

1 Einführung

Es gibt wohl kaum einen Zweig der Naturwissenschaften, der heutzutage so erfolgreich ist wie die Quantenmechanik. Mittels numerischer Lösungen ihrer Grundgleichung kann man neben der Stabilität von Atomen, Molekülen oder Festkörpern auch deren chemische und physikalische Eigenschaften bestimmen. Viele Bereiche der Industrie, wie Halbleiterproduktion oder Chemieindustrie, sind heute auf diese Simulationen angewiesen. Es scheint absehbar, dass man in Zukunft auch komplexe chemische Reaktionen im Computer nachstellen kann. In der Medizin wäre die bekannte Kernspintomographie (MRT) ohne Quantenmechanik nicht möglich gewesen. Und mit dem Fortschreiten der Nanotechnologie werden die Ergebnisse dieser Theorie auch weiter in unser Leben Einzug halten.

All diese Erfolge stehen in bemerkenswertem Gegensatz zur „offiziellen“ Interpretation der Quantenmechanik, die in immer breiterem Umfang Unverständnis durch mysteriöse Anschauungen ersetzt. Die drei bekanntesten Beispiele sind dem Leser vermutlich bereits mehrfach begegnet: das Universum spalte sich pausenlos in Paralleluniversen auf (Viele-Welten-Theorie), eine Katze sei gleichzeitig tot und lebendig – solange niemand sie betrachtet (Schrödingers Katze), ein Quant sei gleichzeitig Welle und Teilchen – obgleich es in Experimenten immer nur eine dieser beiden „Eigenschaften“ zeige (Welle-Teilchen-Dualismus). In diesem Zusammenhang empfinden wir es als besonders erschreckend, dass ein Großteil der Experten auf diesem Gebiet gar nicht nach rationalen Erklärungen sucht, sondern sich mittels einer abstrus anmutenden Logik mit einem Mantel des Geheimnisvollen umgibt. Entstandene Glaubenssätze in diesem Weltbild werden einer Religion gleich von Generation zu Generation weitergegeben und dürfen nicht hinterfragt werden.

Ungeachtet solcher Dogmen präsentieren wir in diesem Buch ein konsistentes und verständliches Modell. Dazu wollen wir zunächst kurz zurück zu den Anfängen der Quantenmechanik gehen, um zu sehen, woher die heutigen Verständnisprobleme rühren.

Allgemein wird die Aufstellung des **Planckschen Strahlungsgesetzes** im Jahr 1900 als die Geburtsstunde der Quantenmechanik angesehen. Für die theoretische Herleitung dieses Gesetzes musste Planck von der Annahme ausgehen, dass elektromagnetische Energie nicht in kontinuierlicher Form abgestrahlt wird, sondern in Form „unteilbarer Energieelemente“, den sogenannten **Quanten**.

Daraus folgend entwickelte Bohr 1913 das nach ihm benannte **Atommodell**, das 1915/16 von Sommerfeld noch verfeinert wurde und welches die 1885 entdeckte Linienstruktur für die Lichtabstrahlung des Wasserstoff-Atoms erklärt. Grundlegend ist in diesem Modell, dass sich Elektronen auf festen Bahnen bewegen und Energie nur durch Wechsel zwischen diesen Bahnen abgegeben bzw. aufgenommen werden kann. Ein noch heute verwendeter irreführender Begriff geht sicher schon auf diese Zeit zurück: die sogenannten **Quantensprünge** der Elektronen zwischen zwei

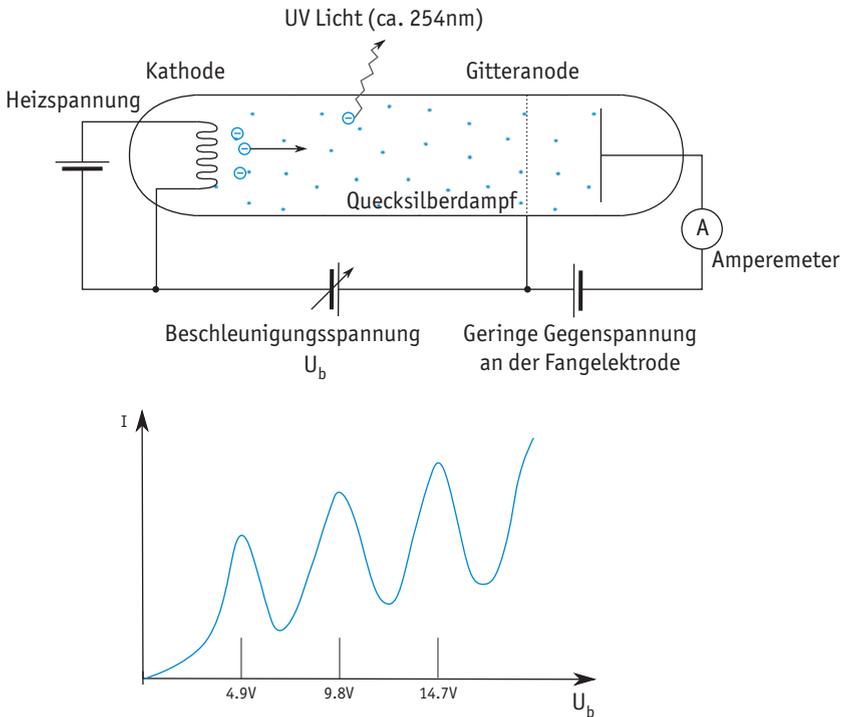


Abb. 1.1:

Versuchsaufbau zum Franck-Hertz-Experiment und Verlauf der Messkurve (die Stromstärke ist dabei in willkürlichen Einheiten der Größe Ampere aufgetragen)

Zuständen bei Anregung oder Abgabe von Energie. Ein prominentes Beispiel hierfür ist der viel beachtete Artikel aus der Arbeitsgruppe des Nobelpreisträgers Hans Dehmelt aus dem Jahr 1986 [1]. Die Autoren zeigen hier u. a. die Veränderungen im Zeitverlauf der Emissionsintensität eines Barium-Ions, dessen Beleuchtung aus verschiedenen Quellen variiert wird. Tatsächlich treten in diesem Zeitverlauf scheinbar abrupte Änderungen auf – aber auf einer Zeitskala der Einheitslänge 20 s! Wir berechnen später mit einem einfachen Ansatz Übergangszeiten in der Größenordnung von 10^{-9} s, also weit von einem Sprung entfernt.

Der **Franck-Hertz-Versuch** von 1914 bestätigte experimentell die portionsweise Aufnahme bzw. Abgabe von Energie. In diesem Versuch werden Elektronen in einem mit Quecksilberdampf gefüllten Glaszylinder durch ein elektrisches Feld beschleunigt (Abbildung 1.1). Man misst nun den elektrischen Strom im Vergleich zur Beschleunigungsspannung. Dabei nimmt die Stromstärke bei steigender Spannung zunächst zwar wie erwartet zu, bei bestimmten Werten der Spannung bricht sie dann aber plötzlich ein (bei Quecksilber bei Vielfachen von ca. 4,9 eV). Der Einbruch

der Stromstärke wird damit erklärt, dass durch inelastische Stöße des einfliegenden Elektrons ein Hüllenelektron des Quecksilbers auf das erste angeregte Niveau gehoben wird. Tatsächlich konnten Franck und Hertz denn auch eine Spektrallinie bei genau dieser Energie beobachten, die das angeregte Quecksilberatom bei der Rückkehr in den Grundzustand emittiert.

Zum prinzipiellen Verständnis der quantisierten Energieaufnahme bzw. -abgabe reicht das Bohr-Sommerfeldsche Atommodell völlig aus, man muss dazu kein neues abstraktes Weltbild erschaffen. Trotzdem scheint schon dieses einfache Modell in vielen Punkten der klassischen Physik zu widersprechen. So sollte nach der klassischen Elektrodynamik eine beschleunigte Ladung, wie sie ein Elektron bei seiner Bewegung um den Atomkern darstellt, Energie abstrahlen und damit in den Atomkern stürzen. Dieses Verhalten kennen wir heute unter anderem als Synchrotron-Strahlung von Elektronen-Kreisbeschleunigern. Das Postulat der stabilen Bahnen im Atom erklärt diesen Widerspruch nicht, sondern umgeht ihn durch eine Festlegung. Genausowenig ist klar, woher überhaupt die *spezifischen* stabilen Bahnen der Elektronen stammen.

Wenn also die bisher diskutierten Effekte keine grundsätzlich neue, von den klassischen Vorstellungen abweichende Sichtweise, sondern nur deren Ergänzung in irgendeiner Form notwendig zu machen schienen: Woher resultieren dann die Interpretationsprobleme in der Quantenmechanik? Wie kam man auf die Idee, dass Elektronen etwas anderes als kleine Teilchen sind, die sich auf definierten Bahnen bewegen?

Hierzu haben vor allem zwei Ideen entscheidend beigetragen, die im wesentlichen zu Anfang des 20. Jahrhunderts formuliert wurden.

So war man bis dahin zu der Überzeugung gelangt, dass Licht Welleneigenschaften besitzt und durch entsprechende Gleichungen, die Maxwell-Gleichungen der Elektrodynamik, beschrieben wird. Mit Einsteins Erklärung des **Photoelektrischen Effekts**, für den er 1921 den Nobelpreis bekam, wurde es aber notwendig, Licht auch als Teilchen (Photonen) zu begreifen.

Auf der anderen Seite betrachtete man viele kleine Objekte, wie zum Beispiel Elektronen, als massive Teilchen. In einem Umkehrschluss aus der Interpretation des Photoelektrischen Effekts schien nun die Frage erlaubt, ob klassische Teilchen nicht auch Welleneigenschaften besitzen können. Entsprechend stellte de Broglie 1924 seine Theorie der **Materiewellen** auf und lieferte eine Formel zur Berechnung der Wellenlänge beliebiger Teilchen mit einem vorgegebenen Impuls.

In Experimenten Mitte der 1920er Jahre zeigten dann zum einen Davisson und Germer und zum anderen Thomson, dass Elektronen beim Beschuss eines Kristalls Beugungsmuster erzeugen. Diese Beugungsmuster wiederum sind typisch für Interferenzmuster bei Wellen. De Broglies Theorie schien bestätigt.

Damit verfestigte sich die bis heute immer noch beliebte Idee des sogenannten **Welle-Teilchen-Dualismus**. Diese besagt, dass sich manche Objekte entweder als Wellen oder als Teilchen beschreiben lassen – und zwar abhängig vom Experiment bzw. Messverfahren. Obwohl diese Idee viele Widersprüche aufweist und mittlerweile in der wissenschaftlichen Literatur weniger Aufmerksamkeit erfährt, rechnet man in manchen Schulen weiterhin fleißig die Wellenlänge von makroskopischen Gegenständen aus.

Der Durchbruch zu einer Theorie der Wellenmechanik gelang 1926 Erwin Schrödinger, der an de Broglies Idee anknüpfte und über gewisse Analogieschlüsse zur Aufstellung einer fundamentalen Bewegungsgleichung gelangte, die später nach ihm **Schrödinger-Gleichung** benannt wurde. Im Gegensatz zur Wellengleichung der Elektrodynamik, die aus den Maxwell'schen Gleichungen folgt, also aus einer tieferliegenden Ebene elementarer Phänomene begründet werden kann, schien dies bei der Schrödinger-Gleichung nicht möglich zu sein. Sie ist nach heutiger Lehrmeinung als Postulat anzusehen. Der durchschlagende Erfolg der Schrödinger-Gleichung lag dabei zunächst in der verblüffend genauen Berechnung des optischen Wasserstoff-Spektrums.

Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung sind die sogenannten **Wellenfunktionen**. Die durch Max Born 1926 formulierte „statistische Interpretation“ der Quantenmechanik führte zu der akzeptierten Einsicht, dass das Absolutquadrat dieser Funktionen eine **Wahrscheinlichkeitsdichte** beschreibt. Während dieser Begriff eine verständliche Interpretation von der Wahrscheinlichkeit des Auffindens eines Teilchens in einem bestimmten Volumen nahelegt, wird dies in der aktuellen Sichtweise seltsamerweise stets vermieden. Man dürfe sich die Teilchen eben nicht als feste Objekte vorstellen. Eventuell könne man sich die Dichte vielleicht noch als eine Art „Verschmierung“ des Teilchens denken.

Durch mehr oder weniger wissenschaftliches Erraten wurde gefunden, wie man aus der Wellenfunktion weitere Eigenschaften ermitteln kann, beispielsweise die Energie der Teilchen. Dazu werden hermitesche Operatoren mit sogenannten „Observablen“, also beobachtbaren Größen, identifiziert. Der Erwartungswert eines solchen Operators gibt dann den entsprechenden „messbaren“ numerischen Wert an. Diese Methode wurde als **Korrespondenzprinzip** im Laufe der Zeit in den Stand einer grundlegenden physikalischen Theorie erhoben. Geflissentlich wird unterschlagen, dass einige Observablen tatsächlich *nicht* beobachtbar bzw. messbar sind. Beispielsweise kann man die Energie eines Elektrons im Wasserstoff-Atom nicht direkt messen, sondern nur die Energieunterschiede in Form von Linienspektren ausgesandten Lichts, die dazu eine natürliche Linienbreite aufweisen. Ganz abgesehen davon, dass der Grundzustand eines jedweden Systems überhaupt nicht gemessen werden kann! Umgekehrt lässt sich dem durchaus sehr gut messbaren Bindungswinkel in Molekülen kein Operator zuordnen.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass sowohl die Grundgleichung der Quantenmechanik als auch die Methoden zur Berechnung physikalischer Kenngrößen erraten

wurden. Dies war natürlich sehr unbefriedigend. Deshalb galten die beiden 1927 von Ehrenfest aus der Schrödinger-Gleichung hergeleiteten Theoreme als wichtige neue Einsicht. Danach befolgen die zeitlichen Änderungen der Erwartungswerte von Impuls und Ort eines Teilchens genau die Newtonsche Mechanik. Damit war die Verbindung zur klassischen Physik wieder hergestellt.

Gleichzeitig mit der Entwicklung der neuen Ideen stellte Heisenberg 1927 seine bekannte **Unschärfe-Relation** auf. In völliger Missachtung der zur Herleitung dieser Gleichung eingehenden Größen (ein Messprozess geht dort nie ein und es werden *mittlere* Streuungen *vieler* Versuche berechnet), etablierte sich als Interpretation dieser Gleichung: Man kann Impuls und Geschwindigkeit *eines* Teilchens nicht gleichzeitig genau *messen* bzw. beobachten. Diese Auslegung floss in die sogenannte Kopenhagener Deutung der Quantenmechanik ein und hatte weitreichende oder besser gesagt folgenschwere Nachwirkungen für die physikalischen Diskussionen bis in unsere Zeit.

Eine weitere Eigenschaft von Lösungen der Schrödinger-Gleichung hat (leider) ebenfalls großen Einfluss auf das allgemeine (Miss-)Verständnis der Quantenmechanik. So ergibt sich aus der Form der Schrödinger-Gleichung für einfache Systeme, dass die Linearkombinationen von Wellenfunktionen je wieder eine Lösung dieser Gleichung sind. An sich scheint an diesem mathematischen Ergebnis nichts Besonderes, es wurde allerdings unter dem Namen „**Superpositionsprinzip**“ zu einem Universalprinzip erhoben. Dabei wird meist übersehen, dass dieses „Prinzip“ bereits für den einfachen Fall eines stromführenden N-Elektronensystems, das über sein Magnetfeld auf sich selbst zurückwirkt, nicht mehr gilt.¹

Versucht man, die üblichen Deutungen des Welle-Teilchen-Dualismus, der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion, der Heisenbergschen Unschärferelation sowie das Superpositionsprinzip unter einen Hut zu bringen, so gelingt dies nur, wenn man seine bisherigen Denkwege aus der Erfahrungswelt aufgibt.

Welle-Teilchen-Dualismus und Heisenbergsche Unschärferelation erheben den Messvorgang bzw. die Beobachtung einschließlich des Beobachters zu einem wichtigen Bestandteil der Quantenmechanik. Stellvertretend für diese Sichtweise sei hier ein Zitat von Heisenberg aus einem 1958 veröffentlichtem Buch genannt: „The idea of an objective real world whose smallest parts exist objectively in the same sense as stones or trees exist, independently of whether or not we observe them ... is impossible ...“² Diese Interpretation widerspricht jeglicher Grundannahme,

1 Untersucht man beispielsweise einen intensiven Elektronenstrahl, der ein Magnetfeld aufbaut, das auf die Elektronen zurückwirkt, so führt diese Rückwirkung zum Phänomen der Selbstinduktion. In der Schrödinger-Gleichung der Elektronen taucht jetzt das sogenannte Vektorpotential des selbsterzeugten Feldes auf, und dieses hängt von der Lösung der Schrödinger-Gleichung ab. Dadurch wird diese nichtlinear, und das Superpositionsprinzip ist außer Kraft gesetzt. Näheres siehe Kapitel 10.

2 Übersetzt: „Die Idee einer objektiven realen Welt, deren kleinste Teilchen genauso objektiv wie Steine oder Bäume existieren, unabhängig davon, ob wir sie beobachten, ist unmöglich.“

dass die reale Welt auch existiert, wenn sie nicht betrachtet wird und dass ein Bewusstsein aus physikalischer Sicht keine gesonderten Eigenschaften besitzt.

Das Superpositionsprinzip legt zusätzlich nahe, dass Zustände „überlagert“, das heißt gleichzeitig, existieren – bis man sie beobachtet. Zieht man den Wahrscheinlichkeitscharakter der Wellenfunktion hinzu, so ist eigentlich klar, dass es nach einer Beobachtung einer Realisierung keine Wahrscheinlichkeit mehr geben kann. In der Statistik würde man sagen, ein vorher unbestimmtes Ereignis hat sich eingestellt (wurde realisiert). In der Quantenmechanik drückt man dies dramatischer aus und nennt es „**Kollaps der Wellenfunktion**“. Der befremdliche Versuch, Wahrscheinlichkeiten mit realen Ereignissen zu identifizieren, führte in der Folge zu Gedankenexperimenten wie „Schrödingers Katze“ oder Everetts „Viele-Welten-Theorie“. (Kein Mensch käme auf die Idee anzunehmen, ein Würfel würde in einer „Überlagerung“ seiner sechs möglichen Ergebnisse existieren, wenn man gewürfelt hat und den Würfel nicht sehen kann, weil er unter einem Becher versteckt ist. Oder besser noch, dass das Würfeln unser Universum in sechs verschiedene Welten aufspaltet, so dass jedes der möglichen Würfelresultate in jeweils einer „eigenen“ Welt auch realisiert wird.)

In diesem Buch werden wir zunächst einen widerspruchsfreien Weg zur Herleitung der Schrödinger-Gleichung aufzeigen. Dieser beruht auf der Einsicht, dass das Vakuum, dessen absolute Passivität in der Entwicklung der Quantenmechanik immer als selbstverständlich angesehen worden ist, in Wirklichkeit aber „nur so schäumt vor Aktivität, Energie und Teilchen“ [2]. Sogenannte virtuelle Teilchen entstehen und verschwinden wieder. Kurioserweise besteht über Letzteres auch bei den orthodoxen Vertretern der Quantenmechanik kein Zweifel, aber sie sehen in dieser Aktivität des Vakuums keine Begründung der Quantenmechanik. Die Möglichkeit eines neuen Verständnisses ergibt sich aber gerade aus der entgegengesetzten Sichtweise: Das Entstehen und Verschwinden von Teilchen kann ja doch auf die realen (beständigen) Teilchen nicht ohne Effekt bleiben. So gehen wir davon aus, dass sich kleinste Teilchen unter Wirkung stochastischer Kräfte bewegen, analog zur Brownschen Bewegung eines kleinen Teilchens in einem Wärmebad. Diese Kräfte können entsprechend als Stöße mit virtuellen Teilchen interpretiert werden.

Mit diesem Zugang zur Quantenmechanik lassen sich alle oben genannten experimentellen Phänomene, einschließlich solch zunächst verblüffender Experimente wie dem Tunneleffekt oder dem Doppelspalt-Experiment, schlüssig erklären. Außerdem findet man eine Erklärung für den Spin, über dessen Herkunft bzw. Ursache in der heutigen Quantenmechanik bewusst hinweggegangen wird. Einerseits wird er in gängigen Lehrbüchern und Vorlesungen als äquivalent zu einem Drehimpuls eingeführt. Auf der anderen Seite haben schon frühe Rechnungen gezeigt, dass dieser nicht auf einer Eigenrotation der – nahezu punktförmigen – Elektronen basieren kann. Als Konsequenz bleibt der Spin üblicherweise eine mysteriöse Eigenschaft, die eben jedes Teilchen mit sich herumträgt.

Folgt man der Philosophie von Ockhams Rasiermesser (Sparsamkeitsprinzip in der Wissenschaft), so ist dem hier aufgeführten Weg in die Quantenmechanik in jedem Fall der Vorzug gegenüber der Kopenhagener Deutung zu geben. Denn in unserem Fall ist die Existenz von virtuellen Teilchen oder – vorsichtiger ausgedrückt – Vakuum Schwankungen die einzige Annahme, die zusätzlich zur klassischen Theorie getroffen wird. Es sind keine nebulösen Annahmen über den Einfluss von Beobachtern, das Erraten von Abbildungsvorschriften oder irgendwelche Dualismen notwendig.

Es sei noch angemerkt, dass die sprachliche Freizügigkeit im „Kopenhagener“ Umgang mit den alten Begriffen wie Punktmasse, Impuls, Drehimpuls, Welle etc. auch zu einem Verlust an sachlicher Trennschärfe geführt hat, den man an dem Begriff „Quantenphysik“ ablesen kann. Das Wort suggeriert, dass sich nicht nur massebehaftete Teilchen wie Elektron, Proton und Neutron nach Gesetzen der Quantenmechanik verhalten, sondern auch die masselosen Photonen, Teilchen der Elektrodynamik. Die zugehörigen beiden Phänomengebiete könne man also unter dem Überbegriff „Quantenphysik“ zusammenfassen. Dabei haben wir es hier mit Teilchen völlig verschiedener Qualität zu tun. Ein Photon ist ein Teilchen, dessen Ausbreitung im Raum elektromagnetischen Gesetzen gehorcht, die sich aus den Maxwell'schen Gleichungen herleiten. Es hat keine Ruhemasse und bewegt sich im Vakuum stets mit Lichtgeschwindigkeit. Im Gegensatz dazu ist ein Elektron ein massebehaftetes Teilchen, dessen Geschwindigkeit im Vakuum keine Naturkonstante ist.

Eine Unzahl neuester Experimente beschäftigt sich nun gerade mit der Wechselbeziehung von Photonen, die aus gemeinsamer Quelle stammen, aber getrennt an weit auseinander liegenden Orten nachgewiesen werden. Die Ergebnisse werden als allgemeingültig auch für massebehaftete Teilchen angesehen. Dieser gedankenlose Vergleich ist aus unserer Sicht unzulässig, denn *Photonen werden nicht durch die Grundgleichungen der Quantenmechanik beschrieben!*

Bevor wir uns nun der Theorie widmen, noch eine kurze Anmerkung: Da dieses Buch sich an ein breites Publikum wendet, beschränkt es sich auf Formeln und Herleitungen, die zum Verständnis wichtig sind. Der komplette mathematische Hintergrund findet sich unter anderem in einigen Artikeln der weiterführenden Literatur.

Um die Formeln in diesem Buch zu verstehen, ist zumindest ein Grundverständnis von Vektorrechnung sowie Integral- und Differentialrechnung notwendig. Wir haben uns jedoch bemüht, den Text zwischen den Formeln so abzufassen, dass man einigermaßen folgen kann, auch wenn man die eine oder andere Formel bzw. Herleitung nicht versteht.

Vektoren werden in diesem Buch durch Unterstriche gekennzeichnet, zum Beispiel $\underline{x} = (x_1, x_2, x_3)$. Ableitungen und partielle Ableitungen werden wie üblich dargestellt. Außerdem verwenden wir zur Abkürzung die bekannten mathematischen Operatoren $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$ (Nabla-Operator) und $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ (Laplace-Operator).

2 Die Grundannahmen

Teilchen sind Teilchen. Wir setzen voraus, dass quantenmechanische Teilchen tatsächlich das sind, was der Name impliziert: kleine Objekte mit endlicher Ausdehnung. Vereinfacht kann man diese Teilchen als punktförmig ansehen. Auf keinen Fall haben die betrachteten Objekte (zum Beispiel Elektronen) eine unendliche Ausdehnung oder sind in irgendeiner Form „verschmiert“ oder „wellenförmig“. Was für eine Bedeutung hätte in einem solchen Fall auch der Ortsvektor \underline{r} , der in allen Gleichungen der Quantenmechanik auftaucht?

Das Vakuum ist nicht leer, sondern „full of stuff“ (voller Zeug), wie der Oxforder theoretische Physiker Frank Close zu sagen pflegt und dies in seinem Buch „Das Nichts verstehen“ genauer ausführt [2]. Noch ausführlicher geht der Karlsruher Physiker Henning Genz in seinem Buch „Die Entdeckung des Nichts. Leere und Fülle im Universum“ auf das alte Missverständnis ein, dass das „Vakuum“ absolute Leere von Objekten und frei von irgendwelchem Geschehen sei.

Unsere Begründung der Quantenmechanik baut auf der Vorstellung auf, dass das „stuff“ des Vakuums aus sogenannten virtuellen Teilchen¹ besteht, die lokal kurzzeitig unter Verletzung des Energieerhaltungssatzes auftauchen und wieder verschwinden.² Größe und Dauer der Energieverletzung sind über die Plancksche Konstante h verknüpft, die in der klassischen Physik wegen des dort unterstellten leeren und passiven Vakuums nicht auftritt. Wir gehen davon aus, dass sich diese Energiefluktuationen (oder Vakuumfluktuationen) auch auf die „reellen“ Teilchen auswirken, von denen die Quantenmechanik handelt, also Elektronen, Protonen, Neutronen, Atomkerne etc. Bewegt sich zum Beispiel ein Elektron nach der klassischen Mechanik auf einer Bahn mit fester Energie, so können die Vakuumfluktuationen dazu führen, dass das Elektron seine Bahn verlässt. Dies macht sich unter anderem bei einem Teilchen im Zustand niedrigster klassischer Bewegungsenergie bemerkbar, wenn es nämlich klassisch in Ruhe wäre. In diesem Falle bringen es die Vakuumfluktuationen aus der Ruhe: Es erhält eine „Nullpunktsenergie“.

Die reellen Teilchen unterliegen somit durch die Vakuumfluktuationen zufälligen (stochastischen) Kräften, die zusätzlich zu den konservativen (klassischen) Kräften wirken. Es überlagert sich der klassischen Bewegung der Teilchen eine diffusive, wie wir es aus einem Wärmebad kennen. *Im Gegensatz zu einer klassischen Streuung im Wärmebad wird dabei jedoch im Mittel über hinreichend viele Prozesse keine Energie und kein Impuls übertragen* – andernfalls wären die klassischen Erhaltungs-

1 Virtuelle Teilchen dürfen nicht mit Antiteilchen verwechselt werden. Antiteilchen, beispielsweise Positronen, sind physikalische Objekte, die heute direkt nachgewiesen sind und in verschiedenen Experimenten verwendet werden.

2 Ob virtuelle Teilchen lokal *entstehen* und *verschwinden*, ob sie sich in irgendeiner Weise global manifestieren oder überhaupt etwas mit bekannten Teilchen gemein haben, ist für unsere Betrachtungen nicht relevant. Wichtig für uns ist nur die lokale Wirkung. Wir verwenden daher im Folgenden etwas vorsichtiger die Begriffe Energie- bzw. Vakuumfluktuation.

sätze nicht mehr gewährleistet. Die reellen Teilchen bewegen sich also im Mittel reibungsfrei durch das Vakuum.

Teilchen mit elektrischer Ladung strahlen nur bei Änderung der Wahrscheinlichkeitsverteilung elektromagnetische Energie ab.³ Einzelne Elektronen unterliegen durch die Wechselwirkung mit den Vakuumfluktuationen immer wieder einer beschleunigten Bewegung, und man könnte daher annehmen, dass sie – entsprechend der klassischen Elektrodynamik – kontinuierlich elektromagnetische Energie abstrahlen.

Wenn der oben bereits angesprochene Energieerhaltungssatz über einen längeren Zeitraum nicht verletzt werden soll, darf dabei im Mittel keine Energie aufgenommen oder abgegeben werden, solange sich das Teilchen in einem zeitlich unveränderlichen (einem sogenannten stationären) Zustand befindet. Das aktive Vakuum wirkt nun in gewisser Weise wie ein Wärmebad, in welchem alle beständigen Teilchen eingebettet sind. In einem zeitlich stabilen Zustand⁴ wird ein geladenes Teilchen aufgrund seiner unregelmäßigen Bewegung ständig kurzzeitig elektromagnetische Energie abstrahlen, aber durch entsprechende Absorptionsprozesse erhält es im Zeitmittel ebensoviel Energie vom Wärmebad wieder zurück. Für geladene Teilchen gilt daher, dass Emission oder Absorption von Energie nur durch zeitliche *Veränderung* der Wahrscheinlichkeitsverteilung bewirkt wird. Anders formuliert geben geladene Teilchen nur dann Energie an ihre Umgebung ab oder nehmen diese auf, wenn sie ihren *mittleren* energetischen Zustand ändern.

Die Welt existiert objektiv und außerhalb unseres Bewusstseins. Auch wenn diese Annahme trivial und eine Grundvoraussetzung für Naturwissenschaften zu sein scheint, so wird dies doch mit der Rolle des Beobachters entsprechend der Kopenhagener Interpretation in Frage gestellt. Wie sich im Weiteren zeigen wird, ist es überhaupt nicht notwendig, der Beobachtung oder Messung in der Quantenmechanik eine besondere Rolle zuzuschreiben. Somit hat diese zunächst philosophische Aussage auch Bedeutung für die Bewertung unseres Zugangs zu einer „Quantenmechanik ohne Beobachter“.

3 Berechenbar ist die Emission oder Absorption von Energie entsprechend der klassischen Elektrodynamik, wobei rein mathematisch die Wahrscheinlichkeitsverteilung wie eine kontinuierliche Ladungsverteilung zu behandeln ist.

4 In der Thermodynamik würde man sagen, das Teilchen habe die Temperatur des Wärmebads angenommen.

6 Der Übergang zur Quantenmechanik

In diesem Kapitel lösen wir unser Versprechen ein, die Bewegung quantenmechanischer Teilchen auf die von klassischen stochastischen Systemen zurückzuführen. Aufgrund der Besonderheiten des Vakuums muss dazu die Grundgleichung aus Kapitel 4.2 modifiziert werden. Fußend auf der sich letztlich ergebenden Schrödinger-Gleichung bauen wir unser Konzept anschließend weiter aus.

6.1 Die Eigenschaften des Vakuums

6.1.1 Die Viskosität des Vakuums – Rolle der Planckschen Konstanten

Entsprechend unserer Grundannahmen gehen wir davon aus, dass sich die Bewegung quantenmechanischer Teilchen im Vakuum auf die Beschreibung klassischer stochastischer Systeme zurückzuführen lässt. Als Bewegungsgleichung eines klassischen Systems stochastischer Teilchen haben wir die Gleichung (4.4) erhalten, welche die sogenannte kinematische Viskosität (4.2) als Größe enthält. Für den Übergang zur Quantenmechanik ist es also notwendig, die Viskosität des Vakuums zu bestimmen.

Die Viskosität ergab sich bei der Herleitung des Einsteinschen Verschiebungsquadrats zu $\nu = \frac{1}{m_0} k_B T \tau$. Das Einbettungssystem taucht hier in Form der thermischen Energie $k_B T$ auf, die ein Maß für die mittlere fluktuierende Kraft F_S ist, während $1/\tau$ ein Maß für die richtungsabhängige Bremskraft darstellt. Das Produkt $k_B T \tau$ hat die Dimension einer Wirkung.

Im Fall des Vakuums, das universell auf die Bewegung von Teilchen einwirkt, kommt für dieses Produkt nur eine Konstante in Betracht: die Plancksche Konstante \hbar . Ein fester Vorfaktor von \hbar bleibt zunächst noch unbestimmt. Allerdings können wir später die Ergebnisse der Schrödinger-Gleichung an den experimentell sehr gut bestimmten Linien-Spektren von Wasserstoff-Atomen eichen. Wir nehmen das Ergebnis vorweg und halten fest, dass der Vorfaktor $1/2$ beträgt.

Die kinematische Viskosität des Vakuums ergibt sich also zu:

$$\nu = \frac{\hbar}{2m_0} \quad (6.1)$$

Wie oben schon beschrieben, sind mit dieser Form für ν keine weiteren Aussagen zu Eigenschaften des Vakuums möglich (zum Beispiel zu dessen Temperatur).

6.1.2 Reibungsfreiheit

Eine Eigenschaft, die das Vakuum von klassischen stochastischen Systemen unterscheidet, ist dessen Reibungsfreiheit. Dies bedeutet, dass Teilchen bei der Bewegung im Vakuum im Zeitmittel keine Energie aufnehmen oder abgeben. Im klassischen stochastischen Fall wird dagegen ein Teilchen immer abgebremst, wenn es mit

hoher Geschwindigkeit in ein Wärmebad eingeschossen wird. Wie können wir nun in den oben angegebenen klassischen Gleichungen diese Energieerhaltung mathematisch berücksichtigen?

Für Zeitspannen Δt , die groß gegen die Bremszeit τ sind, ergab sich die Einsteinsche Beziehung für das mittlere Verschiebungsquadrat (4.1) und als weitere Konsequenz daraus die Bewegungsgleichung (4.4). Diese Herleitung funktioniert nur unter der Annahme, dass die statistische Gesamtkraft, welche auf das Teilchen wirkt, in eine Bremskraft proportional zu $1/\tau$ und in eine statistische Restkraft mit Gauß-Verteilung zerlegt werden kann.

Ließe man die Bremskraft gegen Null gehen ($\tau \rightarrow \infty$), so wären keine Aussagen für endliche Zeitspannen Δt mehr möglich, da $\Delta t \gg \tau$ vorausgesetzt wurde. Dieser Weg bleibt also verwehrt, im Rahmen der bisher entwickelten Theorie ist der Übergang zu einer reibungsfreien Bewegung durch den Grenzübergang $\tau \rightarrow \infty$ nicht möglich.

Dagegen erweist sich ein anderer Lösungsweg als praktikabel, der die Verwendung des bisher entwickelten formalen Apparats erlaubt:

Wir erinnern uns, dass in einem klassischen System die stochastischen Kräfte zu einer Abbremsung des Teilchens führen, wenn es vorher eine mittlere Geschwindigkeit hatte. Da das Vakuum aber das Teilchen keinesfalls abbremsen darf, kann man annehmen, dass sich abbremsende und bewegungsanfachende Kräfte im Mittel abwechseln. Man könnte auch sagen, das Teilchen ist abwechselnd Kräften ausgesetzt, die jeweils eine Bewegung vom Typ „Brownsch“ und „anti-Brownsch“ hervorrufen.

Mathematisch beschreiben wir dies, indem wir die bisher betrachtete Gesamtschar aus N Systemen in zwei Halbscharen von je $N/2$ Systemen unterteilen. Die erste Unterschar (Index B), die wir als „Brownsche“ Halbschar bezeichnen wollen, soll sich wie die bisher betrachtete Schar verhalten, also im Mittel einer abbremsenden Kraft unterliegen. Dagegen soll das Aufteilchen in der zweiten Halbschar (Index A), welche „Antibrownsche“ Halbschar genannt werden soll, einer bewegungsanfachenden Kraft unterliegen.

Die entsprechenden Bewegungsgleichungen für beide Halbscharen unterscheiden sich nur durch das Vorzeichen für die Viskosität. Es gilt $v_B = -v_A$.

Das arithmetische Mittel der Gleichungen für beide Halbscharen beschreibt dann für die gesamte Schar eine reibungsfreie Bewegung, wenn neben den Wahrscheinlichkeitsdichten auch die Geschwindigkeitsmittel in beiden Halbscharen zu jedem Zeitpunkt übereinstimmen [3]. Letzteres scheint für die beiden Halbscharen zunächst unvereinbar. Es gilt allerdings zu beachten, dass wir mit dieser Unterteilung lediglich *mathematisch* die abwechselnden abbremsenden und beschleunigenden Wirkungen der Vakuumfluktuationen auf das betrachtete Teilchen beschreiben. In einem realen System wechseln sich abbremsende und anfachende Streuvorgänge ständig ab, so

dass auch das Geschwindigkeitsmittel innerhalb des Zeitintervalls τ bei Aufteilung in die beiden Halbscharen identisch bleibt [5].

Wir wählen also nun diesen Ansatz des Aufteilens in Brownsche und Anti-Brownsche Halbschar, um aus der Bewegungsgleichung der klassischen stochastischen Mechanik die Bewegungsgleichung der Quantenmechanik herzuleiten.

6.2 Die Schrödinger-Gleichung

Nach den Vorbetrachtungen in den beiden vorangegangenen Kapiteln ist zu erwarten, dass man einfach den Mittelwert aus Gleichung (4.4) über beide Halbscharen berechnet, den Wert für v aus Gleichung (6.1) einsetzt und damit die Bewegungsgleichung für quantenmechanische Teilchen erhält. Tatsächlich ist dies auch so (siehe [3]), und man erhält eine Gleichung für \underline{u} und \underline{v} . Es erweist sich allerdings als praktisch, diese Gleichung weiter umzuformen.

Da die komplette Herleitung sehr viel Platz in Anspruch nimmt, seien an dieser Stelle nur die wesentlichen Ansätze aufgezeigt. Für eine ausführliche Beschreibung siehe [3], [4] oder [5].

Zunächst werden \underline{u} und \underline{v} aus Gleichung (4.4) ersetzt. \underline{u} ergibt sich aus dem Vergleich von Definition der Diffusionsstromdichte $\underline{j}_D = \rho \underline{u}$ und dem ersten Fickschen Gesetz $\underline{j}_D = -v \nabla \rho$. Damit folgt $\underline{u} = -v \frac{1}{\rho} \nabla \rho$.

Für das Scharmittel der Teilchengeschwindigkeit \underline{v} wird ein anderer Ansatz gewählt. Es lässt sich zeigen [5], dass das Geschwindigkeitsfeld rotationsfrei bis auf singuläre Wirbellinien sein muss. Daher kann man die Teilchengeschwindigkeit als Gradient eines Potentials darstellen in der Form $\underline{v} = \frac{\hbar}{m_0} \nabla \varphi(\underline{r}, t)$.¹

Verwendet man dazu noch die Zusammenfassung $\psi(\underline{r}, t) = \pm \sqrt{\rho(\underline{r}, t)} e^{i\varphi(\underline{r}, t)}$, so erhält man letztlich die sogenannte Schrödinger-Gleichung als Bewegungsgleichung für die Quantenmechanik:²

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\underline{r}, t) = \left[-\frac{\hbar}{2m_0} \Delta + U(\underline{r}) \right] \psi(\underline{r}, t) \quad (6.2)$$

6.2.1 Ergebnisse und Interpretation

Der Ausdruck ψ in Gleichung (6.2) wird üblicherweise als Wellenfunktion bezeichnet. Dies geht darauf zurück, dass die Gleichung (6.2) die Form einer Wellengleichung

1 Der Vorfaktor $2v = \frac{\hbar}{m_0}$ vor dem Gradienten ist zunächst willkürlich eingeführt, um die richtige Dimension für \underline{v} zu erhalten. Er lässt sich beispielsweise durch die Quantisierungsbedingung für den Drehimpuls begründen [5].

2 Die komplexwertige Zusammenfassung von ρ und φ geht auf Erwin Madelung zurück. Er hat gezeigt, wie sich mit einer solchen Zusammenfassung nichtlineare Gleichungen auf lineare zurückführen lassen.

chung hat. Im Besonderen für ein freies Teilchen, das heißt für $U(r) = 0$, erhält man als Lösung sogenannte ebene Wellen, wie man sie aus klassischen Bereichen der Physik kennt.

ψ selbst kommt dabei aber keine physikalische Bedeutung zu, wie es oft über den Begriff der Materiewelle suggeriert wird. Die Funktion ψ ist lediglich eine Zusammenfassung der Größen $\rho(r, t)$ und $\varphi(r, t)$. Diese wiederum sind Scharmittelwerte über ein Punktmassensystem, dienen also der statistischen Vorhersage des Verhaltens von Teilchen. Von physikalischer Relevanz sind lediglich die

- Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\rho(r, t)$ und die
- Stromdichte $\underline{j}(r, t) = \rho(r, t)\underline{v}(r, t) = \rho(r, t)\nabla\varphi(r, t)$.

Wie im Kapitel 3 beschrieben wurde, ergibt das Integral über die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen in einem bestimmten Volumen zu finden. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit hat also *nichts* mit einem einzelnen Teilchen zu tun.³ Insbesondere beschreibt sie keine „Versmierung“ eines bestimmten Teilchens, und Rückschlüsse über die zeitliche Veränderung solcher einer „Versmierung“ auf das Verhalten dieses Teilchens sind völlig unsinnig. Wir werden später bei der Diskussion des Wellenpaketes noch darauf eingehen.

Die Stromdichte beschreibt den Teilchenfluss und damit das Bewegungsverhalten des Systems. Das Integral darüber ergibt den Erwartungswert für die Geschwindigkeit zu einem bestimmten Zeitpunkt.

Im Zusammenhang mit Lösungen der Schrödinger-Gleichung taucht weiterhin der Begriff „Zustand“ auf. Was bedeutet dieser Begriff? Wie erläutert, lassen sich in der Quantenmechanik Teilchen nicht mehr durch eine definierte Orts- und Geschwindigkeitsfunktion beschreiben. Stattdessen werden Wahrscheinlichkeitsaussagen getroffen und (Schar-)Mittelwerte angegeben. In der Wellenfunktion sind diese Informationen zusammengefasst bzw. die Mittelwerte lassen sich mit ihrer Hilfe berechnen. Daher bezeichnet man *eine bestimmte* Lösung (Wellenfunktion) der Schrödinger-Gleichung zu einer vorgegebenen Energie als Zustand bzw. sagt, Teilchen mit dieser Energie befinden sich in einem durch ψ definierten „Zustand“.

6.2.2 Zeitabhängigkeit und -unabhängigkeit

Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung (6.2) sind offensichtlich zeitabhängig. Ändert sich für eine Lösung die resultierende Wahrscheinlichkeitsdichte für geladene Teilchen, das heißt die Ladungsdichte, ebenfalls zeitlich,⁴ so wird Energie abgestrahlt (siehe Kapitel 2).⁵ Durch diese Energieabgabe (oder -aufnahme) ändert sich wiederum der Zustand des Teilchens mit der Zeit.

3 Sie stellt ja per Definition einen (Schar-)Mittelwert über viele gleichartige Systeme dar.

4 Es ist natürlich möglich, dass die Wellenfunktion zeitabhängig ist, die Ladungsdichte jedoch nicht. Dies ist immer der Fall, wenn die Zeitabhängigkeit nur im komplexwertigen Teil von ψ auftritt.

5 Genauer gesagt wird Energie abgestrahlt, wenn eine beschleunigte Bewegung der Ladungsdichte auftritt.

Falls auf das Teilchen wirkende **äußere Felder zeitunabhängig** sind, gibt es aber auch Zustände, die besonders stabil sind, das heißt in welchen sich die Ladungsdichte und damit die Energie des Teilchens nicht ändert (das heißt $\rho(r, t) = \rho(r)$). Solche Zustände werden als stationär bezeichnet. Man kann zeigen, dass solche Zustände sich als Lösung einer Extremwertaufgabe ergeben, bei der sich die Energie lokal nicht ändert (das heißt bei der die Ableitung der Energie gleich Null ist). Diese Extremwertaufgabe führt direkt zur sogenannten stationären Schrödinger-Gleichung.

Mathematisch gelangt man recht einfach zu dieser Lösung, indem man durch den sogenannten Separationsansatz die Wellenfunktion in einen zeitabhängigen und einen zeitunabhängigen Teil zerlegt: $\psi(r, t) = \hat{\psi}(r)f(t)$. Die Lösung für den Zeitanteil ergibt eine rein komplexwertige Funktion der Form $f(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$, in der E die Energie des jeweiligen Zustands bezeichnet. Das Produkt aus diesem Zeitanteil und der Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung $\hat{\psi}(r)$ löst dann die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung.

In der Praxis wird für viele Probleme die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung gelöst. Dies hat im Wesentlichen drei Gründe:

Mathematisch kann man jede Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung nach Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung (multipliziert mit obigem Zeitterm) entwickeln – genauso, wie man jede Funktion nach Sinus- und Cosinus-Funktionen entwickeln kann mit Hilfe der Fourier-Analyse.

Weiterhin ist man häufig an stabilen angeregten Zuständen, das heißt stabilen Zuständen, die energetisch höher als der Grundzustand liegen, interessiert. Damit lassen sich experimentell gefundene Emissionsspektren erklären, wobei die gemessenen Spektren den Energiedifferenzen zwischen den stationären Zuständen entsprechen. Das klassische Beispiel hierfür ist das Linienspektrum des Wasserstoff-Atoms.

Der wichtigste Grund allerdings ist, dass man in den sehr vielen praktischen Anwendungsfällen „lediglich“ am Grundzustand eines Systems interessiert ist. Dieser zeichnet sich dadurch aus, dass das Teilchen nicht durch Energieabgabe in einen tieferen Zustand gelangen kann. Insbesondere für Mehrteilchensysteme lassen sich damit Gleichgewichtszustände berechnen, zum Beispiel die Anordnung der Atome in einem Molekül, indem für verschiedene Anordnungen der Atome diejenige mit der geringsten Energie gesucht wird.

Für **alle** stationären Zustände ist folgende Anmerkung sehr wichtig: Bekanntlich ändern sich diese Zustände zeitlich nicht (mehr). Das Scharmittel beschreibt damit einen Endzustand, der sich erst nach „unendlich“ langer Zeit einstellt.⁶ Berechnet man mit der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung den Übergang zwischen zwei

⁶ Entsprechend der Unschärferelation ist natürlich klar, dass auch im stationären Zustand die Energie um einen bestimmten Betrag unbestimmt ist.

stationären Zuständen, beispielsweise für das Wasserstoffatom, so ergibt sich für die Zeitabhängigkeit der zu den Zuständen gehörenden Koeffizienten die Form einer S-Kurve (\tanh).⁷ Der „Grenzwert“ des stationären Zustands stellt sich somit auch mathematisch erst im Unendlichen ein. Als Konsequenz ergibt sich, dass angeregte stationäre Zustände niemals „rein“ präpariert werden können.

Auch anschaulich wird klar, dass sich ein System nie in einem solchen stationären Zustand befinden kann. Denn in diesem Fall könnte es diesen nicht wieder „spontan“ verlassen. Beispielsweise wäre dann die *spontane* Lichtemission nicht möglich. In Übereinstimmung mit unseren Überlegungen beobachtet man jedoch, dass Elektronen, die „langsam“ angeregt wurden (zum Beispiel durch Lichtanregung), länger in einem angeregten Zustand verweilen als Elektronen, die „schnell“ in einen höheren Zustand versetzt wurden (zum Beispiel durch Elektronenstoß).

An dieser Stelle sei nochmals darauf hingewiesen, dass jedweder Zustand ein Scharmittel darstellt und damit niemals das konkrete Verhalten eines einzelnen Teilchens beschreibt. Ändern sich die Randbedingungen, unter denen das Scharmittel gebildet wurde – wie es bei Energieabgabe oder bei zeitlich veränderlichen äußeren Potentialen der Fall ist –, so wird sich natürlich auch das Scharmittel (und damit der Zustand) ändern. Ein stationärer Zustand stellt somit einen Spezialfall eines Scharmittels dar: Neben dem Mittelwert über eine Vielzahl von Systemen ist er gleichzeitig auch ein zeitlicher Grenzwert. Die implizite Annahme, dass stationäre Zustände „Standardzustände“ für die uns umgebenden Teilchen sind, ist – abgesehen vom Grundzustand – nicht richtig.⁸

6.2.3 Impuls und Energie

Ein fundamentaler Mangel der üblichen Interpretation der Quantenmechanik ist es, dass die Ausdrücke zur Berechnung der Energie oder des Impulses eines Teilchens erraten bzw. über Analogien definiert werden. Leitet man die Quantenmechanik, wie bei uns geschehen, aus der stochastischen Bewegung von Punktmassen her, so ergeben sich diese Größen folgerichtig aus dieser Herleitung.

Da wir entsprechend unserer Interpretation Scharmittelwerte betrachten, sind Impuls und Energie als Erwartungswert für die Schar zu berechnen (siehe Kapitel 3.3).

Demnach ergibt sich der Erwartungswert des Impulses als Integral über die Impulsstromdichte, wie sie im Kapitel 6.2.1 dargestellt ist. Durch einfache Umformung er-

7 Die exponentielle Abnahme der Zerfallsrate, das heißt der Teil der Kurve, bei dem die Übergangsrate bereits ihr Maximum erreicht hat, ist zum Beispiel in einem Experimentaltbild in [8] zu sehen.

8 Mathematische Anmerkung: Stationäre Zustände sind daher ähnlich den Attraktoren (bzw. Gleichgewichtsniveaus) in einem Ornstein-Uhlenbeck-Prozess, welcher bei Nelson (siehe Kapitel 6.3.5) direkt zur Herleitung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung aus der Brownschen Bewegung verwendet wird. Allerdings sei an dieser Stelle angemerkt, dass quantenmechanische Prozesse Nicht-Markoffsche Prozesse sind, also nicht direkt durch einen Ornstein-Uhlenbeck-Prozess beschrieben werden.

hält man daraus den bekannten Ausdruck

$$\langle P \rangle = \int \underline{j}(\underline{r}, t) d^3 r = \int \psi^*(\underline{r}, t) (-i\hbar \underline{\nabla}) \psi(\underline{r}, t) d^3 r, \quad (6.3)$$

wobei üblicherweise der Ausdruck $-i\hbar \underline{\nabla}$ als „**Impulsoperator**“ bezeichnet wird. (ψ^* ist dabei der konjugiert komplexe Wert von ψ .)

Sehr einfach lässt sich auch der Erwartungswert der potentiellen Energie aus dem Potential $U(\underline{r})$ und der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\underline{r}, t)$ bestimmen:

$$\langle U \rangle = \int \rho(\underline{r}, t) U(\underline{r}) d^3 r = \int \psi^*(\underline{r}, t) U(\underline{r}) \psi(\underline{r}, t) d^3 r. \quad (6.4)$$

Um die kinetische Energie zu ermitteln, gehen wir von der kinetischen Energiedichte aus, die sich aus der konvektiven Teilchengeschwindigkeit \underline{v}_c ergibt:

$$\epsilon_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m_0 \rho(\underline{r}, t) [\underline{v}_c(\underline{r}, t)]^2. \quad (6.5)$$

Es ist zu beachten, dass die konvektive Geschwindigkeit (im Gegensatz zur Teilchengeschwindigkeit \underline{v}) in der Brownschen und Antibrownschen Halbschar verschieden ist.⁹ Man muss also den Mittelwert über die kinetischen Energiedichten beider Systeme bestimmen, womit sich dann ergibt:

$$\epsilon_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m_0 \rho(\underline{r}, t) [\underline{v}^2(\underline{r}, t) + \underline{u}^2(\underline{r}, t)]. \quad (6.6)$$

Nach Integration und weiterer Umformung (siehe [4]) erhält man schließlich den Erwartungswert der kinetischen Energie zu

$$\langle E_{\text{kin}} \rangle = \int \epsilon_{\text{kin}} d^3 r = \int \psi^*(\underline{r}, t) \left(\frac{-\hbar^2 \Delta}{2m_0} \right) \psi(\underline{r}, t) d^3 r. \quad (6.7)$$

Addiert man die Ausdrücke für kinetische und potentielle Energie, so ergibt sich der in der Quantenmechanik bekannte Ausdruck für die Gesamtenergie.

Wir möchten noch auf einen weiteren wichtigen Punkt eingehen, der unsere Herleitung von Impuls und Energie vom „Erraten“ beim Standardzugang zur Quantenmechanik unterscheidet. Dort sind lediglich die rechten Seiten in Gleichung (6.3) und (6.7) bekannt. Bei unserem Zugang treten diese jedoch erst als Ergebnisse nach Umformen der Integrale über Energie- bzw. Impulsdichte auf.

Bei dieser Herleitung verwenden wir den Greenschen Satz, mit dessen Hilfe man den „Impulsoperator“ $\underline{\nabla}$ von ψ^* auf ψ „überwälzt“. In diesem Fall sagt man auch, der Impulsoperator ist selbstadjungiert.¹⁰ Der letztlich unter dem Integral auftretende Ausdruck $(-\hbar^2 \Delta)/(2m_0)$ lässt sich nach dieser Umformung allerdings nicht mehr als Energie- oder Impulsdichte interpretieren. Damit bleiben diese beiden Ausdrücke

⁹ Sie ergibt sich entsprechend dem Vorzeichen der Viskosität im jeweiligen Untersystem zu $\underline{v}_c = \underline{v} \pm \underline{u}$.

¹⁰ Die Voraussetzung für den Greenschen Satz ist, dass ψ im Unendlichen verschwindet bzw. periodischen Randbedingungen genügt.

in der üblichen Quantenmechanik einer Interpretation verschlossen und lassen sich leicht in das Reich des „Unverständlichen“ verschieben.

Das „standardisierte“ Rätselraten beim Schließen von mathematischen Formeln auf physikalisch relevante Größen beschränkt sich natürlich nicht auf Energie und Impuls. In allgemeiner Form werden die sogenannten Observablen betrachtet.

6.2.4 Observable

In der Regel kommt man in Standardwerken zur Quantenmechanik nach dem Bekanntmachen der Schrödinger-Gleichung recht schnell zum „**Korrespondenzprinzip**“. Dazu wird durch Erraten eine Regel aufgestellt, wie sogenannte Observablen, also „messbare“ physikalische Größen, allgemeingültig auf mathematische Operatoren O abgebildet werden. Mit Hilfe dieser Operatoren lässt sich aus der Wellenfunktion der Erwartungswert für die entsprechende physikalische Größe, das heißt die Observable, berechnen.

Etwas „moderner“ wird diese Abbildung als POVM (Positive Operator Valued Measure) bezeichnet. Trotz dieser wichtig klingenden Sprechweise wird eine konsequente physikalische Begründung überhaupt nicht ersichtlich. Diese Situation wird glänzend illustriert durch Kommentare von G. Ludwig in seinem Buch „Einführung in die Grundlagen der Theoretischen Physik“ [9]:

„In dieser Sachlage können wir also den Leser beruhigen, wenn er den Eindruck hat, rein gar nichts von der physikalischen Bedeutung der Struktur der Gesetze für das Rechnen mit Operatoren erkennen zu können; es ist eben unmöglich, eine solche physikalische Bedeutung unmittelbar zu erkennen. Er muss sich zunächst damit zufrieden geben, dass es uns gelungen ist, mit Hilfe des Korrespondenzprinzips ein formales Schema für die gesuchte Quantentheorie zu erraten ...“

Ein weiteres Manko dieser erratenen Abbildungsregeln ist, wie schon in der Einleitung erwähnt, dass einige der sogenannten Observablen selbst gar nicht messbar sind, beispielsweise die Energie. Messbar sind lediglich Energiedifferenzen in Form von Emissions- und Absorptionsspektren, die daneben auch eine natürliche Linienbreite aufweisen. Auf der anderen Seite gibt es experimentell sehr gut bestimmbare Größen, wie die Bindungswinkel in Molekülen oder die Gitterkonstanten von Festkörpern, die keinem „Hermiteischen Operator“ der Standard-Theorie entsprechen.

Diese Probleme tauchen bei unserem Zugang zur Quantenmechanik nicht auf. Energie und Impuls lassen sich, wie im vorigen Kapitel gezeigt, konsequent aus ihrer physikalischen Bedeutung herleiten. Dazu bedarf es keines Korrespondenzprinzips oder anderer erratener Formalismen. Das Gleiche gilt auch für den Drehimpuls.

Das Problem der Observable „Bindungswinkel“ besteht bei uns nicht, da in unserem Fall ja keine Operatoren abgebildet werden müssen. Den Bindungswinkel erhält man einfach, indem man für das entsprechende Molekül die Atomanordnung mit der niedrigsten Gesamtenergie sucht.

Ein weiterer Punkt sei hier nur kurz erwähnt. Im Standardzugang zur Quantenmechanik wird oft unterstellt, man könne den Erwartungswert eines Operators beliebig genau messen (oder die Erwartungswerte mehrerer Operatoren gleichzeitig, falls diese Vertauschungsregeln gehorchen). Es wird aber völlig offen gelassen, wie solche Messungen auszuführen sind. Messgeräte bestehen aus Atomen, die damit ebenfalls schon Unschärfen aufweisen. Die Spektrallinien von Atomen weisen eine natürliche Linienbreite auf. Es ist sehr aufschlussreich, wenn selbst Eugene Wigner, Physik-Nobelpreisträger des Jahres 1963 und einer der großen Mitwirkenden bei der Entstehung der Quantenmechanik, in einem Buch „Quantum Theory of Measurement“ schreibt: „All these are concrete and clearly demonstrated limitations on the measurability of operators. They should not obscure the other, perhaps even more fundamental weakness of the standard theory, that it postulates the measurability of operators but does not give directions as to how the measurement should be carried out.“¹¹

6.3 Kritiken und Konsequenzen

6.3.1 Versteckte Parameter

Ein leider immer noch gern zitiertes Argument gegen Theorien, die versuchen, die Quantenmechanik auf statistische Parameter zurückzuführen, ist ein von Johann von Neumann 1932 bewiesener Satz [10].

Dieser besagt, dass es keine Theorie gibt, die – zusätzlich zur Wellenfunktion – noch weitere („versteckte“) Parameter enthält, welche die experimentell gefundenen Ergebnisse festlegen. Der „reine“ Zufall, wie er in der Standardinterpretation der Quantenmechanik auftritt, kann damit nicht auf deterministische Mechanismen (in unserem Fall also auf Streuung an virtuellen Teilchen) zurückgeführt werden.

Es hat sich später herausgestellt, dass der Beweis von v. Neumann auf falschen Annahmen beruht.¹² So geht J. S. Bell sogar soweit zu sagen [11]: „The proof of von Neumann is not merely false, but foolish.“¹³

Trotzdem scheint sich dieser Beweis hartnäckig in vielen Argumentationen zu halten und stempelt damit alle Versuche von vornherein ab, die Quantenmechanik deterministisch erklären zu wollen.

Ein Grund für dieses wiederkehrende Thema mag sein, dass im Gegensatz zum v. Neumannschen Ausschluss jeglicher verborgener Parameter tatsächlich sogenannte

11 Übersetzt: „All dies sind konkrete und klare Hinweise auf die Grenzen der Messbarkeit von Operatoren. Sie sollten allerdings nicht von einer viel fundamentaleren Schwäche der Standardtheorie ablenken, dass sie nämlich die Messbarkeit von Operatoren postuliert, aber keine Anleitung dafür gibt, wie man denn die Messung ausführen sollte.“

12 Von Neumann fordert im Wesentlichen, dass eine eindeutige Zuordnung zwischen Observablen und den quantenmechanischen Operatoren bestehen soll. Diese Forderung ist jedoch physikalisch nicht motivierbar.

13 Übersetzt: „Der Beweis von v. Neumann ist nicht nur falsch, sondern töricht.“