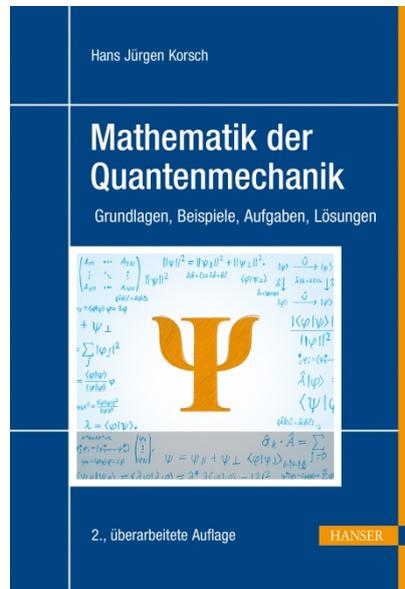


HANSER



Leseprobe

zu

„Mathematik der Quantenmechanik“

von Hans Jürgen Korsch

ISBN (Buch): 978-3-446-46226-7

ISBN (E-Book): 978-3-446-46255-7

Weitere Informationen und Bestellungen unter
<http://www.hanser-fachbuch.de/9783446462267>

sowie im Buchhandel

© Carl Hanser Verlag, München

Vorwort

Die Quantenmechanik steht im Zentrum der heutigen Physik und ist unbestritten die erfolgreichste physikalische Theorie überhaupt. Die Quantenwelt unterscheidet sich allerdings fundamental von der Welt unserer täglichen Erfahrungen und es ist nicht sehr klug, sich auf die Intuition oder den gesunden Menschenverstand zu verlassen. Hier hilft die Mathematik und liefert ein solides Fundament, auf dem man aufbauen kann. Es ist meine persönliche Überzeugung, dass man ohne ein Minimum an mathematischen Kenntnissen keine Chance hat, die Quantenmechanik auch nur ansatzweise zu 'verstehen', was auch immer das bedeuten mag.

Bei den benötigten mathematischen Werkzeugen und Strukturen handelt es sich zunächst einmal um die hier unverzichtbaren komplexen Zahlen, die auf der mysteriösen Zahl i aufbauen. Diese *imaginäre Einheit* ergibt, mit sich selbst multipliziert, die Zahl -1 , was für unsere bekannten Zahlen unmöglich ist. Diese komplexen Zahlen spielen eine fundamentale Rolle in der Beschreibung unserer Welt auf kleinsten Skalen: Die quantenmechanischen Wellenfunktionen ψ sind *komplexe Größen*. Aber nicht nur merkwürdige Zahlen werden benötigt, sondern auch andere gewöhnungsbedürftige Objekte, mit denen man rechnen kann. Ein Beispiel ist der *Differentialoperator* d , die Ableitung nach der Variablen x , also $d = \frac{d}{dx}$. Wendet man diesen Operator auf eine Funktion $f(x)$ an, dann wird diese Funktion differenziert: $df = \frac{df}{dx}$. Das erscheint klar, genauso wie die zweimalige Anwendung $d^2 = dd$ als zweite Ableitung. Weitaus weniger einsichtig ist es aber, dass dieser Operator eine physikalische Größe beschreibt, die uns sehr gut bekannt sein sollte. Er liefert in der Quantenmechanik eine Darstellung des Impulses p eines Teilchens, klassisch einfach das Produkt aus Masse und Geschwindigkeit, durch die Ableitung nach der Ortsvariablen x , genauer durch $p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$. Neben der quantenmechanischen Naturkonstanten \hbar tritt hier wieder die allgegenwärtige imaginäre Einheit i auf. Um das einzusehen, benötigt man geeignete mathematische Hilfsmittel, die in diesem Buch vermittelt werden sollen.

In der traditionellen Theoretischen Quantenphysik wurde die benötigte Mathematik parallel mitentwickelt, wobei man im Idealfall Vorkenntnisse aus der Linearen Algebra nutzen konnte. In den letzten Jahren war allerdings die Tendenz zu beobachten, in den Lehrveranstaltungen zur Physik eine zeitlich stark reduzierte Quantentheorie anzubieten. Das trifft insbesondere den Bachelor Studiengang Physik und die Bachelor-Master Studiengänge Lehramt Physik oder Biophysik. Hier bleibt nur noch wenig Zeit für die mathematischen Grundlagen. Erfahrungsgemäß ist es den Studierenden kaum möglich, sich diese Kenntnisse selbstständig anzueignen, da hier keine entsprechende Literatur vorhanden ist. Dieses Buch will die Lücke schließen und eine Brücke schlagen zwischen den Lehrveranstaltungen zur Quantenphysik und dem mathematischen Grundwissen aus der Schule und aus den Anfängervorlesungen der Physik.

Der vorliegende Text ist aus Lehrveranstaltungen an der TU Kaiserslautern hervorgegan-

gen. Der Autor dankt den vielen hilfreichen Kommentaren der Teilnehmer an diesen Kursen. Besonders Sabine Müller und Christian Geyer haben sich hier hervorgetan und mit vielen Verbesserungsvorschlägen zum Gelingen beigetragen, genau wie meine Tochter Franziska, die sich (als Psychologin) darum bemüht hat, dass der Text auch Lesern verständlich ist, die sich nicht unbedingt zu den Freunden der Mathematik zählen.

Kaiserslautern, Februar 2013

Hans Jürgen Korsch

Für die zweite Auflage wurde der Text unter Berücksichtigung der Hinweise und Vorschläge der Leser der ersten Auflage gründlich durchgesehen und ergänzt. Vielen Dank an alle, die auf Fehler und Unklarheiten hingewiesen haben, insbesondere an Simon Zöller für seine umfangreiche Errata-Liste. Neu hinzugefügt wurde unter anderem ein Glossar, in dem wichtige Begriffe kurz erklärt werden. Zum bequemen Zugang zu weiteren Information bei einer E-Buch Lektüre wurden diese Begriffe direkt mit den entsprechenden Wikipedia-Seiten verlinkt.

Sicherlich haben sich auch in den vorliegenden Text noch Fehler eingeschlichen. Hinweise und Verbesserungsvorschläge bitte an h.j.korsch@gmail.com. Eine aktuelle Korrekturliste und weitere Informationen findet man unter <https://www.hanser-fachbuch.de>. Mein Dank gilt auch dem Hanser-Verlag für die freundliche Aufnahme des Buches und die hilfreiche Unterstützung.

Kaiserslautern, Juli 2019

Hans Jürgen Korsch

1

Einführung

Es ist das Ziel dieses Buches, die grundlegenden mathematischen Begriffe und Methoden zu vermitteln, die für ein Verständnis der Quantenmechanik notwendig sind. Dabei vorausgesetzte **mathematische Vorkenntnisse** entsprechen in etwa dem mathematischen Grundkurs zur Physik, wie er beispielsweise in dem Buch

- H. J. Korsch: „**Mathematische Ergänzungen zur Einführung in die Physik**“ (Binomi-Verlag, 4. Aufl. 2007).

dargestellt ist. Verweise auf dieses Buch sind im folgenden Text durch „ME“ gekennzeichnet.

Zu hohe mathematische Präzision erschwert die Lesbarkeit eines Textes. Deshalb wird hier zwar nicht auf ein mathematisch korrektes Vorgehen verzichtet, es wird aber nicht zum Hauptanliegen gemacht. Beispielsweise werden Beweise dann gebracht, wenn sie zum Verständnis beitragen. Es wird aber kein Wert darauf gelegt, jedes Detail lückenlos herzuleiten. Auch wurde soweit wie möglich gegen die Versuchung angekämpft, eine gewisse Vollständigkeit der behandelten Themen zu erreichen. Kurz, dies ist *kein* Mathematikbuch.

Es handelt sich aber auch *nicht* um eine Einführung in die Quantenphysik. Es wird zwar fast durchgängig über quantenmechanische Probleme gesprochen, aber hauptsächlich zur Illustration und Einübung des mathematischen Formalismus und der mathematischen Methoden. Wenn der Leser dabei etwas über die Quantenwelt lernt, so ist das erfreulich und sicher auch nützlich für eine weitere ausführliche Einführung in die Quantentheorie.

Unsere „**Mathematik der Quantenmechanik**“ gliedert sich in die folgenden Abschnitte:

Grundlagen

Klassische Physik und Quantenphysik verwenden unterschiedliche Sprachen um die Systeme der realen Welt zu beschreiben, insbesondere in ihrer Beschreibung durch die Mathematik. Dieses Kapitel führt in die abstrakte mathematische Formulierung der Quantenmechanik ein und motiviert die folgenden Ausflüge in die Welt der linearen Algebra. Dabei werden wir uns auf mathematische Vorkenntnisse stützen, die im letzten Abschnitt dieses Kapitels kurz vorgestellt werden.

Lineare Räume und lineare Operatoren

In diesem Kapitel werden wir den mathematischen Formalismus der Quantentheorie vorstellen. Dieser Formalismus ist abstrakt und erscheint zunächst noch ohne Bezug zur Physik. Das wird sich später ändern, wenn wir mit unseren neu erworbenen Kenntnissen den kurzen Entwurf einer Quantenwelt aus dem ersten Kapitel genauer ansehen. Wir wollen es uns zunächst einfach machen und uns auf Systeme beschränken, die mit einer endlich dimensionalen Beschreibung auskommen. Allerdings werden wir unsere reelle Zahlenwelt auf komplexe Zahlen und Funktionen erweitern müssen. Zuerst werden wir die grundlegende mathematische Struktur kennenlernen: Das ist der *Hilbert-Raum*, ein linearer Raum über den komplexen Zah-

len mit einem Skalarprodukt. Danach werden wir uns mit linearen Abbildungen des Hilbert-Raums auf sich selbst beschäftigen, also den *linearen Operatoren* und einige ihrer Eigenschaften kennenlernen.

Lineare Operatoren und Hilbert-Räume

Die linearen Operatoren aus dem vorangehenden Kapitel sind in der Quantenmechanik von großer Bedeutung. Hermitesche Operatoren beschreiben physikalische Größen, man bezeichnet sie als *Observable*. Unitäre Operatoren beschreiben die Zeitentwicklung eines Systems. Hier werden wir zunächst die Eigenwerte und Eigenvektoren der Operatoren kennenlernen. Mit ihrer Hilfe kann man die Messung von Observablen sehr bequem beschreiben und die zu erwartenden Werte bei einer Messung sowie die Wahrscheinlichkeiten ihres Auftretens berechnen. Wir werden lernen, verträgliche und nichtverträgliche Observable zu unterscheiden, und werden mit der Unschärferelation vertraut gemacht. Zum Abschluss dieses Kapitels werfen wir noch einen kurzen Blick auf die etwas anspruchsvollere mathematische Theorie unendlich dimensionaler Hilberträume und ihre wichtige Rolle in der Quantenmechanik.

Quantenmechanik – ein kurzer Überblick

In diesem Kapitel kommen wir auf die physikalische Interpretation der mathematischen Strukturen zurück und werden an einigen ausgewählten Beispielen zeigen, wie wir die bisher erworbenen mathematischen Techniken auf die Beschreibung von Quantensystemen anwenden können. Wir üben hier den Umgang mit dem mathematischen Apparat an einfachen Beispielen, die auch in der Quantenphysik eine wichtige Rolle spielen. Dieses Kapitel ersetzt aber in keiner Weise einen Kurs in Quantenmechanik!

Spezielle Funktionen

In diesem Kapitel werden einige wichtige Funktionen der Mathematischen Physik vorgestellt. Solche Funktionen sind in der Quantentheorie in mehrfacher Hinsicht von Bedeutung: Einmal erscheinen sie in Form von analytischen Lösungen einfacher physikalischer Probleme, wie beispielsweise die Hermite-Funktionen als Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators. Zum anderen liefern diese Funktionen eine bequeme Basis des Hilbert-Raums. Eine solche Basis kann man verwenden, um andere Probleme darzustellen und dann als Matrixgleichungen zu behandeln. Beides haben wir am Beispiel der Hermite-Funktionen im vorangehenden Kapitel kurz vorgestellt.

Elemente der Gruppentheorie

In vielen physikalischen Überlegungen oder Theorien spielen Symmetrien eine wichtige Rolle. Eine ganz besondere Bedeutung haben diese Symmetrien in der Quantentheorie. Da die Symmetrieeigenschaften eines Systems zweckmäßig mit dem mathematischen Apparat der Gruppentheorie beschrieben werden, ist es wichtig, dass wir in dieser kurzen Einführung in die Mathematik der Quantenmechanik auch einen Ausflug in die Gruppentheorie unternehmen. Diese Theorie ist recht abstrakt ebenso wie ihre Resultate und ihre Anwendungen in der Quantentheorie sind für den Anfänger nicht leicht verständlich. Wir möchten hier trotzdem einen ersten Eindruck vermitteln.

Rechen- und Näherungsmethoden

Die Darstellung in den vorangehenden Kapiteln könnte den Eindruck hervorgerufen haben, dass die Rolle mathematischer Methoden in der Quantenmechanik darin besteht, auf mehr oder weniger elegante Art die exakte mathematische Lösung eines quantenmechanischen Problems zu ermitteln. Das ist aber *nicht* der Fall. Ganz im Gegenteil: Probleme mit einer exakten, geschlossen formulierbaren Lösung sind extrem selten und hauptsächlich in den Lehrbüchern zu finden. Dort liefern sie in allen möglichen Variationen eine Basis für Beispiele und Übungsaufgaben. Ein typisches, *realistisches* Problem der Quantenmechanik lässt sich nur näherungsweise oder numerisch lösen. Dazu wurde eine unübersehbare Vielzahl von Methoden entwickelt. Einige typische Beispiele solcher Techniken sollen hier vorgestellt werden.

Ergänzungen und Mathematische Details

Der Anhang enthält eine kurze Darstellung von Teilgebieten der Mathematik, die in der Quantenmechanik wichtig sind, wie beispielsweise die elementare Wahrscheinlichkeitstheorie, die Potenzreihenentwicklung der Lösungen von linearen Differentialgleichungen und die Fourier-Transformation. Außerdem wurden einige speziellere mathematische Details, die im Text den Lesefluss beeinträchtigt hätten, in die letzten Abschnitte des Anhangs ausgelagert.

Glossar

In diesem Glossar werden wichtige Begriffe kurz erläutert. In direkter Link auf die entsprechenden Wikipedia-Seiten ermöglicht dem Leser bei einer E-Buch Lektüre einen direkten Zugang zu weiterer Information.

Unsere Darstellung erscheint sicherlich vielen Lesern ein wenig (oder sogar sehr) *mathematisch*, und damit ist leider meist ein negativer Beigeschmack verbunden. Aber diese Mathematik ist notwendig und nützlich. Man sollte sich die Mühe machen und mit einiger Geduld auch längere Umformungen und logische Gedankenketten nachvollziehen. Dann wird man allmählich lernen, mathematische Formeln in ähnlicher Weise zu lesen und zu verstehen, wie man Prosatexte liest und versteht.

In den **Beispielen** im Text findet man zusätzliches Material (meist aus dem Umfeld der Quantenmechanik) mit oft recht ausführlichen Rechnungen. Hier hängt es von den Vorkenntnissen des Lesers ab, ob er diese erläuternden Beispiele nur überfliegt, oder ob er die Details sorgfältig durcharbeitet.

Die vielen eingestreuten **Aufgaben** verfolgen ein doppeltes Ziel: Einmal enthalten sie zusätzliches Material, auf das weiter hinten im Text zurückgegriffen wird, und zweitens sollen sie helfen, die vorgestellten Techniken an einem relativ einfachen und klar formulierten Problem zu erproben. Es ist in jedem Fall wünschenswert, diese Aufgaben *selbstständig* zu lösen. Nur zur Kontrolle sollte man auf die ausgearbeiteten **Lösungen** am Ende jedes Kapitels zurückgreifen.

Am Schluss des Buches findet man **mathematische Bezeichnungen und Symbole** aus diesem Buche aufgelistet mit einem Verweis auf die Seite, auf der sie erstmals auftreten und erklärt werden. Da in der Quantenmechanik häufig von griechischen Buchstaben Gebrauch gemacht wird, sollte auch das dort angegebene **griechische Alphabet** nützlich sein.

Einige Abschnitte enthalten Material, das zwar in der Quantenmechanik wichtig ist, jedoch nicht von zentraler Bedeutung. Solche Abschnitte sind mit einem * gekennzeichnet und können bei einer ersten Durchsicht des Textes übersprungen werden. Das gilt insbesondere für die Abschnitte, die durch ein ** gekennzeichnet sind.

2

Grundlagen

Klassische Physik und Quantenphysik verwenden unterschiedliche Sprachen um die Systeme der realen Welt zu beschreiben, insbesondere in ihrer Beschreibung durch die Mathematik. Dieses Kapitel führt in die abstrakte mathematische Formulierung der Quantenmechanik ein und motiviert die folgenden Ausflüge in die Welt der linearen Algebra. Dabei werden wir uns auf mathematische Vorkenntnisse stützen, die im letzten Abschnitt dieses Kapitels kurz vorgestellt werden.

■ 2.1 Die Sprache der Physik

Als „Klassische Physik“ bezeichnet man traditionell die Gebiete der Klassischen Mechanik, Elektrodynamik und Thermodynamik. Zum Verständnis der hier vermittelten Theorien reicht in aller Regel der *gesunde Menschenverstand* aus, was auch immer man darunter versteht, und zur Beschreibung der Phänomene und der Theorien genügt unsere alltägliche Sprache. Vor etwa hundert Jahren zeigte es sich dann, dass diese simple Vorstellung trügerisch ist. Sobald man in neue extreme Bereiche vorstieß, wurde die Welt überraschend anders als erwartet. Man konnte die alten Vorstellungen nicht einfach extrapolieren.

Für große Geschwindigkeiten versagte die klare und selbstverständliche Trennung von Raum und Zeit und man musste ein Raum-Zeit-Kontinuum akzeptieren, beschrieben durch die Spezielle Relativitätstheorie. Für große Skalen wurde der Raum durch große Massen gekrümmt, beschrieben durch die Allgemeine Relativitätstheorie. Auf sehr kleinen Skalen schließlich wurde die Welt völlig unverständlich. In dem Buch „*Der Zauberberg*“ von Thomas Mann konnte Hans Castorp noch davon träumen, dass die Welt im Kleinen der Welt im Großen ganz ähnlich war, nur eben viel kleiner:

„Das Atom war ein energiegeladenes kosmisches System, worin Weltkörper rotierend um ein sonnenhaftes Zentrum rasten und durch dessen Ätherraum mit Lichtgeschwindigkeit Kometen fuhren, welche die Kraft des Zentralkörpers in ihre exzentrischen Bahnen zwang.“

Ja, konnte er es sogar spielerisch wagen

„... zu denken, daß gewisse Planeten des atomischen Sonnensystems – dieser Heere und Milchstraßen von Sonnensystemen, die die Materie aufbauten –, daß also einer oder der andere dieser innerweltlichen Weltkörper sich in einem Zustande befand, der demjenigen entsprach, der die Erde zu einer Wohnstätte des Lebens machte?“

Inzwischen wissen wir, dass die Welt auf kleinen Maßstäben eben *nicht* so ist. Sie ist *kein* verkleinertes Abbild der Welt auf unseren Skalen, sondern ganz anders. Aber wie? Hier reicht die Beschreibung durch unsere gewohnte Alltagssprache nicht aus. Diese Sprache ist zu sehr an

unserer gewohnten Umgebung und unserem Denken orientiert. Ludwig Wittgenstein hat einmal gesagt „*Die Grenzen meiner Sprache bedeuten die Grenzen meiner Welt.*“ Wir müssen unsere sprachlichen Möglichkeiten erweitern, wenn wir die Welt im Kleinen beschreiben wollen. In diesem Buch haben wir es mit der Theoretischen Physik zu tun. Sie verwendet großzügig die Sprache der Mathematik. Ja, man sagt sogar Mathematik sei *die* Sprache der Physik, allerdings verknüpft mit unserer real existierenden Welt. Unser Anliegen ist es hier, in diese mathematische Sprache einzuführen ohne den jeweiligen physikalischen Kontext zu vergessen. In den folgenden Abschnitten werfen wir einen kurzen Blick auf die Klassische Mechanik und die Quantenmechanik im Hinblick auf ihre mathematischen Methoden.

■ 2.2 Klassische Mechanik

In der klassischen Mechanik muss die Theorie das Zeitverhalten eines physikalischen mechanischen Systems beschreiben. Solche physikalischen Systeme sind beispielsweise eine Anzahl von Teilchen, die miteinander wechselwirken, oder ein schwingendes Pendel. Als mathematisches Werkzeug benötigen wir unter anderem die Analysis und die Theorie der gewöhnlichen Differentialgleichungen. Teilchen werden als Massenpunkte idealisiert, die man jeweils durch einen Ortsvektor \vec{x} beschreibt, der sich zeitlich mit einer Geschwindigkeit $\dot{\vec{x}} = d\vec{x}/dt$ verändert. Die Bahn eines Teilchens mit einer Masse m im Raum, also die Kurve $\vec{x}(t)$, wird bestimmt durch eine Differentialgleichung, die newtonsche Bewegungsgleichung

$$m\ddot{\vec{x}} = \vec{F}(\vec{x}, t). \quad (2.1)$$

Hier wird die Beschleunigung $\ddot{\vec{x}} = d^2\vec{x}/dt^2$ durch eine Kraft \vec{F} bewirkt, genauer ein Kraftfeld, das vom Ort \vec{x} abhängt und eventuell auch explizit von der Zeit t . Andere dynamische Größen, wie der Impuls $\vec{p} = m\dot{\vec{x}}$ oder der Drehimpuls $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$ werden daraus abgeleitet. Die Bewegungsgleichungen (2.1) muss man für eine vorgegebene Anfangsbedingung lösen. Aus der Theorie der Differentialgleichungen weiß man, dass dazu in der Regel die Kenntnis von Ort $\vec{x}_0 = \vec{x}(t_0)$ und Geschwindigkeit $\dot{\vec{x}}_0 = \dot{\vec{x}}(t_0)$ zu einer Zeit t_0 ausreichen. Die Lösung liefert dann die Bahn $\vec{x}(t)$ für alle Zeiten.

Entsprechend lassen sich auch Systeme mehrerer oder vieler Teilchen beschreiben und in den Erweiterungen der Lagrange- oder Hamilton-Mechanik auch allgemeinere mechanische Systeme. Wir werden sehen, dass in der Quantenmechanik die adäquate mathematische Sprache eine völlig andere ist. Vorher aber wollen wir uns ein einfaches Beispiel der Newton-Mechanik mit nur einem Freiheitsgrad etwas näher ansehen.



Beispiel 2.1 Der harmonische Oszillator, eine Masse m , auf die eine lineare Kraft $F(x) = -kx$ mit $k > 0$ wirkt, wird durch die Bewegungsgleichung

$$m\ddot{x} = -kx \quad (2.2)$$

beschrieben. Aus der Schulphysik ist uns sicher noch im Gedächtnis geblieben, dass man dadurch die Schwingung einer Masse an einer Spiralfeder verstehen kann, sicher kein sehr aufregendes System. Bevor wir uns in mathematische Einzelheiten verlieren, sollten wir uns deshalb davon überzeugen, dass dieser harmonische Oszillator ein wirklich wichtiges System darstellt. Dazu überlegen wir uns, dass man jede Kraft $F(x)$ um eine Gleichgewichts-

lage mit $F = 0$ in eine Potenzreihe entwickeln kann. Wenn wir die Gleichgewichtslage als $x = 0$ wählen, ergibt sich für kleine Auslenkungen mit $F(x) \approx F'(0)x$ die Bewegungsgleichung (2.2), wobei wir die Konstante k mit der negativen Ableitung der Kraft bei $x = 0$ identifizieren: $k = -F'(0)$. Also ist *jede* Bewegung in der Umgebung einer Gleichgewichtslage harmonisch. Zur Lösung der Bewegungsgleichung dividieren wir durch die Masse und erhalten

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \quad \text{mit} \quad \omega^2 = k/m. \quad (2.3)$$

Hier können wir zwei Lösungen erraten, nämlich die Funktionen $x_1(t) = \sin(\omega t)$ und $x_2(t) = \cos(\omega t)$. Aber mehr noch, wir können auch zeigen, dass die Funktion

$$x(t) = a_1 x_1(t) + a_2 x_2(t) = a_1 \sin(\omega t) + a_2 \cos(\omega t) \quad (2.4)$$

mit beliebigen Konstanten a_1 und a_2 die Bewegungsgleichung löst. Diese Aussage, ein *Superpositionsprinzip*, ist ein wichtiges Resultat und man sollte das einmal im Leben durch eine kurze Rechnung überprüfen! Die Ursache liegt darin, dass die Bewegungsgleichung des harmonischen Oszillators **linear** ist. Man bezeichnet dann einen Ausdruck wie (2.4) als eine **Linearkombination** der beiden Lösungen $x_1(t)$ und $x_2(t)$.

Wir wollen uns noch kurz davon überzeugen, dass wir auf diese Weise die *allgemeine* Lösung der Bewegungsgleichung erhalten haben. Das soll heißen: Wir können durch eine geeignete Wahl der Konstanten a_1 und a_2 jede beliebige vorgegebene Anfangsbedingung $x_0 = x(t_0)$ und $v_0 = \dot{x}(t_0)$ erfüllen. Die Linearkombination (2.4) führt dann auf die linearen Gleichungen

$$x_0 = a_1 \sin(\omega t_0) + a_2 \cos(\omega t_0) \quad (2.5)$$

$$v_0 = \omega a_1 \cos(\omega t_0) - \omega a_2 \sin(\omega t_0) \quad (2.6)$$

mit der Lösung

$$a_1 = x_0 \sin(\omega t_0) + \frac{v_0}{\omega} \cos(\omega t_0), \quad a_2 = x_0 \cos(\omega t_0) - \frac{v_0}{\omega} \sin(\omega t_0). \quad (2.7)$$

Die Anfangsbedingung ist also erfüllbar. Außerdem können wir uns vergewissern, dass jede Lösung beschränkt bleibt, denn sicher gilt $|x(t)| \leq |a_1| + |a_2|$, sodass unsere Anfangsannahme einer kleinen Auslenkung bei der Entwicklung um die Gleichgewichtslage nicht mit wachsender Zeit verletzt wird. Das wäre beispielsweise anders für den Fall einer instabilen Gleichgewichtslage mit $k < 0$. In ganz ähnlicher Weise kann man für ein mehrdimensionales System vorgehen und die Bewegungsgleichungen um eine Gleichgewichtslage linearisieren.



Die linearen Bewegungsgleichungen sind also recht einfach, ganz im Gegensatz zu dem allgemeinen Fall. Hier sind die Bewegungsgleichungen *nichtlinear* und ihre Lösungen, die klassischen Bahnen, typischerweise chaotisch. Dann gilt immer noch, dass jede Bahn eindeutig durch ihre Anfangsbedingungen festgelegt ist, aber die meisten Bahnen sind extrem instabil. Kleine Änderungen in den Anfangsbedingungen führen zu großen Änderungen der Bahn, sodass langfristig nur Wahrscheinlichkeitsaussagen möglich sind, denn eine präzise Angabe der Anfangsbedingungen ist in der Regel unmöglich.

Wir halten fest: Der Zustand eines Systems wird beschrieben durch die Angabe der Orte und der Geschwindigkeiten oder, wenn wir sie nicht genau kennen, durch ihre Wahrscheinlichkeitsverteilung. Die Zeitentwicklung folgt den klassischen Bewegungsgleichungen.

■ 2.3 Quantenmechanik

Traditionelle einführende Kurse zur Quantenmechanik folgen meist ihrer historischen Entwicklung. Sie beginnen mit wichtigen bahnbrechenden Experimenten, deren Ergebnisse mit den bekannten klassischen Theorien nicht erklärt werden können. Typisch sind hier eine Diskussion des photoelektrischen Effekts, der diskreten Emissions- und Absorptionsspektren der Atome, der Frequenzabhängigkeit der Strahlung eines schwarzen Körpers oder des Verhaltens eines Teilchens mit „Spin“ beim Durchlaufen eines inhomogenen Magnetfeldes.

Dabei wird die klassische Beschreibung dieser Prozesse schrittweise korrigiert und gezeigt, dass einschneidende Veränderungen der alten, klassischen Vorstellungen notwendig sind. Parallel dazu wird eine theoretische Beschreibung der so entstehenden Quantenmechanik entwickelt, also eine mathematische Theorie, die auch quantitative Aussagen und Vorhersagen erlaubt. An zentraler Stelle erster Einführungen in die Quantenphysik steht der Wellen-Teilchen-Dualismus. Er bedeutet beispielsweise für Elektronen, dass diese sowohl als Welle als auch als Teilchen aufgefasst werden können, wobei man geschickt das jeweils am besten „passende“ Bild auszuwählen hat. Diese Vorgehensweise kann zu Fehlvorstellungen führen. Deshalb möchten wir sie im folgenden kritisch hinterfragen.

Die mathematische Modellierung von Quantensystemen stützt sich in einführenden Kursen fast ausschließlich auf die **Schrödinger-Gleichung** für die **Wellenfunktion** in der Ortsdarstellung. Diese Gleichung wird dabei natürlich motiviert und erläutert, auch im historischen Kontext, und dann für ausgewählte Beispiele gelöst. Wir wollen uns diese Gleichung einmal ansehen. Für den einfachsten Fall eines einzelnen Teilchens mit Masse m , das sich in einer einzigen Raumdimension mit Koordinate x in einem Potential $V(x)$ bewegt, lautet sie

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t). \quad (2.8)$$

Das ist eine partielle Differentialgleichung für die Wellenfunktion $\psi(x, t)$. Sie ist *linear*, das heißt es gilt wieder das Superpositionsprinzip, das wir schon in Beispiel 2.1 für den klassischen harmonischen Oszillator kennengelernt haben: Jede Linearkombination zweier Lösungen ist wieder eine Lösung. Außerdem ist ihre Struktur uns (hoffentlich) nicht völlig fremd, denn ganz ähnliche Gleichungen haben wir in der Klassischen Physik als Wellengleichung und Diffusionsgleichung kennengelernt. Erstaunlich ist hier das Auftreten des Faktors i , der imaginären Einheit. Dadurch wird die Lösungsfunktion $\psi(x, t)$ automatisch komplex. Das ist merkwürdig, denn in der Klassischen Physik sind reelle Größen die Regel. Komplexe Größen tauchen zwar auch gelegentlich auf, werden aber nur eingesetzt, um mathematische Operationen zu erleichtern, wie zum Beispiel bei der Behandlung des angetriebenen und gedämpften harmonischen Oszillators oder bei der Fourier-Transformation. Außerdem taucht in der Gleichung eine neue Naturkonstante \hbar auf, das *plancksche Wirkungsquantum* h dividiert durch 2π : $\hbar = h/2\pi$.

Einige Punkte müssen dann nach Einführung der Schrödinger-Gleichung noch genauer abgehandelt werden:

(•) Die Wellenfunktion muss *interpretiert* werden. Es muss erklärt werden, was genau die Größe $\psi(x, t)$ bedeutet, und es muss begründet werden, warum das Betragsquadrat $|\psi(x, t)|^2$ als eine Wahrscheinlichkeitsdichte zu verstehen ist. Genauer ausgedrückt: $|\psi(x, t)|^2 dx$ ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t in einem Intervall zwischen x und $x + dx$ zu finden.

Das Integral

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2, \quad (2.9)$$

die **Normierung** der Wellenfunktion, ist also die Gesamtwahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen überhaupt irgendwo zu finden. Die Normierung N hat dementsprechend immer den Wert eins, da das Teilchen nach Voraussetzung existiert. Die Wellenfunktion muss deshalb normierbar sein.¹ Man kann zeigen, dass die Normierung zeitlich erhalten bleibt, wenn sich die Wellenfunktion gemäß der Schrödingergleichung zeitlich verändert.

(•) Die Schrödinger-Gleichung muss gelöst werden. Für eine gegebene Funktion zu einer Zeit t_0 , also $\psi(x, t_0)$, muss eine Funktion $\psi(x, t)$ ermittelt werden, die die Gleichung (2.8) erfüllt. Das gelingt in einfachen Fällen analytisch, wie beispielsweise für ein freies Teilchen (also für $V(x) = 0$), wenn diese Lösung auch nicht unbedingt 'schön' aussieht. Mehr darüber findet sich in Abschnitt 5.5.

In anderen Fällen kann man sich mit einem Separationsansatz

$$\psi(x, t) = f(t) \varphi(x) \quad (2.10)$$

weiterhelfen. Das führt auf die Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + V(x) \varphi(x) = E \varphi(x). \quad (2.11)$$

für den Ortsanteil $\varphi(x)$, die **zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung**. Normierbare Lösungen $\varphi(x)$ gibt es nur für bestimmte Werte des Parameters E , also beispielsweise für diskrete Werte E_n mit $n = 0, 1, \dots$. Für den Zeitanteil in (2.10) erhält man dann $f(t) = e^{-iEt/\hbar}$. Das wird in Abschnitt 5.5 näher erläutert. Die Gesamtlösung ergibt sich als Linearkombination der Produkte der separablen Lösungen:

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(x). \quad (2.12)$$

Die Linearität der Wellenfunktion gewährleistet hierbei die Existenz dieser Lösung. Außerdem kann man zeigen, dass man durch eine geeignete Wahl der Koeffizienten c_n die Anfangsbedingung $\psi(x, t_0)$ zur Zeit t_0 erfüllen kann.

Sehr viel an diesem Vorgehen beruht auf Komponenten, die bekannt sind, und die in ähnlicher Weise auch in anderen Problemkreisen benutzt werden, beispielsweise zur Lösung der klassischen Wellengleichung. Auch kann man das gleiche Vorgehen auf zwei und drei Raumdimensionen übertragen.

Danach wird in der Quantenmechanik meist darauf hingewiesen, dass dieses Wellenmodell letztlich doch nicht richtig ist, weil – im Gegensatz zu Wasserwellen oder elektromagnetischen Wellen – der Teilchencharakter deutlich in Erscheinung treten kann. Beispielsweise wird immer ein einzelnes Teilchen in dem Detektor nachgewiesen. Außerdem kann man der Frage nachgehen, was mit der ganzen Wellenfunktion passiert, wenn man das Teilchen irgendwo gemessen hat (Stichwort: „Kollaps der Wellenfunktion“). Das Ganze liefert dann den bekannten Themenkreis „*Dualismus zwischen Welle und Teilchen*“.

Dieses Vorgehen ist nicht falsch, aber problematisch. Insgesamt erscheint der ganze Aufbau eigentümlich plausibel, nach einiger Eingewöhnung auch ganz verständlich und sogar anschaulich.

¹ Wenn das Integral überhaupt existiert, lässt sich wegen der Linearität der Schrödinger-Gleichung jede nicht normierte Lösung durch Multiplikation mit einem Faktor normieren.