenschaften – Physik* **36**, Nr. 4, 2, 1987
- [519] W. Kuhn und J. Strnad, *Quantenfeldtheorie. Photonen und ihre Deutung*, Vieweg, Braunschweig, Wiesbaden 1995
- [520] P. Kusch, *Physical Review* **100**, 1188, 1955
- [521] P. Kusch und H. M. Foley, *Physical Review* **72**, 1256, 1947
- [522] J. L. Lagrange, *Miscellanea Taurinensia* **2**, 173, 1760/1761; publ. 1762
- [523] J. L. Lagrange, *Miscellanea Taurinensia* **2**, 196, 1760/1761; publ. 1762
- [524] J. L. Lagrange, *Mécanique Analytique*, Desaint, Paris 1788
- [525] W. E. Lamb, *Physics Today* 4/1969, 23
- [526] J. H. Lambert, *Acta Helvetica, physico-mathematico-anatomico-botanico-medica* **3**, 128, 1758
- [527] C. Lanczos, *Zeitschrift für Physik* **35**, 812, 1926
- [528] C. Lanczos, *Zeitschrift für Physik* **65**, 431, 1930
- [529] C. Lanczos, *The Variational Principles of Mechanics*, Dover, New York 1986
- [530] L. D. Landau und R. Peierls, *Zeitschrift für Physik* **69**, 56, 1931
- [531] L. D. Landau und E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der theoretischen Physik. Band III: Quantenmechanik*, Akademie-Verlag, Berlin 1988

- [532] A. Landé, Die Naturwissenschaften **9**, 926, 1921
- [533] A. Landé, Zeitschrift für Physik **5**, 231, 1921
- [534] A. Landé, Zeitschrift für Physik **7**, 398, 1921
- [535] A. Landé, Zeitschrift für Physik **15**, 189, 1923
- [536] A. Landé, Zeitschrift für Physik **19**, 112, 1923
- [537] A. Landé, *Die neuere Entwicklung der Quantentheorie*, Steinkopff, Dresden, Leipzig 1926
- [538] P. S. de Laplace, *Traité de la mécanique celeste, Tome I, Première Partie, Livre II*, Paris 1799
- [539] J. J. Larmor, Philosophical Magazine **44**, 503, 1897
- [540] J. J. Larmor, *Aether and Matter*, Cambridge University Press, Cambridge 1900
- [541] M. von Laue, Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft **17**, 237, 1915
- [542] P. G. L. Leach und G. P. Flessas, Journal of Nonlinear Mathematical Physics **10**, 240, 2003
- [543] P. Lenard, Sitzungsberichte der mathematisch-naturwissenschaftlichen Classe der Kaiserlichen Akademie der Wissenschaften 108, 1649, 1899
- [544] P. Lenard, Annalen der Physik **8**, 149, 1902
- [545] P. Lenard, Annalen der Physik **12**, 714, 1903
- [546] P. Lenard, Annalen der Physik **31**, 641, 1910
- [547] W. Lenz, Zeitschrift für Physik **24**, 197, 1924
- [548] G. N. Lewis, Journal of the American Chemical Society **38**, 762, 1916
- [549] G. N. Lewis, Nature **118**, 874, 1926
- [550] C. L. von Liechtenstern, in [1], 67
- [551] J. Liouville, Journal des Mathématiques Pures et Appliquées **1**, 16, 1837
- [552] H. A. Lorentz, Archives Néerlandaises des Sciences Exactes et Naturelles **25**, 363, 1892
- [553] H. A. Lorentz, Proceedings of the Royal Netherlands Academy of Arts and Sciences **1**, 427, 1899

- [554] H. A. Lorentz, Proceedings of the Royal Netherlands Academy of Arts and Sciences **6**, 809, 1904
- [555] H. A. Lorentz, Physikalische Zeitschrift **11**, 349, 1910
- [556] H. A. Lorentz, *The Theory of Electrons*, Teubner, Leipzig 1916
- [557] H. A. Lorentz, *Les théories statistiques en thermodynamique*, Teubner, Leipzig 1916
- [558] P. Lorenzen, in [76], 40
- [559] P. Lorenzen, *Grundbegriffe technischer und politischer Kultur. Zwölf Beiträge*, Suhrkamp, Frankfurt am Main 1985
- [560] W. H. Louisell, R. W. Pidd und H. R. Crane, Physical Review **94**, 7, 1954
- [561] G. Lüders, Kongelige Danske Videnskabernes Selskab, Matematisk-Fysiske Meddelelser **28**, 5, 1954
- [562] G. Lüders, Annals of Physics **2**, 1, 1957
- [563] G. Lüders und B. Zumino, Physical Review **110**, 1450, 1958
- [564] G. Ludwig, *Deutung des Begriffs „physikalische“ Theorie, und axiomatische Grundlegung der Hilbertraumstruktur der Quantenmechanik durch Hauptsätze des Messens*, Springer, Berlin, New York 1970
- [565] G. Ludwig, *Einführung in die Grundlagen der Theoretischen Physik. Band 3: Quantentheorie*, Vieweg, Braunschweig 1976
- [566] G. Ludwig, *Einführung in die Grundlagen der Theoretischen Physik. Band 4: Makrosysteme, Physik und Mensch*, Vieweg, Braunschweig 1979
- [567] G. Ludwig, *An Axiomatic Basis for Quantum Mechanics. Volume 1: Derivation of Hilbert Space Structure*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1985
- [568] G. Ludwig, *An Axiomatic Basis for Quantum Mechanics. Volume 2: Quantum Mechanics of Macrosystems*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1987
- [569] O. Lummer und E. Pringsheim, Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft **1**, 23, 1899
- [570] H. Lyre, *Quantentheorie der Information. Zur Naturphilosophie der Ur-Alternativen und einer abstrakten Theorie der Information*, Springer, Wien, New York 1998
- [571] H. Maassen, in [54], 65
- [572] E. Mach, Physikalische Zeitschrift **11**, 599, 1910

- [573] E. Mach, Pflügers Archiv für die gesamte Physiologie des Menschen und der Tiere **136**, 263, 1910
- [574] E. Mach, *Die Mechanik in ihrer Entwicklung. Historisch-kritisch dargestellt*, Wissenschaftliche Buchgesellschaft, Darmstadt 1991
- [575] E. Mach, *Analyse der Empfindungen*, Xenomoi, Berlin 2008
- [576] E. Mach, *Erkenntnis und Irrtum. Skizzen zur Psychologie der Forschung*, Xenomoi, Berlin 2011
- [577] G. W. Mackey, American Mathematical Monthly **64**, 45, 1957
- [578] G. W. Mackey, *The Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Benjamin, New York 1963
- [579] C. M. Madrid Casado, Latin-American Journal of Physics Education **2**, 152, 2008
- [580] T. H. Maiman, Nature **187**, 493, 1960
- [581] A. K. Mann und P. Kusch, Physical Review **77**, 435, 1950
- [582] J. H. Marburger III, American Journal of Physics **76**, 585, 2008
- [583] H. Marcuse, *Der eindimensionale Mensch. Studien zur Ideologie der fortgeschrittenen Industriegesellschaft*, Deutscher Taschenbuchverlag, München 2004
- [584] H. Margenau und L. Cohen, in [139], 71
- [585] K. Marx und F. Engels, *Marx Engels Werke, Band 20: Anti-Dühring, Dialektik der Natur*, Dietz, Berlin 1990
- [586] S. Massar und S. Pironio, in [118], 105
- [587] P.-L. M. de Maupertuis, Mémoires de l'Académie Royale des Sciences de Paris, 417, 1744/1748
- [588] P.-L. M. de Maupertuis, Académie Royale des Sciences et des Belles Lettres de Berlin, 267, 1746
- [589] J. Mehra, *The Physicist's Conception of Nature*, Reidel, Dordrecht 1973
- [590] J. Mehra und H. Rechenberg, *The historical Development of Quantum Theory, Part 1 / 1: The Quantum Theory of Planck, Einstein, Bohr and Sommerfeld: Its Foundation and the Rise of Its Difficulties 1900-1925 1*, Springer, New York, Berlin, Heidelberg 1982

- [591] J. Mehra und H. Rechenberg, *The historical Development of Quantum Theory, Part 1 / 2: The Quantum Theory of Planck, Einstein, Bohr and Sommerfeld: Its Foundation and the Rise of Its Difficulties 1900-1925 2*, Springer, New York, Berlin, Heidelberg 1982
- [592] J. Mehra und H. Rechenberg, *The historical Development of Quantum Theory, Vol. 2: The Discovery of Quantum Mechanics 1925*, Springer, New York, Berlin, Heidelberg 1982
- [593] J. Mehra und H. Rechenberg, *The historical Development of Quantum Theory, Vol. 3: The Formulation of Matrix Mechanics and Its Modifications 1925-1926*, Springer, New York, Berlin, Heidelberg 1982
- [594] J. Mehra und H. Rechenberg, *The historical Development of Quantum Theory, Vol. 4, Part 1: The Fundamental Equations of Quantum Mechanics 1925-1926, Part 2: The Reception of the New Quantum Mechanics 1925-1926*, Springer, New York, Berlin, Heidelberg 1982
- [595] J. Mehra und H. Rechenberg, *The historical Development of Quantum Theory, Part 5 / 1: Schrödinger in Vienna and Zurich 1887-1925*, Springer, New York, Berlin, Heidelberg 1987
- [596] J. Mehra und H. Rechenberg, *The historical Development of Quantum Theory, Part 5 / 2: The Creation of Wave Mechanics; Early Response and Applications 1925-1926*, Springer, New York, Berlin, Heidelberg 1987
- [597] J. Mehra und H. Rechenberg, *The historical Development of Quantum Theory, Part 6 / 2: The Probability Interpretation and the Statistical Transformation Theory, the Physical Interpretation, and the Empirical and Mathematical Foundations of Quantum Mechanics 1926-1932*, Springer, New York, Berlin, Heidelberg 2000
- [598] J. Mehra und H. Rechenberg, *The historical Development of Quantum Theory, Part 6 / 2: The Conceptual Completion and Extensions of Quantum Mechanics 1932-1941, Epilogue: Aspects of the Further Development of Quantum Theory 1942-1999*, Springer, New York, Berlin, Heidelberg 2001
- [599] A. Mertins, *Signaltheorie: Grundlagen der Signalbeschreibung, Filterbänke, Wavelets, Zeit-Frequenz-Analyse, Parameter- und Signalschätzung*, Vieweg + Teubner, Wiesbaden 2010
- [600] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, Wiley, New York 1998
- [601] E. Merzbacher und D. Park, *American Journal of Physics* **60**, 946, 1992
- [602] K. von Meyenn, *Quantenmechanik und Weimarer Republik*, Vieweg, Braunschweig 1994

- [603] K. von Meyenn, A. Hermann und V. F. Weisskopf (Hrsg.), *Wolfgang Pauli. Wissenschaftlicher Briefwechsel mit Bohr, Einstein, Heisenberg u. a., Band 1: 1919 - 1929*, Springer, New York, Berlin, Heidelberg 1979
- [604] K. von Meyenn, A. Hermann und V. F. Weisskopf (Hrsg.), *Wolfgang Pauli. Wissenschaftlicher Briefwechsel mit Bohr, Einstein, Heisenberg u. a., Band 2: 1930 - 1939*, Springer, New York, Berlin, Heidelberg 1985
- [605] K. M. Meyer-Abich, *Korrespondenz, Individualität und Komplementarität. Eine Studie zur Geistesgeschichte der Quantentheorie in den Beiträgen Niels Bohrs*, Steiner, Wiesbaden 1965
- [606] A. A. Michelson, *Philosophical Magazine* **31**, 338, 1891
- [607] A. A. Michelson, *Philosophical Magazine* **34**, 280, 1892
- [608] R. A. Millikan, *Philosophical Magazine* **19**, 209, 1910
- [609] R. A. Millikan, *Physical Review* **2**, 109, 1913
- [610] R. A. Millikan, *Physical Review* **2**, 122, 1913
- [611] R. A. Millikan, *Physikalische Zeitschrift* **17**, 217, 1916
- [612] R. A. Millikan, *Physical Review* **7**, 355, 1916
- [613] R. v. Mises, *Mathematische Zeitschrift* **4**, 1, 1919
- [614] R. v. Mises, *Mathematische Zeitschrift* **5**, 52, 1919
- [615] R. v. Mises, *Wahrscheinlichkeit, Statistik und Wahrheit*, Springer, Berlin 1936
- [616] P. Mittelstaedt, *Philosophische Probleme der modernen Physik*, Bibliographisches Institut, Zürich 1989
- [617] P. Mittelstaedt, *The Interpretation of Quantum Mechanics and the Measurement Process*, Cambridge University Press, Cambridge 1998
- [618] P. Mittelstaedt, *Physikalische Blätter* **56**, 65, 2000
- [619] I. M. Mladenov und G. L. Naber, *Geometry, Integrability and Quantization*, Coral Press, Sofia 2000
- [620] U. Mohrhoff, *International Journal of Quantum Information* **2**, 221, 2004
- [621] W. Moore, *Schrödinger, Life and Thought*, Cambridge University Press, Cambridge 1989

- [622] J. E. Moyal, Proceedings of the Cambridge Philosophical Society **45**, 99, 1949
- [623] H. Muckenfuß, Der Mathematische und Naturwissenschaftliche Unterricht **49**, 455, 1996
- [624] H. Muckenfuß, Plus Lucis 3/2000, 10
- [625] R. Müller, B. Schmincke und H. Wiesner, Physik in der Schule **34**, 165, 1996
- [626] R. Müller und H. Wiesner, Physik in der Schule **33**, 452, 1995
- [627] R. Müller und H. Wiesner, Physik in der Schule **35**, 176, 1997
- [628] R. Müller und H. Wiesner, Physik in der Schule **35**, 218, 1997
- [629] R. Müller und H. Wiesner, Physik in der Schule **35**, 380, 1997
- [630] R. Müller und H. Wiesner, Physik in der Schule **35**, 420, 1997
- [631] V. F. Müller, *Quantenmechanik*, Oldenbourg, München 2000
- [632] J. G. Muga, R. Sala Mayato und I. L. Egusquiza (Hrsg.), *Time in Quantum Mechanics*, Springer, Berlin 2002
- [633] F. A. Muller, Studies in History and Philosophy of Science Part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics **28**, 35, 1997
- [634] F. A. Muller, Studies in History and Philosophy of Science Part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics **28**, 219, 1997
- [635] F. A. Muller, *Structures for Everyone. Contemplations and Proofs in the Foundations and Philosophy of Physics and Mathematics*, A. Gerits & Son, Amsterdam 1998
- [636] F. A. Muller, Studies in History and Philosophy of Science Part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics **30**, 543, 1999
- [637] J. E. Nafe, E. B. Nelson und I. I. Rabi, Physical Review **71**, 914, 1947
- [638] E. Nagel, The Journal of Philosophy **42**, 437, 1945
- [639] E. Nagel, The Journal of Philosophy **43**, 247, 1946
- [640] O. Nairz, M. Arndt und A. Zeilinger, Journal of Modern Optics **47**, 2811, 2000
- [641] L. Natanson, Physikalische Zeitschrift **11**, 659, 1911
- [642] E. Nelson, Physical Review **150**, 1079, 1966

- [643] E. Nelson, *Dynamical Theories of Brownian Motion*, Princeton University Press, Princeton 1967
- [644] W. Nernst und F. A. Lindemann, Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin, 26, 1910
- [645] W. Nernst und F. A. Lindemann, Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin, 22, 1911
- [646] W. Nernst und F. A. Lindemann, Zeitschrift für Elektrochemie, 817, 1911
- [647] A. Neumaier, arXiv: quant-ph/0001011v2
- [648] A. Neumaier, arXiv: quant-ph/0706.0155v3
- [649] J. von Neumann, Nachrichten von der Gesellschaft für Wissenschaften zu Göttingen, 1, 1927
- [650] J. von Neumann, Nachrichten von der Gesellschaft für Wissenschaften zu Göttingen, 245, 1927
- [651] J. von Neumann, Nachrichten von der Gesellschaft für Wissenschaften zu Göttingen, 273, 1927
- [652] J. von Neumann, Mathematische Zeitschrift **27**, 669, 1928
- [653] J. von Neumann, Mathematische Annalen **102**, 49, 1929
- [654] J. von Neumann, Mathematische Annalen **104**, 570, 1931
- [655] J. von Neumann, *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, Berlin, Heidelberg, New York 1996
- [656] M. A. Nielsen und I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press, Cambridge 2002
- [657] M. M. Nieto, in [388], 175
- [658] K. V. Nikolskij, Uspekhi fizicheskikh nauk **5**, 537, 1936
- [659] A. M. Ostrowski, *Vorlesungen über Differential- und Integralrechnung*, Birkhäuser, Basel 1967
- [660] W. Ostwald, *Abhandlungen und Vorträge allgemeinen Inhalts*, Veit, Leipzig 1904
- [661] A. Pais, Reviews of Modern Physics **51**, 863, 1979
- [662] A. Pais, Physics Today 34, 12/1989

- [663] , J.-W. Pan, D. Bouwmeester, M. Daniell, H. Weinfurter und A. Zeilinger, *Nature* **403**, 515, 2000
- [664] F. Paschen, *Annalen der Physik* **50**, 901, 1916
- [665] F. Paschen und E. Back, *Physica* **1**, 261, 1921
- [666] W. Pauli, *Zeitschrift für Physik* **16**, 155, 1923
- [667] W. Pauli, *Naturwissenschaften* **12**, 741, 1924
- [668] W. Pauli, *Zeitschrift für Physik* **20**, 371, 1924
- [669] W. Pauli, *Die Naturwissenschaften* **12**, 741, 1924
- [670] W. Pauli, *Zeitschrift für Physik* **31**, 373, 1925
- [671] W. Pauli, *Zeitschrift für Physik* **31**, 765, 1925
- [672] W. Pauli, *Zeitschrift für Physik* **32**, 794, 1925
- [673] W. Pauli, *Zeitschrift für Physik* **36**, 336, 1926
- [674] W. Pauli, in [315], 1
- [675] W. Pauli, in [603], 348
- [676] W. Pauli, *Zeitschrift für Physik* **43**, 601, 1927
- [677] W. Pauli, Anmerkungen in *Zeitschrift für Physik* **41**, 81, 1927
- [678] W. Pauli, *Helvetica Physica Acta* **5**, 179, 1932
- [679] W. Pauli, in [316], 83
- [680] W. Pauli, in [604], 408
- [681] W. Pauli, *Physical Review* **58**, 716, 1940
- [682] W. Pauli, *Progress of Theoretical Physics* **5**, 526, 1950
- [683] W. Pauli, in [687], 30
- [684] W. Pauli, in [298], 1
- [685] W. Pauli und V. Weisskopf, *Helvetica Physica Acta* **7**, 709, 1934
- [686] W. Pauli und F. J. Belinfante, *Physica* **7**, 177, 1940

- [687] W. Pauli, L. Rosenfeld und V. Weisskopf (Hrsg.), *Niels Bohr and the Development of Physics. Essays dedicated to Niels Bohr on the Occasion of his Seventieth Birthday*, Mc Graw Hill, New York, London 1955
- [688] A. Perelomov, *Generalized Coherent States and their Applications*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1986
- [689] E. Pérez und T. Sauer, *Archive for History of Exact Sciences* **64**, 561, 2010
- [690] S. Perovic, *Integrated History and Philosophy of Science* **1**, 3658, 2007
- [691] K.-H. Peters, *Schönheit, Exaktheit, Wahrheit. Der Zusammenhang von Mathematik und Physik am Beispiel der Geschichte der Distributionen*, GNT-Verlag, Diepholz 2004
- [692] A. Petersen, *The Bulletin of the Atomic Scientists* **19**, 8, 1963
- [693] A.-T. Petit und P.-L. Dulong, *Annales de Chimie et de Physique* **10**, 395, 1819
- [694] T. E. Phipps und J. B. Taylor, *Physical Review* **29**, 309, 1927
- [695] C. Piron, *Foundations of Quantum Physics*, W. A. Benjamin, Reading 1976
- [696] T. Placek und J. Butterfield, *Non-locality and Modality*, Kluwer, Dordrecht 2002
- [697] M. Planck, *Annalen der Physik* **1**, 69, 1900
- [698] M. Planck, *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* **2**, 202, 1900
- [699] M. Planck, *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* **2**, 237, 1900
- [700] M. Planck, *Annalen der Physik* **4**, 553, 1901
- [701] M. Planck, *Annalen der Physik* **31**, 758, 1910
- [702] M. Planck, *Acht Vorlesungen über Theoretische Physik, gehalten an der Columbia University in the City of New York im Frühjahr 1909*, S. Hirzel, Leipzig 1910
- [703] M. Planck, *Physikalische Zeitschrift* **11**, 1186, 1910
- [704] M. Planck, *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* **17**, 407, 1915
- [705] M. Planck, *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* **17**, 438, 1915
- [706] M. Planck, *Annalen der Physik* **50**, 385, 1916
- [707] M. Planck, *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin*, 324, 1917
- [708] M. Planck, *Vorlesungen über Thermodynamik*, De Gruyter, Berlin, Leipzig 1922

- [709] M. Planck, Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin, 355, 1923
- [710] M. Planck, *Vorträge und Erinnerungen*, Wissenschaftliche Buchgesellschaft, Darmstadt 1973
- [711] E. Plaum, *Psychologie und Geschichte* **3**, 94, 1992
- [712] S. Poisson, *Journal de l'Ecole Polytechnique* **8**, 266, 1809
- [713] K. R. Popper, in [508], 65
- [714] K. R. Popper, *British Journal of the Philosophy of Science* **10**, 25, 1959
- [715] K. R. Popper, in [139], 7
- [716] K. R. Popper, *Logik der Forschung*, J. C. B. Mohr (Paul Siebeck), Tübingen 1994
- [717] K. R. Popper, *Eine Welt der Propensitäten*, J. C. B. Mohr (Paul Siebeck), Tübingen 1995
- [718] K. R. Popper, *Die Quantentheorie und das Schisma der Physik*, Mohr Siebeck, Tübingen 2001
- [719] T. Preston, *Philosophical Magazine* **45**, 325, 1898
- [720] A. K. Prodel und P. Kusch, *Physical Review* **88**, 184, 1952
- [721] E. M. Purcell, *Nature* **178**, 1449, 1956
- [722] C. R. Putnam, *Commutation Properties of Hilbert Space Operators and Related Topics*, Springer, New York 1967
- [723] Q. Rao und R. H. Xie, *Physica* **A 280**, 362, 2000
- [724] J. M. Rassias, *Journal of Inequalities in Pure and Applied Mathematics* **5**, Article 4, 2004
- [725] J. M. Rassias, *Journal of Inequalities in Pure and Applied Mathematics* **6**, Article 11, 2005
- [726] J. W. S. Rayleigh, *Philosophical Magazine* **49**, 539, 1900
- [727] J. W. S. Rayleigh, *Philosophical Magazine, Sixth Series* **22**, 225, 1911
- [728] J. W. S. Rayleigh, *Proceedings of the Royal Society (London)* **A 86**, 207, 1912
- [729] M. Rédei und S. J. Summers, *Studies in History and Philosophy of Science, Part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics* **38**, 390, 2007

- [730] M. Redhead, *Incompleteness, Nonlocality, and Realism. A Prolegomenon to the Philosophy of Quantum Mechanics*, Clarendon, Oxford 1992
- [731] H. Reichenbach, *The Journal of Philosophy* **43**, 239, 1946
- [732] H. Reichenbach, *Philosophische Grundlagen der Quantenmechanik*, Birkhäuser, Basel 1949
- [733] O. W. Richardson, *Philosophical Magazine* **23**, 594, 1912
- [734] O. W. Richardson, *Philosophical Magazine* **24**, 570, 1912
- [735] F. Riesz, *Comptes Rendues de l'Académie des sciences* **144**, 615, 1907
- [736] J. E. Roberts, *Journal of Mathematical Physics* **7**, 1097, 1966
- [737] J. E. Roberts, *Communications in Mathematical Physics* **3**, 98, 1966
- [738] H. P. Robertson, *Physical Review* **34**, 163, 1929
- [739] H. P. Robertson, *Physical Review* **46**, 794, 1934
- [740] H. Römer, *Theoretical Optics*, Wiley-VCH, Weinheim 2005
- [741] R. Römer und T. Filk, *Statistische Mechanik*, Wiley-VCH, Weinheim 1994
- [742] U. Röseberg, *Quantenmechanik und Philosophie*, Akademie-Verlag, Berlin 1978
- [743] U. Röseberg, *Szenarium einer Revolution. Nichtrelativistische Quantenmechanik und philosophische Widerspruchsproblematik*, Akademie-Verlag, Berlin 1984
- [744] H. Rubens und F. Kurlbaum, *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin*, 929, 1900
- [745] E. Rubin, *Visuell wahrgenommene Figuren*, Gyldendalske, Kopenhagen 1921
- [746] E. Rubin, *Experimenta psychologica*, Miunksgaard, Kopenhagen 1949
- [747] S. I. Rubinov und J. B. Keller, *Physical Review* **131**, 2789
- [748] J. Rudnick und D. S. Tannhauser, *American Journal of Physics* **44**, 796, 1976
- [749] C. Runge, *Report of the British Association for the Advancement of Science*, 576, 1888
- [750] C. Runge, *Report of the British Association for the Advancement of Science*, 577, 1888
- [751] C. Runge, *Vektoranalysis. Band I: Die Vektoranalysis des dreidimensionalen Raumes*, Hirzel, Leipzig 1919

- [752] C. Runge und F. Paschen, Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin, 639, 1895
- [753] C. Runge und F. Paschen, Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin, 759, 1895
- [754] C. Runge und F. Paschen, *Astrophysical Journal* **3**, 4, 1896
- [755] C. Runge und F. Paschen, *Annalen der Physik und Chemie* **61**, 641, 1897
- [756] C. Runge und F. Paschen, *Astrophysical Journal* **8**, 70, 1898
- [757] C. Runge und F. Paschen, *Astrophysical Journal* **15**, 235, 1902
- [758] C. Runge und F. Paschen, *Astrophysical Journal* **15**, 333, 1902
- [759] C. Runge und F. Paschen, *Astrophysical Journal* **16**, 123, 1902
- [760] H. R. Russell und F. A. Saunders, *Astrophysical Journal* **61**, 38, 1925
- [761] E. Rutherford, *Philosophical Magazine* **21**, 669, 1911
- [762] T. S. Santhaman, in [362]
- [763] S. Saunders, *Proceedings of the Royal Society (London)* **A 460**, 1771, 2004
- [764] S. Saunders, J. Barrett, A. Kent und D. Wallace (Hrsg.), *Many Worlds? Everett, Quantum Theory, & Reality*, Oxford University Press, Oxford, New York 2010
- [765] F. Scheck, *Mechanik. Von den Newtonschen Gesetzen zum deterministischen Chaos*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1994
- [766] E. Scheibe, in [22], 157
- [767] E. Scheibe, *Die Philosophie der Physiker*, C. H. Beck, München 2007
- [768] E. Schering, *Göttinger Abhandlungen* **18**, 3, 1873
- [769] P. A. Schilpp, *Albert Einstein: Philosopher-Scientist*, Open Court, La Salle 2000
- [770] W. P. Schleich und H. Walther (Hrsg.), *Elements of Quantum Information*, Wiley-VCH, Weinheim 2007
- [771] M. Schlosshauer, *Reviews of Modern Physics* **76**, 1267, 2004
- [772] M. Schlosshauer, *Annals of Physics* **321**, 112, 2006
- [773] M. Schlosshauer, *Decoherence and the Quantum-To-Classical Transition*, Springer, Berlin, Heidelberg 2007

- [774] M. Schlosshauer, *Foundations of Physics* **38**, 796, 2008
- [775] M. Schlosshauer, *Nature* **453**, 39, 2008
- [776] M. Schlosshauer und A. Fine, *Foundations of Physics* **35**, 197, 2005
- [777] M. Schlosshauer und K. Camilleri, arXiv: quant-ph/0804.1609v
- [778] M. Schlosshauer und K. Camilleri, in [460], 26
- [779] W. Schommers (Hrsg.), *Quantum Theory and Pictures of Reality. Foundations, Interpretations, and New Aspects*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1989
- [780] W. Schommers, in [779], 1
- [781] W. Schommers, in [779], 217
- [782] E. Schrödinger, *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin*, 434, 1925
- [783] E. Schrödinger, *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin*, 23, 1926
- [784] E. Schrödinger, *Physikalische Zeitschrift* **27**, 95, 1926
- [785] E. Schrödinger, *Annalen der Physik* **79**, 361, 1926
- [786] E. Schrödinger, *Annalen der Physik* **79**, 489, 1926
- [787] E. Schrödinger, *Annalen der Physik* **79**, 734, 1926
- [788] E. Schrödinger, *Annalen der Physik* **80**, 437, 1926
- [789] E. Schrödinger, *Annalen der Physik* **81**, 109, 1926
- [790] E. Schrödinger, *Die Naturwissenschaften* **14**, 664, 1926
- [791] E. Schrödinger, *Annalen der Physik* **28**, 257, 1927
- [792] E. Schrödinger, *Abhandlungen zur Wellenmechanik*, Johann Ambrosius Barth, Leipzig 1928
- [793] E. Schrödinger, *Abhandlungen der Preußischen Akademie der Wissenschaften, Physikalisch-Mathematische Klasse* **19**, 296, 1930
- [794] D. Schroerer, *Physik verändert die Welt? Die gesellschaftliche Dimension der Naturwissenschaft*, Vieweg, Braunschweig, Wiesbaden 1984
- [795] T. Schürmann, *Acta Physica Polonica B* **39**, 587, 2008

- [796] A. A. Schupp, R. W. Pidd und H. R. Crane, *Physical Review* **121**, 1, 1961
- [797] L. Schwartz, *Annals de l' Université de Grenoble* **21**, 57, 1945
- [798] L. Schwartz, *Théorie des Distributions. Tome I*, Hermann, Paris 1957
- [799] L. Schwartz, *Théorie des Distributions. Tome II*, Hermann, Paris 1959
- [800] K. Schwarzschild, *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin* **25**, 548, 1916
- [801] J. Schwinger, *Physical Review* **73**, 416, 1948
- [802] J. Schwinger, *Physical Review* **82**, 914, 1951
- [803] J. Schwinger, *Physical Review* **91**, 713, 1953
- [804] J. Schwinger, *Proceedings of the National Academy of Sciences U.S.A.* **46**, 570, 1960
- [805] M. O. Scully, B.-G. Englert und H. Walther, *Nature* **351**, 111, 1991
- [806] F. Selleri, *Die Debatte um die Quantentheorie*, Vieweg, Braunschweig 1990
- [807] F. Selleri, *Quantum Paradoxes and Physical Reality*, Kluwer, Dordrecht, Boston, London 1990
- [808] D. Sen, *Pramana - Journal of Physics* **72**, 765, 2009
- [809] D. Sen, A. N. Basu and S. Sengupta, *Helvetica Physica Acta* **67**, 785, 1994
- [810] A. Shafiee, F. Safinejad und F. Naqsh, *Foundations of Physics Letters* **19**, 1, 2006
- [811] M. H. Shamos (Hrsg.), *Great Experiments in Physics: Firsthand Accounts from Galileo to Einstein*, Dover, New York 1987
- [812] A. Shapere und F. Wilczek (Hrsg.), *Geometric Phases in Physics*, World Scientific, Singapore 1989
- [813] U. Sinha, C. Couteau, T. Jennewein, R. Laflamme und G. Weihs, *Science* **329**, 418, 2010
- [814] J. E. Sipe, *Physical Review A* **52**, 1875, 1995
- [815] L. Sklar, *Philosophy of Physics*, Oxford University Press, Oxford 1995
- [816] J. C. Slater, *Physical Review* **34**, 1293, 1929
- [817] J. D. Sneed, *Synthese* **21**, 34, 1970

- [818] S. L. Sobolev, *Matematicheskii Sbornik (Novaya Serie)* **1**, 39, 1936
- [819] S. L. Sobolev, *Matematicheskii Sbornik (Novaya Serie)* **4**, 471, 1938
- [820] A. Sommerfeld, *Physikalische Zeitschrift* **12**, 1057, 1911
- [821] A. Sommerfeld, *Jahresberichte der Deutschen Mathematiker Vereinigung* **21**, 309, 1912
- [822] A. Sommerfeld, *Sitzungsberichte der Bayerischen Akademie der Wissenschaften*, 425, 1915
- [823] A. Sommerfeld, *Sitzungsberichte der Bayerischen Akademie der Wissenschaften*, 459, 1915
- [824] A. Sommerfeld, *Annalen der Physik* **51**, 1, 1916
- [825] A. Sommerfeld, *Annalen der Physik* **51**, 125, 1916
- [826] A. Sommerfeld, *Physikalische Zeitschrift* **17**, 491, 1916
- [827] A. Sommerfeld, *Atombau und Spektrallinien, Band 1*, Harri Deutsch, Thun, Frankfurt am Main 1978
- [828] A. Sommerfeld, *Atombau und Spektrallinien, Band 2*, Harri Deutsch, Thun, Frankfurt am Main 1978
- [829] A. Sommerfeld, *Vorlesungen über theoretische Physik. Band III: Elektrodynamik*, Harri Deutsch, Thun, Frankfurt am Main 1988
- [830] A. Sommerfeld, *Vorlesungen über theoretische Physik. Band V: Thermodynamik und Statistik*, Harri Deutsch, Thun, Frankfurt am Main 1988
- [831] A. Sommerfeld, *Vorlesungen über theoretische Physik. Band VI: Partielle Differentialgleichungen in der Physik*, Harri Deutsch, Thun, Frankfurt am Main 1992
- [832] J. Stark, *Physikalische Zeitschrift* **10**, 902, 1909
- [833] J. Stark, *Annalen der Physik* **43**, 965, 1914
- [834] J. Stefan, *Sitzungsberichte der mathematisch-naturwissenschaftlichen Classe der Kaiserlichen Akademie der Wissenschaften in Wien* **79**, 391, 1879
- [835] W. Stegmüller, *Probleme und Resultate der Wissenschaftstheorie und Analytischen Philosophie. Band I: Wissenschaftliche Erklärung und Begründung*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1974
- [836] W. Stegmüller, *Probleme und Resultate der Wissenschaftstheorie und Analytischen Philosophie. Band II: Theorie und Erfahrung*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1970

- [837] W. Stegmüller, *Probleme und Resultate der Wissenschaftstheorie und Analytischen Philosophie. Band IV: Personelle und Statistische Wahrscheinlichkeit*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1973
- [838] N. Straumann, arXiv: physics/0010003v1
- [839] N. Straumann, arXiv: quant-ph/0110097v1
- [840] R. F. Streater, *Journal of Mathematical Physics* **41**, 3556, 2000
- [841] R. F. Streater, *Lost Causes in and beyond Physics*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 2007
- [842] R. F. Streater und A. S. Wightman, *PCT, Spin and Statistics, and all that*, Princeton University Press, Princeton, Oxford 2000
- [843] J. Strnad, *European Journal of Physics* **7**, 217, 1986
- [844] I. Strohmeyer, *Quantentheorie und Transzendentalphilosophie*, Spektrum, Heidelberg, Berlin, Oxford 1995
- [845] R. H. Stuewer, *Acta Physica Polonica* **37**, 543, 2006
- [846] H. Stumpf und W. Schuler, *Elektrodynamik*, Vieweg, Braunschweig 1973
- [847] D. F. Styer et al., *American Journal of Physics* **70**, 288, 2002
- [848] M. Suárez, M. Dorato und M. Rédei (Hrsg.), *EPSA Philosophical Issues of the Sciences. Launch of the European Philosophy of Science Association*, Springer, Dordrecht, Heidelberg, London, New York 2010
- [849] E. C. G. Sudarshan und T. Rothmann, *American Journal of Physics* **59**, 592, 1991
- [850] P. Suppes, *Philosophy of Science* **28**, 378, 1961
- [851] P. Suppes, *Philosophy of Science. The Delaware Seminar*, Wiley, New York 1963
- [852] P. Suppes, in [4], 364
- [853] P. Suppes, *Philosophy of Science* **33**, 14, 1966
- [854] P. Suppes (Hrsg.), *Logic and Probability in Quantum Mechanics*, Reidel, Dordrecht 1975
- [855] P. Suppes, *Probabilistic Metaphysics*, Blackwell, Oxford, New York 1985
- [856] P. Suppes, *Representation and Invariance of Scientific Structures*, CSLI Publications, Stanford 2002

- [857] P. Suppes, *Philosophical Studies* **147**, 89, 2010
- [858] P. Suppes und M. Zanotti, *Synthese* **29**, 311, 1974, abgedruckt in [854], 303
- [859] P. Suppes und M. Zanotti, *Foundations of Physics Letters* **4**, 101, 1991
- [860] H. Taub und P. Kusch, *Physical Review* **75**, 1481, 1949
- [861] M. Tegmark, *Foundations of Physics Letters* **6**, 571, 1993
- [862] H. Tetens, *Bewegungsformen und ihre Realisierungen. Wissenschaftstheoretische Untersuchungen zu einer technorientierten Rekonstruktion der klassischen Mechanik*, Dissertation, Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen 1977
- [863] H. Tetens, in [38], 239
- [864] H. Tetens, *Zeitschrift für allgemeine Wissenschaftstheorie* **13**, 70, 1982
- [865] H. Tetens, *Zeitschrift für allgemeine Wissenschaftstheorie* **15**, 142, 1984
- [866] H. Tetens, *Zeitschrift für allgemeine Wissenschaftstheorie* **17**, 96, 1986
- [867] H. Tetens, *Experimentelle Erfahrung*, Felix Meiner, Hamburg 1987
- [868] M. Thiesen, *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* **2**, 66, 1900
- [869] W. Thirring, *Lehrbuch der Mathematischen Physik. Band 1: Klassische Dynamische Systeme*, Springer, Wien, New York 1988
- [870] W. Thirring, *Lehrbuch der Mathematischen Physik. Band 3: Quantenmechanik von Atomen und Molekülen*, Springer, Wien, New York 1994
- [871] W. Thomas, *Die Naturwissenschaften* **13**, 627, 1925
- [872] G. P. Thomson, *Nature* **120**, 802, 1927
- [873] G. P. Thomson, *Proceedings of the Royal Society (London)* **A 117**, 600, 1928
- [874] J. J. Thomson, *Philosophical Magazine* **44**, 293, 1897
- [875] J. J. Thomson, *Philosophical Magazine* **48**, 547, 1899
- [876] J. J. Thomson, *Philosophical Magazine* **7**, 237, 1904
- [877] B. Thüring, *Die Gravitation und die philosophischen Grundlagen der Physik*, Duncker & Humblot, Berlin 1967
- [878] B. Thüring, *Einführung in die Protophysik der Welle. Kymometrie*, Duncker & Humblot, Berlin 1978

- [879] B. Thüring, *Methodische Kosmologie. Alternativen zur Expansion des Weltalls und zum Urknall*, H.-A. Herchen Verlag, Frankfurt am Main 1985
- [880] P. A. Tipler, *Physik*, Spektrum, Heidelberg, Berlin, Oxford 1995
- [881] D. A. Trifonov, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **30**, 5941, 1997
- [882] D. A. Trifonov, *Physica Scripta* **58**, 246, 1998
- [883] D. A. Trifonov, *Journal of the Optical Society of America A* **17**, 2486, 2000
- [884] D. A. Trifonov, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **33**, L296, 2000
- [885] D. A. Trifonov, in [619], 257
- [886] D. A. Trifonov, *Physics World* **24**, 107, 2001
- [887] D. A. Trifonov, *European Physical Journal B* **29**, 349, 2002
- [888] D. A. Trifonov und S. G. Donev, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **31**, 8041, 1988
- [889] A. C. de la Torre, P. Catuogno und S. Ferrando, *Foundations of Physics Letters* **2**, 235, 1989
- [890] G. E. Uhlenbeck und S. Goudsmit, *Naturwissenschaften* **47**, 953, 1925
- [891] G. E. Uhlenbeck und S. Goudsmit, *Nature* **117**, 264, 1926
- [892] S. Varró, *Fluctuation and Noise Letters* **6**, R11, 2006
- [893] J. Verhulst, *Der Glanz von Kopenhagen. Geistige Perspektiven der modernen Physik*, Verlag freies Geistesleben, Stuttgart 1994
- [894] J. H. van Vleck, *Physical Review* **24**, 330, 1924
- [895] J. H. van Vleck, *Quantum Principles and Line Spectra*, National Research Council, Washington 1926
- [896] V. Varadarajan, *Communications on Pure and Applied Mathematics* **15**, 189, 1962, abgedruckt in [443], 171
- [897] M. Vogt, *Neue Wege in der Schulphysik? Ein Beitrag zur Kritik aktueller Entwicklungen in der Physikdidaktik*, Cuvillier, Göttingen 2010
- [898] B. L. van der Waerden (Hrsg.), *Sources of Quantum Mechanics*, Dover, New York 1967
- [899] B. L. van der Waerden, in [589], 276

- [900] M. Wagenschein, *Die Pädagogische Dimension der Physik*, Westermann, Braunschweig 1976
- [901] M. Wagenschein, *Scheidewege* 1/1976, 76
- [902] S. Waldmann, *Poisson-Geometrie und Deformationsquantisierung. Eine Einführung*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 2007
- [903] D. F. Walls, *Nature* **306**, 141, 1983
- [904] D. F. Walls und G. F. Millburn, *Quantum Optics*, Springer, Berlin, Heidelberg 2008
- [905] W. Walter, *Einführung in die Theorie der Distributionen*, B. I. Wissenschaftsverlag, Mannheim, Leipzig, Wien, Zürich 1994
- [906] P. Weingartner (Hrsg.), *Deskription, Analytizität und Existenz. Drittes und viertes Forschungsgespräch des Forschungszentrums Salzburg*, Anton Pustet, Salzburg, München 1966
- [907] W. Weizel, *Zeitschrift für Physik* **134**, 264, 1953
- [908] W. Weizel, *Zeitschrift für Physik* **135**, 270, 1953
- [909] W. Weizel, *Zeitschrift für Physik* **1236**, 582, 1954
- [910] C. F. von Weizsäcker, *Zum Weltbild der Physik*, Hirzel, Stuttgart 1990
- [911] C. F. von Weizsäcker, *Aufbau der Physik*, Deutscher Taschenbuch-Verlag, München 1994
- [912] C. F. von Weizsäcker, *Die Einheit der Natur*, Deutscher Taschenbuch-Verlag, München 1995
- [913] C. F. von Weizsäcker, *Zeit und Wissen*, Deutscher Taschenbuch-Verlag, München 1995
- [914] H. J. Wendel, *Moderner Relativismus*, Mohr Siebeck, Tübingen 1990
- [915] H. J. Wendel, *Die Grenzen des Naturalismus*, Mohr Siebeck, Tübingen 1997
- [916] G. Wentzel, *Zeitschrift für Physik* **22**, 193, 1924
- [917] G. Wentzel, *Zeitschrift für Physik* **27**, 257, 1924
- [918] G. Wentzel, *Zeitschrift für Physik* **29**, 306
- [919] G. Wentzel, *Zeitschrift für Physik* **38**, 518, 1926
- [920] G. Wentzel, *Zeitschrift für Physik* **40**, 574, 1926

- [921] G. Wentzel, *Zeitschrift für Physik* **40**, 590, 1926
- [922] G. Wentzel, *Zeitschrift für Physik* **41**, 828, 1927
- [923] H. Weyl, *Gruppentheorie und Quantenmechanik*, Wissenschaftliche Buchgesellschaft, Darmstadt 1981
- [924] J. A. Wheeler und W. H. Zurek (Hrsg.), *Quantum Theory and Measurement*, Princeton University Press, Princeton 1983
- [925] A. Whitaker, *Einstein, Bohr and the Quantum Dilemma*, Cambridge University Press, Cambridge 1996
- [926] D. Wick, *The Infamous Boundary: Seven Decades of Controversy in Quantum Physics*, Birkhäuser, Boston, Basel, Berlin 1995
- [927] W. Wien, *Sitzungsberichte der königlichen Akademie der Wissenschaften zu Berlin*, 55, 1893
- [928] W. Wien, *Annalen der Physik* **52**, 132, 1894
- [929] W. Wien, *Annalen der Physik* **58**, 662, 1896
- [930] W. Wien, *Vorlesungen über neuere Probleme der theoretischen Physik. Gehalten an der Columbia-University in New York*, Teubner, Leipzig, Berlin 1913
- [931] W. Wien und O. Lummer, *Annalen der Physik und Chemie* **56**, 451, 1895
- [932] H. Wiesner und R. Müller, *Physik in der Schule* **34**, 343, 1996
- [933] H. Wiesner und R. Müller, *Physik in der Schule* **34**, 379, 1996
- [934] E. P. Wigner, *American Journal of Physics* **31**, 6, 1963
- [935] W. Wilson, *Philosophical Magazine* **29**, 795, 1915
- [936] A. Wintner, *Spektraltheorie der unendlichen Matrizen. Einführung in den analytischen Apparat der Quantenmechanik*, Hirzel, Leipzig 1929
- [937] R. A. Young, *American Journal of Physics* **44**, 1043, 1976
- [938] T. Young, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* **92**, 387, 1802
- [939] T. Young, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* **94**, 1, 1804, abgedruckt in [811], 96
- [940] A. Zannoni, arXiv: cond-mat/9912229v1
- [941] P. Zeeman, *Philosophical Magazine* **43**, 226, 1897

- [942] P. Zeeman, *Philosophical Magazine* **44**, 55, 1897
- [943] P. Zeeman, *Nature* **55**, 347
- [944] H. D. Zeh, *Foundations of Physics* **1**, 69, 1970
- [945] H. D. Zeh, *Spektrum der Wissenschaft* 4/2001, 72
- [946] H. D. Zeh, in [475], 7
- [947] H. D. Zeh, in [40], 103
- [948] H. D. Zeh, in [355], 786
- [949] H. D. Zeh, Internet-Publikation, <http://www.rzuser.uni-heidelberg.de/~as3/WieVieleWelten.pdf>
- [950] H. D. Zeh, Internet-Publikation, <http://www.rzuser.uni-heidelberg.de/~as3/Realitaet.pdf>
- [951] H. D. Zeh, Internet-Publikation, <http://www.rzuser.uni-heidelberg.de/~as3/VieleWelten.pdf>
- [952] E. Zeidler, *Quantum Field Theory II: Quantum Electrodynamics*, Springer, Berlin, Heidelberg 2009
- [953] A. Zeilinger, *Foundation of Physics* **29**, 631, 1999
- [954] A. Zeilinger, in [59], 241
- [955] A. Zeilinger, *Einsteins Schleier. Die neue Welt der Quantenphysik*, Goldmann, München 2005
- [956] A. Zeilinger, *Einsteins Spuk. Teleportation und weitere Mysterien der Quantenphysik*, Goldmann, München 2007
- [957] W. H. Zurek, *Physical Review D* **24**, 1516, 1981
- [958] W. H. Zurek, *Physical Review D* **26**, 1862
- [959] W. H. Zurek, *Physics Today* **44**, 36, 1991
- [960] W. H. Zurek, *Review of Modern Physics* **75**, 715
- [961] W. H. Zurek, *Physical Review A* **71**, 052105, 2005
- [962] G. Zukav, *Die tanzenden Wu Li Meister. Der östliche Pfad zum Verständnis der modernen Physik: Vom Quantensprung zum schwarzen Loch*, Rowohlt, Reinbek 2000





