

SAMMLUNG UND PHYSIKALISCHES MUSEUM  
B.PHY.5003.MP

**Quantenmechanik und Spektroskopie**

**Seminar-Arbeit**

eingereicht bei

Prof. Dr. Markus Münzenberg  
Fakultät für Physik  
I. Physikalisches Institut  
Georg-August-Universität Göttingen

von

David Storch  
Schildweg 3  
37085 Göttingen

Abgabedatum: 02.10.2012

*The necessity for a departure from classical mechanics is clearly shown by experimental results. In the first place the forces known in classical electrodynamics are inadequate for the explanation of the remarkable stability of atoms and molecules, which is necessary in order that materials may have any definite physical and chemical properties at all.*

(P. A. M. DIRAC, *The Principles of Quantum Mechanics*, 4. Ed., 1958, S. 1)

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Die Goldenen Zwanziger</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Die Entwicklung der ersten Quantentheorien</b>	<b>1</b>
2.1	Schwarzkörperstrahlung . . . . .	2
2.2	Der lichtelektrische Effekt . . . . .	2
2.3	Rutherfordsches und Bohrsches Atommodell . . . . .	3
2.4	Bohr-Sommerfeldsches Atommodell . . . . .	6
2.5	De Broglies Hypothese . . . . .	7
2.6	Krise der älteren Quantentheorien . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Die Göttinger Quantenmechanik von 1925</b>	<b>8</b>
3.1	Heisenbergs Matrizenmechanik . . . . .	8
3.2	Schrödingers Wellenmechanik . . . . .	10
3.3	Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation . . . . .	11
<b>4</b>	<b>Post-1925 Ära</b>	<b>11</b>
<b>5</b>	<b>Resümee</b>	<b>12</b>
	<b>Literatur</b>	<b>IV</b>

# 1 Die Goldenen Zwanziger

Deutschland im Zeitalter der *Goldenen Zwanziger* - dieser Begriff bezeichnet die Phase des wirtschaftlichen Aufschwungs der weltweiten Konjunktur in den 1920er Jahren, von dem insbesondere das unter den Nachkriegsfolgen des Ersten Weltkriegs leidende Deutschland profitierte. Während die Jahre 1918 bis 1923 noch von Hungersnot, Arbeitslosigkeit, Krankheit und insbesondere Inflation geprägt waren, begann in den Folgejahren mit einer Währungsreform und der Einführung des DAWES und YOUNG Plans eine neue Ära, in der nicht nur die Wirtschaft prosperierte, sondern auch die deutsche Kunst, Kultur und Wissenschaft begannen aufzublühen.

Es ist genau diese Zeit, in der sich Göttingen zum Zentrum der wissenschaftlichen Welt auftut und den Beginn eines neuen Zeitalters der *Modernen Physik* einläutet. Max BORN, Werner HEISENBERG und Pascual JORDAN begründen eine neue mathematisch-physikalische Theorie - die sog. *Quantenmechanik* - mit deren Hilfe die mathematische Beschreibung physikalischer Phänomene im subatomaren Größenbereich möglich wird.

Die klassische Mechanik nach NEWTON erlaubt es, mithilfe eines Satzes geeigneter Anfangsbedingungen die Bewegung makroskopischer Körper sowohl in der Zukunft als auch der Vergangenheit deterministisch vorherzusagen:

$$m_k \ddot{\vec{x}}_k = \vec{F}_k(\vec{x}_{12}, \vec{x}_{13}, \dots) \quad (1)$$

$m_k$  beschreibt die Punktmasse des  $k$ -ten Körpers am Ort  $\vec{x}_k$  im Abstand  $\vec{x}_{12}, \dots$  zu anderen Körpern, wobei auf sie der Kraftvektor  $\vec{F}_k$  einwirkt. Diese Theorie scheitert allerdings an Teilchen in subatomarer Größenordnung wie z.B. Elektronen o.ä. Genau dieses Problem ergab sich ab ca. 1900, als zahlreiche experimentelle Phänomene nicht mehr mithilfe der klassischen Theorie erklärt werden konnten.

## 2 Die Entwicklung der ersten Quantentheorien

*Die Quantentheorie ist die Lehre von der Rolle, die  $h$  in der Natur spielt.* (aus: [Hund, 1984, S. 16])

Bereits vor der eigentlichen Konzeption der Quantenmechanik wurden frühe Theorien entwickelt, die neben der Quantisierung der Energie oder des Drehimpulses auch den sog. Welle-Teilchen-Dualismus postulierten, also Materie Welleneigenschaften zuordneten und umgekehrt. Hier zeigt sich deutlich der Umbruch im Denken in der Physik und dieser Aufbruch in eine neue Ära soll in den folgenden Paragraphen chronologisch nachvollzogen werden.

## 2.1 Schwarzkörperstrahlung

Neben DARWINs berühmter Publikation *Über die Entstehung der Arten* zeichnete sich das Jahr 1859 dadurch aus, dass der deutsche Physiker Gustav KIRCHHOFF die Bestimmung des Energiespektrums der Schwarzkörperstrahlung als *Heiligen Gral der Physik* ausrief, da die Beschreibung der experimentellen Befunde mithilfe des klassischen Modells nicht möglich war [Dunningham u. Vedral, 2011, S. 7]:

Ein schwarzer Körper ist ein idealisierter Körper, der sämtliche auf ihn einfallende Strahlung absorbiert bzw. umgekehrt bei Temperaturen oberhalb des absoluten Nullpunktes Wärmestrahlung emittiert. Da diese Strahlung klassisch jedoch alle Frequenzen enthält und die Energiedichte unabhängig von der Frequenz ist, emittiert der Schwarzkörper eine unendlich hohe Energiemenge - es kommt zur *Ultraviolett-katastrophe*.

Im Jahr 1900 widmete sich Max PLANCK diesem Paradox und extrapolierte aus den vorhandenen experimentellen Daten zur Schwarzkörperstrahlung bei der Temperatur  $T$  einen Ausdruck für die Energie  $E$  bei einer bestimmten Frequenz  $\nu$ :

$$E = h\nu \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}, \quad (2)$$

wobei die Konstante  $h$  das Plancksche Wirkungsquantum bezeichnet.<sup>1</sup> Hieraus ergibt sich die Energiedichte  $U$ :

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

Bei der Interpretation dieser Gleichung postulierte PLANCK, dass die Energieübertragung nicht kontinuierlich erfolgen könne, sondern nur in Form bestimmter Energieportionen  $\Delta E = h\nu$  *gequantelt* geschehe, was er aus thermodynamischen Überlegungen schloss.

Diese Tatsache widerspricht der klassischen Theorie, nach der die Anregung eines Kontinuums an Energiezuständen möglich sein sollte. Dennoch erkannte PLANCK die Tragweite seiner Entdeckung noch nicht und betrachtete die Energiequantelung lediglich als eine Materieeigenschaft und keine des Lichts selbst. Diese Erkenntnis hatte erst Albert EINSTEIN fünf Jahre später.

## 2.2 Der lichtelektrische Effekt

EINSTEIN erklärte den 1886 von Heinrich HERTZ gefundenen äußeren lichtelektrischen Effekt, nach dem ultraviolettes Licht Elektronen aus einer Metallplatte herauslösen kann, während dies mit Licht aus dem sichtbaren Spektrum nicht möglich ist. Nach klassischer Theorie sollte letzteres jedoch zumindest bei hinreichend langer

---

<sup>1</sup>Schon PLANCK realisierte, dass es sich bei der Konstanten  $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  Js um eine fundamentale Naturkonstante handeln müsse.

Bestrahlungsdauer, um die nötige Energie zu übertragen, möglich sein. Ausgehend von PLANCKs Strahlungshypothese erklärte EINSTEIN diesen scheinbaren Widerspruch durch den sog. Welle-Teilchen-Dualismus, wonach Licht zugleich Teilchen-, als auch Welleneigenschaften besitzt. Danach trägt ein Lichtquant - ein Photon - der Frequenz  $\nu$  die Energie

$$E_{\text{Ph.}} = h\nu \quad (4)$$

und wird beim Auftreffen auf die Metallplatte von einem Elektron absorbiert. Ist die Energie des Photons größer als die Bindungsenergie des Elektrons, so wird es aus dem Material herausgelöst. Der nicht für die Austrittsarbeit  $\Phi$  aufgewendete Teil des Energiequants entspricht der kinetischen Energie  $E_{\text{Kin.}}$  des Elementarteilchens und kann z.B. mithilfe der Gegenfeldmethode bestimmt werden.

$$E_{\text{Ph.}} = E_{\text{Kin.}} + \Phi \quad \Leftrightarrow \quad h\nu = \frac{1}{2}m_e v^2 + \Phi \quad (5)$$

Aus der Analyse dieses Energiebeitrags bei verschiedenen Frequenzen lässt sich somit experimentell der Betrag des PLANCKschen Wirkungsquantums bestimmen. Ist die Frequenz des eingestrahnten Photons jedoch kleiner als ein bestimmter Grenzwert - jene Frequenz, bei der  $E_{\text{Ph.}}$  gerade der Austrittsarbeit  $\Phi$  entspricht - so werden keine Elektronen mehr aus der Metallplatte herausgelöst. Dies ist der Fall bei Licht aus dem sichtbaren Spektrum.

### 2.3 Rutherfordsches und Bohrsches Atommodell

1911 gelang es RUTHERFORD das bislang geltende THOMSONsche Atommodell zu erweitern, indem er durch ein Experiment über die Streuung von Alpha-Strahlung an einer dünnen Goldfolie nachweisen konnte, dass sich im Zentrum des Atoms ein im Vergleich zum Atomradius verschwindend kleiner, positiv geladener Kern befindet, der nahezu die gesamte Masse in sich konzentriert, während er von negativ geladenen Elektronen umkreist wird.

Basierend auf diesem Modell entwickelte Niels BOHR 1913 das erste auf quantentheoretischen Aspekten beruhende Atommodell seiner Zeit. Hierzu formulierte er zwei Postulate, die die bis dahin herrschende klassische Mechanik und die Elektrodynamik einschränkten.

1. Elektronen bewegen sich auf festen Kreisbahnen um den Atomkern, ohne dabei zu strahlen<sup>2</sup>. In diesen stationären Zuständen besitzt das Elektron eine diskrete Energie  $E_n$  und einen quantisierten Drehimpuls  $L = n\hbar$  auf der  $n$ -ten Bahn.

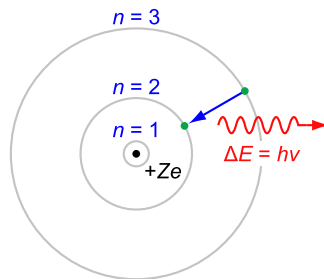
---

<sup>2</sup>Ohne diese im direkten Gegensatz zur klassischen Elektrodynamik stehende Einschränkung, nach der bewegte Ladung elektromagnetische Wellen abstrahlt, würde das Elektron zunehmend an kinetischer Energie verlieren und auf einer Spiralbahn in den Atomkern stürzen. Klassisch ist die Stabilität der Atome also nicht zu erklären.

2. Der Energiezustand des Atoms kann sich nur durch Übergang von einem stationären Zustand zum anderen ändern. Ein solcher Übergang ist mit der Absorption oder Emission von Strahlung verknüpft, wobei für die Energieänderung gilt:

$$\Delta E = h\nu = E_n - E_m, \text{ mit } m > n. \quad (6)$$

Besondere Betonung fand das sog. *Korrespondenzprinzip*, nach dem sich die Vorhersagen der klassischen Physik im Limes großer Quantenzahlen  $n$  ergeben müssen, um die klassische Theorie als Grenzfall der Quantentheorie zu erhalten. Nur so konnte die neue Theorie in Einklang mit den Erkenntnissen der vergangenen Jahrhunderte gebracht werden.



**Abbildung 1:** Schematische Darstellung des BOHRschen Atommodells. (Quelle: [Wikipedia, 2012b])

## Spektroskopie

Unter *Spektroskopie* wird ein Verfahren verstanden, bei dem das Energiespektrum einer Probe mithilfe seiner emittierten bzw. absorbierten elektromagnetischen Strahlung visualisiert wird. So entdeckte Johann Jakob BALMER 1885 eine Folge von Spektrallinien im sichtbaren Teil des elektromagnetischen Spektrums des Wasserstoffatoms.



**Abbildung 2:** Sichtbarer Bereich des Wasserstoffspektrums. (Quelle: Wikipedia [2012a])

Während BALMER die auftretenden Wellenlängen  $\lambda$  mit einer rein empirisch gefunden Formel vorhersagen konnte, genauso wie RYDBERG 1888 in einer allgemeineren Version für das gesamte Spektrum

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \text{ wobei } m > n, \quad (7)$$

so blieb der physikalische Grund für das Auftreten der Linien, genauso wie die Herkunft der in den Formeln auftauchenden Rydbergkonstanten  $R$  ungeklärt. Erst BOHR konnte mithilfe seines Atommodells die Spektrallinien als Übergänge von einem zum anderen Energieniveau innerhalb des Wasserstoffatoms identifizieren, wobei die Energiedifferenz in Form eines Photons einer charakteristischen Wellenlänge emittiert wird. So wurde klar, dass es sich bei der BALMER-Serie um den Übergang von einem höheren Energieniveau  $m$  zur Quantenzahl  $n = 2$  handelt und auch die Konstanten in den Formeln der beiden Pioniere auf dem Gebiet der Spektroskopie konnte BOHR theoretisch herleiten, nachdem er eine Abschätzung für den Atomradius eines Wasserstoffatoms berechnet hatte:

Damit sich ein Elektron mit Masse  $m_e$  auf einer festen Kreisbahn um den positiv geladenen Kern bewegen kann, müssen Zentripetalkraft und Coulombkraft im Gleichgewicht stehen:

$$\begin{aligned} F_{\text{Zentripetal}} &= F_{\text{Coulomb}} \\ \Rightarrow \quad \frac{m_e v^2}{r} &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \end{aligned} \quad (8)$$

Mit der postulierten Drehimpulsquantisierung  $L = m_e v r = n\hbar$  konnte BOHR eine Abschätzung des Atomradius eines Wasserstoffatoms  $r$  im Zustand  $n$  vornehmen:

$$r = n^2 \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \quad \Rightarrow \quad a_0 \stackrel{r(n=1)}{\approx} 0,529 \text{ \AA} \quad (9)$$

Dieses Ergebnis bestätigte die Größenordnung der ungefähr zeitgleich von Max von LAUE und William BRAGG aus Röntgenbeugungsversuchen stammenden experimentellen Befunde. Mit der Entfernung des Elektrons im  $n$ -ten Energiezustand aus Gl. (9) und der Quantisierungsbedingung aus Gl. (6) konnte BOHR die von RYDBERG gefundene numerische Gleichung neu formulieren:

$$\begin{aligned} E_n = E_{\text{Pot.}} + E_{\text{Kin.}} &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{1}{2} m_e v^2 \stackrel{(9)}{=} -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0 \hbar^2 n^2} \\ \Delta E \stackrel{(6)}{=} E_m - E_n &= \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0 \hbar^2} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \text{ wobei } m > n. \end{aligned} \quad (10)$$

Die Wellenlängen  $\lambda$  des Wasserstoffspektrums berechnen sich damit durch

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\Delta E}{hc} = \underbrace{\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0 \hbar^3 c}}_{=: R} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (11)$$

wodurch die Rydbergkonstante  $R$  durch elementare Naturkonstanten festgelegt war.<sup>3</sup>

<sup>3</sup>Für wasserstoffähnliche Einelektronensysteme ist die rechte Seite von Gl. (11) mit  $Z^2$  zu multiplizieren, wobei  $Z$  für die Kernladungszahl des betreffenden Elements steht.



Nahezu zeitgleich wurde 1913/14 die Existenz angeregter stationärer Zustände im Atom durch den FRANCK-HERTZ-Versuch nachgewiesen. All diese Aspekte, sowie die korrekte Berechnung der Ionisationsenergie des Wasserstoffatoms trugen zum großen Erfolg des BOHRschen Atommodells bei.

Nichtsdestotrotz zeigte das Modell einige Widersprüche wie z.B. die Tatsache, dass das Wasserstoffatom nach BOHRs Annahmen eine flache Scheibe sein müsste. Ferner blieb EINSTEINS 1905 veröffentlichte spezielle Relativitätstheorie unberücksichtigt, obwohl sich die Umlaufgeschwindigkeiten des Elektrons im Grundzustand bereits dem prozentualen Bereich der Lichtgeschwindigkeit annähert. Als wesentlich schwerwiegender stellte sich jedoch heraus, dass das Modell nur für Einelektronensysteme brauchbar war, was 1922 die nun auch von experimenteller Seite immer weiter anerkannte Quantentheorie in eine Krise stürzen sollte (Hund 1984, S. 127 ff., vgl. Abschnitt 2.6).

Ungetrübt davon konnte BOHR in den Folgejahren mithilfe einer verfeinerten Version dieses Modells den Aufbau des Periodensystems der Elemente erklären und erhielt im Jahr 1922 *für seine Verdienste um die Erforschung der Struktur der Atome und der von ihnen ausgehenden Strahlung* den Nobelpreis für Physik [Bohr, 1922].

## 2.4 Bohr-Sommerfeldsches Atommodell

1916 erweiterte Arnold SOMMERFELD das von BOHR vorgeschlagene Modell derart, dass sich die Elektronen des Atoms nicht mehr auf Kreis-, sondern keplerartig auf Ellipsenbahnen bewegen, in deren einem Brennpunkt sich der Atomkern befindet. Im Gegensatz zu Kreisen werden Ellipsen durch zwei freie Parameter (Quantenzahlen) wie ihre Halbachsen beschrieben. Die Einführung einer weiteren Quantenzahl erlaubte es, zusätzliche Beobachtungen im Wasserstoffspektrum wie z.B. den normalen ZEEMAN-Effekt zu beschreiben. Gemäß der BOHR-SOMMERFELD-Quantisierung ist das Wirkungsintegral der Elektronenbewegung wie folgt beschränkt:

$$\oint p dq = nh \quad \Leftrightarrow \quad \int_0^{2\pi} l d\varphi = 2\pi l \stackrel{!}{=} nh \quad (12)$$

wobei  $q$  eine Ortskoordinate und  $p$  der zugehörige kanonisch konjugierte Impuls bei der Quantenzahl  $n$  ist. Diese Bedingung führt auf die Quantisierung des Drehimpulses  $l$ . Er ist, wie bereits im BOHRschen Atommodell postuliert, auf ganzzahlige Vielfache von  $\hbar$  beschränkt.

Die Einführung der Hauptquantenzahl  $n$  zur Festlegung der Energie und der Nebenquantenzahl  $l$  für den Bahndrehimpuls ermöglichte es, die Elektronenkonfiguration einzelner Schalen zu bestimmen und darüber Zusammenhänge zwischen der Elektronenhülle eines Atoms und den Eigenschaften des betreffenden Elements im Pe-

riodensystem aufzuzeigen. Dieses verfeinerte Modell erlaubte nun die Feinstruktur des Wasserstoffspektrums bzw. den STARK- und den normalen ZEEMAN-Effekt, also die Aufspaltung der Spektrallinien unter Anwesenheit eines elektrischen oder magnetischen Feld, zu beschreiben. Es kann aber auf der anderen Seite beispielsweise den Grund für Atombindungen nicht erklären.

## 2.5 De Broglies Hypothese

Während PLANCK und EINSTEIN die Teilcheneigenschaften elektromagnetischer Strahlung in Form von quantisierten Photonen herausstellten, so publizierte Louis DE BROGLIE 1924 in seiner Dissertation Materiewellen und verallgemeinerte damit den Welle-Teilchen-Dualismus. Hiernach lassen sich Teilchen ebenfalls Welleneigenschaften mit einer charakteristischen Wellenlänge  $\lambda$  zuweisen, die über den Impuls  $p$  des Quantenobjektes definiert ist:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (13)$$

1927 gelang der experimentelle Nachweis dieser Hypothese durch Interferenzversuche an einem Nickel-Einkristall im DAVISSON-GERMER-Experiment durch die gleichnamigen Experimentatoren in den sog. BELL LABS. Die beobachteten Beugungerscheinungen demonstrierten eindeutig die Wellennatur von Elektronen. Darüberhinaus konnten die Beugungsmuster durch Einsetzen der DE BROGLIE-Wellenlänge in die BRAGG-Gleichung theoretisch vorhergesagt werden.

## 2.6 Krise der älteren Quantentheorien

Trotz aller neuen Theorien und experimentellen Befunde tat sich Anfang der 1920er Jahre eine Krise im Bereich der sog. älteren Quantentheorien auf, da diese nicht alle gefundenen Quantenphänomene erklären konnten. So eignete sich BOHRs Atommodell zwar gut für die Beschreibung des Wasserstoffatoms, versagte aber bei Molekülen oder allgemein bei Mehrelektronensystemen. Hier scheiterte beispielsweise KRAMER an der Berechnung der Ionisationsenergie des He-Atoms und auch BORN und HEISENBERG gelang es nicht, durch Störungsrechnungen die Wechselwirkung der Elektronen hinreichend genau zu beschreiben [Hund, 1984, S. 127]. Mithilfe des BOHR-SOMMERFELDSchen Atommodells konnte die ungeradzahlige Aufspaltung der Spektrallinien im normalen ZEEMAN-Effekt erklärt werden, jedoch nicht die häufiger auftretende geradzahlige Aufspaltung beim anomalen ZEEMAN-Effekt, da hierzu der erst 1925 entdeckte Elektronenspin nötig ist.<sup>4</sup> In diesem Zeitraum tauchten erste Zweifel an der exakten Gültigkeit der Quantenbedingung  $\oint p_k dq_k = hn_k$  auf,

---

<sup>4</sup>An dieser Stelle sind Ralph KRONIG, George UHLENBECK und Samuel GOUDSMIT zu nennen.

die es jedoch ermöglichte, das Korrespondenzprinzip zu erfüllen [Hund, 1984, S. 128]. All diese Probleme konnten mit der Einführung eines streng mathematischen Formalismus zur Beschreibung der Quantenphänomene überwunden werden - der *Quantenmechanik*.

### 3 Die Göttinger Quantenmechanik von 1925

1920 sollten an der Fakultät für Physik in Göttingen zwei Professuren neu besetzt werden, wobei man Max BORN für das theoretische Teilinstitut auswählte. Für die Besetzung der zweiten Stelle in der experimentellen Einrichtung wünschte sich BORN James FRANCK. Als beide im Jahr 1921 ihre Ämter antraten, wurde das *Erste Physikalische Institut* unter POHL, das *Zweite Physikalische Institut* unter FRANCK und das *Institut für Theoretische Physik* unter BORN gegründet [Hund, 1987, S. 61].

Auf Einladung der beiden neu berufenen Professoren trug BOHR im Sommer 1922 an sieben aufeinanderfolgenden Abenden Vorträge über die Quantentheorie des Atoms in Göttingen vor (sog. *Bohr-Festspiele*), wobei sich unter den Zuhörern berühmte Physiker wie SOMMERFELD, EHRENFEST, LANDÉ und PAULI befanden. SOMMERFELD hatte einen seiner Studenten aus München mitgebracht, der BOHR und BORN durch seine eifrige Teilnahme an der Diskussion beeindruckte, sodass BORN ihn für das kommende Wintersemester in Göttingen wissen wollte - es handelte sich um Werner HEISENBERG, der schließlich 1923 BORNs Assistent wurde [Hund, 1987, S. 64].

Nachdem Göttingen nun all diese großen Persönlichkeiten angezogen hatte, entwarf BORN einen Forschungsplan, um die seiner Meinung nach mathematisch unzureichenden Ansätze der älteren Quantentheorien in einer mathematisch fundierten Theorie, also einem übergeordneten Schema, zu formulieren [Hund, 1987, S. 64]. Dazu sollten

1. mathematische Formalismen zur Beschreibung komplexerer Systeme entwickelt werden, um
2. das He-Atom zu berechnen,
3. sowie die Grenzen der Anwendbarkeit der Theorie auszuloten.

#### 3.1 Heisenbergs Matrizenmechanik

*In my paper the fact that  $XY$  was not equal to  $YX$  was very disagreeable to me. I felt this was the only point of difficulty with the whole scheme.* (Interview with Werner HEISENBERG by Thomas S. Kuhn at the Max Planck Institute, Munich, Germany, February 15, 1963)

Im Sommer 1925 veröffentlichte HEISENBERG eine erste Abhandlung, in der er die alten Quantentheorien kritisierte, dass sie versuchten, die unbeobachtbaren Größen

wie Umlaufbahnen oder -zeiten der Elektronen im Atom zu beschreiben. Stattdessen müsse der Fokus auf den messbaren Differenzen von Strahlungsfrequenzen und Intensitäten der Spektrallinien liegen, um eine Quantenmechanik in Analogie zur klassischen Mechanik zu schaffen [Heisenberg, 1925]. In diesem Papier präziserte er das Korrespondenzprinzip mithilfe eines Fourierreihenansatzes zur Darstellung der Elektronenbewegung und konnte die Energiezustände des harmonischen Oszillators

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (14)$$

im Quantenzustand  $n$  bei Frequenz  $\omega$  herleiten. BORN und JORDAN fanden heraus, dass es sich bei HEISENBERGS Kalkül um die Multiplikation von Matrizen handele. Hieraus entwickelte das Trio die sog. *Matrizenmechanik*, in der sie Matrizen physikalischen Observablen - einer möglichen Messgröße - zuordneten.

Der *Zustand* des Systems legt nun den für die Observable zu erwartenden Messwert fest. In der quantenmechanischen Formulierung handelt es sich hierbei um ein rein mathematisches Objekt, das es ermöglicht, die Wahrscheinlichkeit eines möglichen Messergebnisses zu berechnen. Entscheidend dabei ist, dass die Messwerte den Eigenwerten der Observablen entsprechen. Aus diesem Grunde handelt es sich bei den Matrizen um hermitesche Operatoren, da diese reelle Eigenwerte besitzen.

In Analogie zur Bewegungsgleichung der klassischen Mechanik erhält man die HEISENBERGSche Bewegungsgleichung

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left[ \hat{H}_H, \hat{A}_H \right] + \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t}, \quad (15)$$

die die zeitliche Dynamik der Observablen  $\hat{A}_H$  eines Systems mit dem Hamiltonian  $\hat{H}_H$  charakterisiert. In diesem Bild sind nicht die Zustände zeitabhängig, sondern die Operatoren  $\hat{H}_H$  und  $\hat{A}_H$ .

Mit diesem sog. *Dreimännerwerk* gelang es BORN, HEISENBERG und JORDAN eine komplett neue mathematische Theorie zu formulieren, die (zumindest prinzipiell) einen allgemeinen Zugang zur Behandlung eines jeden quantenmechanischen Problems erlaubte.

Als entscheidende Erkenntnis stellten sich die sog. *kanonischen Vertauschungsrelationen* heraus, also die Relationen zwischen kanonisch konjugierten Variablen, die durch FOURIER-Transformation auseinander hervorgehen.

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (16)$$

Während die Ortsoperatoren  $\hat{x}$  und die Impulsoperatoren  $\hat{p}$  also jeweils paarweise vertauschen, so ist dies im gemischten Fall nicht mehr so. Verschwindet der Kommutator, so bedeutet dies, dass die beiden Observablen gleichzeitig beliebig genau gemessen werden können, während dies im Fall von Impuls und Ort nicht möglich ist. Hier verbleibt stets eine Unschärfe, was 1927 von HEISENBERG in seiner berühmten Unschärferelation präzisiert wurde:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (17)$$

Demnach ist die Messung von Ort und Impuls nur maximal bis auf ein Unschärfeprodukt von  $\frac{\hbar}{2}$  möglich. Die verbleibende Unschärfe ist dabei jedoch nicht auf Messunzulänglichkeiten zurückzuführen, sondern sie ist prinzipieller Natur. Gleiches gilt für die Messung von Energie und Zeit bzw. für zwei allgemeine Observablen  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  im Zustand  $|\psi\rangle$

$$\sigma_A \sigma_B \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|, \quad (18)$$

wie es 1929 in der Robertson-Schrödinger-Relation formuliert wurde [Robertson, 1930].

### 3.2 Schrödingers Wellenmechanik

*For Schrödinger, the atom was an oscillating system – like the string of a musical instrument – for which there exist a number of modes of oscillation (fundamentals and overtones) which are interpreted as the atom’s energy states. Schrödinger’s wave equation impressively provided – without any additional assumptions – the right values for spectral lines of the hydrogen atom.*

(Armin Hermann: *Werner Heisenberg 1901-1976*, S. 36, 1976)

Zeitgleich entwickelte der Österreicher Erwin SCHRÖDINGER seine *Wellenmechanik* als Gegenstück zur Göttinger *Matrizenmechanik* mit der sog. Schrödingergleichung als Ausgangspunkt<sup>5</sup> [Schrödinger, 1926]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle. \quad (19)$$

Diese partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung bestimmt die Zeitentwicklung eines ungestörten (nichtrelativistischen) Quantensystems mit Hamiltonoperator  $\hat{H}$ , das durch eine sog. Wellenfunktion  $\psi(t)$  dargestellt wird. SCHRÖDINGER gelang es, die korrekten Energieeigenwerte des Wasserstoffatoms herzuleiten und somit die Korrektheit seiner nicht in Form fundamentaler Grundgleichungen ableitbaren Gleichung zu bestätigen. Im Gegensatz zum Heisenbergbild sind hier die Zustände zeitabhängig, während der Operator zeitlich konstant ist.

<sup>5</sup>Die hier verwendete Bra-Ket-Notation zur Charakterisierung der Zustandsvektoren war nicht Teil SCHRÖDINGERS Formulierung der Gleichung. Sie wurde von Paul DIRAC entwickelt und 1939 eingeführt.

Trotz unterschiedlich anmutender Ansätze konnte Schrödinger in einer Folgeveröffentlichung die formale Äquivalenz der Matrizen- und Wellenmechanik zeigen.

### 3.3 Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation

1926 interpretierte Max BORN die quantenmechanische Wellenfunktion, wie sie von SCHRÖDINGER vorgeschlagen wurde, als Wahrscheinlichkeitsamplitude. Hiernach ist z.B. der Anteil eines Zustands am Eigenzustand zu einem Messwert proportional zur Wahrscheinlichkeit diesen Messwert zu erhalten. Entsprechend ist das Betragsquadrat der Wellenfunktion  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  als Wahrscheinlichkeitsdichte anzusehen, das Quantenobjekt am Ort  $\vec{r}$  zur Zeit  $t$  aufzufinden, was auf die Normierungsbedingung

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3x \stackrel{!}{=} 1 \quad (20)$$

führt. Für die *statistische Interpretation der Wellenfunktion* erhielt BORN 1954 den Nobelpreis für Physik [Born, 1954].

Aus dieser Bornschen Regel entwickelten BOHR und HEISENBERG die sog. *Kopenhagener Deutung* der Quantenmechanik. Dieser Interpretation nach befindet sich kein Teilchen nur an einem einzigen Ort, sondern ist überall zugleich, wo das Betragsquadrat der Wellenfunktion nicht Null ist. Nimmt man nun eine Messung des Ortes vor, an dem sich das Teilchen befindet, so kollabiert die Wellenfunktion und ist nur noch am Ort, an dem das Teilchen nachgewiesen wurde, von Null verschieden.

Wellenfunktionen als solche haben kein Komplement in der beobachtbaren Welt, sondern ihre Bedeutung ist auf die Vorhersage von Wahrscheinlichkeiten beschränkt. Damit sind Quantenphänomene also prinzipiell indeterministisch im Gegensatz zur klassischen Theorie.

## 4 Post-1925 Ära

*The underlying physical laws necessary for the mathematical theory of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty lies only in the fact that the exact application of these laws leads to equations much too complicated to be soluble.*

(P. A. M. DIRAC, Proc. R. Soc. London, 1929,123, 714)

Die Grundprinzipien der Quantenmechanik waren 1927 fertig entwickelt, sodass von da an über die Messwerte physikalischer Größen Wahrscheinlichkeitsaussagen getroffen werden konnten. Alle bisherigen Aussagen waren jedoch nur im Limes nichtrelativistischer Geschwindigkeiten gültig, sodass insbesondere von Paul DIRAC die relativistische Quantenmechanik vorangetrieben wurde. Mithilfe der DIRAC-Gleichung konnte beispielsweise die Feinstruktur des Wasserstoffatoms berechnet und die Existenz von Antimaterie vorhergesagt werden.

An die Quantenmechanik anknüpfend betrachtet man in der Quantenfeldtheorie

Felder als Mechanismus unendlich vieler Freiheitsgrade und ersetzt die klassische Lagrange-Funktion innerhalb eines Volumens durch die sog. Lagrange-Dichte [Hund, 1984, S. 216]. Diese Theorie hat sich als besonders fruchtbar sowohl in der Teilchen-, als auch Festkörperphysik erwiesen und ist bis heute Gegenstand aktueller Forschung.

## 5 Resümee

Die historische Entwicklung der Quantentheorien war deutlich dominiert von dem Wunsch, das Atom zu beschreiben, hier insbesondere das Wasserstoffatom. Allgemein wollte man einen Grund für die klassisch nicht nachvollziehbare Stabilität der Elemente finden, da das Elektron aufgrund von Strahlungsverlusten durch seine Bewegung langsam in den Atomkern stürzen müsste. Zudem galt es, die gefundenen Spektrallinien zu erklären. Hierbei stellte sich insbesondere der Quantencharakter von Energie und Drehimpuls in Einheiten des Planckschen Wirkungsquantums  $h$  heraus. Auch wenn viele der Phänomene mit den alten Quantentheorien erklärt werden konnten, so blieben Aspekte wie z.B. der anomale ZEEMAN-Effekt unerklärt, was erst mit der Entdeckung des Elektronenspins behoben wurde.<sup>6</sup>

Die prinzipielle Berechenbarkeit aller Quantenphänomene wurde jedoch erst durch die Entwicklung eines mathematischen Formalismus in Form der Quantenmechanik gegeben; so gelang es schließlich das lange Zeit untersuchte Wasserstoffatom vollständig mithilfe von Kugelflächenfunktionen zu beschreiben. Das dadurch gewonnene Orbitalmodell, das lediglich Aussagen über die Aufenthaltswahrscheinlichkeit von Elektronen in bestimmten Bereichen um den Kern macht, konnte das mit der Unschärferelation unvereinbare Modell exakter Elektronenbahnen ablösen. Auch die Behandlung von Mehrelektronensystemen wurde ermöglicht, wobei nur die Schwierigkeit verbleibt, die sich ergebenden Gleichungen tatsächlich zu lösen, wie DIRACS Zitat aus Abschnitt 4 zeigt.

Alles in allem hat die Quantenmechanik die gesamte Physik revolutioniert, was sich unter anderem darin manifestiert, dass nahezu alle nach 1918 verliehenen Nobelpreise auf Quantenphänomenen oder der Entwicklung der Quantentheorien beruhen.

---

<sup>6</sup>Außerdem entdeckte Wolfgang PAULI im gleichen Jahr das nach ihm benannte Ausschließungsprinzip. Auf diesem Konzept beruhend konnte die Austauschwechselwirkung hergeleitet werden und damit überhaupt das Vorhandensein einer spontanen Magnetisierung in Festkörpern erklärt werden.

## Literatur

- [Bohr 1922] BOHR, Niels: The structure of the atom. In: *Nobel Lecture* (1922)
- [Born 1954] BORN, Max: The statistical interpretation of quantum mechanics. In: *Nobel Lecture* (1954)
- [Dunningham u. Vedral 2011] DUNNINGHAM, Jacob ; VEDRAL, Vlatko: *Introductory Quantum Physics and Relativity*. 1. Imperial College Press, 2011
- [Heisenberg 1925] HEISENBERG, Werner: Über die quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen. In: *Zeitschrift für Physik* XXXIII (1925), S. 879–892
- [Heisenberg 1933] HEISENBERG, Werner: The development of quantum mechanics. In: *Nobel Lecture* (1933)
- [Hund 1984] HUND, Friedrich: *Geschichte der Quantentheorie*. 3. Bibliographisches Institut AG, Zürich, 1984
- [Hund 1987] HUND, Friedrich: *Die Geschichte der Göttinger Physik*. Bd. Göttinger Universitätsreden. Vandenhoeck & Ruprecht in Göttingen, 1987
- [Robertson 1930] ROBERTSON, H.P.: A general formulation of the uncertainty principle and its classical interpretation. In: *Phys. Rev. A* 35 (1930), Nr. 667
- [Schrödinger 1926] SCHRÖDINGER, Erwin: Quantisierung als Eigenwertproblem. In: *Annalen der Physik* 384 (1926), Nr. 4
- [Wikipedia 2012a] WIKIPEDIA: *Balmer Serie*. [http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/2/21/Visible\\_spectrum\\_of\\_hydrogen.jpg](http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/2/21/Visible_spectrum_of_hydrogen.jpg). Version: 2012. – zuletzt abgerufen am: 24.09.2012
- [Wikipedia 2012b] WIKIPEDIA: *Bohrsches Atommodell*. <http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Datei:Bohr-atom-PAR.svg&filetimestamp=20071116134247>. Version: 2012. – zuletzt abgerufen am: 24.09.2012