

Karl Fischer

Quantenmechanik aus elementarer Sicht Buch I

Karl Fischer

Quantenmechanik aus
elementarer Sicht Buch I

Quantenmechanik aus elementarer Sicht Buch1

von Karl Fischer

Books on Demand

Gewidmet meiner Familie

Einleitung

Die Quantentheorie gibt es seit gut 100 Jahren, die Quantenmechanik seit etwa 80 Jahren. Eine große Zahl von Wissenschaftlern und Professoren, abgesehen von den Entdeckern selbst haben seither viele Publikationen und Bücher veröffentlicht. So stellt sich die Frage, welche Nische übrig bleibt, mit der eine weitere Publikation, eben dieses Buch, seine Existenz rechtfertigt. Nun, es bringt jeder auch in Sachthemen eine subjektive Sicht ein, die erlaubt ist, sofern sie nicht falsch ist. Eine objektive Beschreibung der Dinge gibt es, menschlicherseits, nicht, so wie auch kein Mensch die Welt, schon rein optisch, genauso sehen kann wie ein anderer, denn da wo er ist, ist nicht der Andere, und ist er an derselben Stelle, so sieht er es mit „anderen Augen“. Auch kann man nicht die gesamte diesbezügliche Weltliteratur durchgehen, ob das schon vorhanden ist, und wenn es vorhanden ist, meistens ist es so, so will man es doch oft anders darstellen.

Zunächst vielleicht eine vereinfachte, aber griffige Unterscheidung der Begriffe:

Die **Quantentheorie** beschreibt quantenhafte Vorgänge in der Materie, ohne eigentlich zu wissen, was los ist, ohne zusammenhängende Hintergrundtheorie.

Sie ist verbunden mit dem Namen **Planck** mit der Einführung des Wirkungsquantums, symbolisch h , im Zusammenhang mit der Strahlungsformel für schwarze (Hohlraum)körper (1900),

mit dem Namen **Lenard** mit der Entdeckung des Photoeffekts, der Ablösung von Elektronen aus einer Metalloberfläche bei Bestrahlung mit Licht und deren Ausdeutung durch **Einstein** (1905),

mit dem Namen **Compton** und dem Comptoneffekt (1922), der Streuung von Röntgenstrahlen an einer Substanz (Graphit) und Messung der Streustrahlung, weiterhin mit

Rutherford und seiner Streuformel. Dabei wird eine Goldfolie mit Alpha-Strahlen bestrahlt und die Winkelverteilung der herausfliegenden, gestreuten Alpha-Strahlen gemessen (1911).

Einen großen theoretischen Schritt brachte die Einführung des Begriffs Materiewellen, z.B. für Elektronen, in Analogie zu Lichtwellen durch **de Broglie** (1924), und deren experimenteller Nachweis durch **Davidson** und **Germer** (1927) bei der Ausdeutung der Reflexion von Elektronen an Nickel-Einkristallen.

Schließlich stehen die Namen **Bohr** und **Sommerfeld**, die ein Modell für das Wasserstoffatom erschlossen und Formeln für die Wellenlängen des von ihm ausgesandten Lichts (Spektrallinien) angaben (1913 bzw 1921). Dieses war notwendig, weil klassisch gesehen die Elektronen auf ihren Umläufen im Atom dauernd elektromagnetische Energie abstrahlen müssten und so ihre Energieniveaus nicht stabil sein könnten wie sie es tatsächlich sind.

Die **Quantenmechanik** mit den Entdeckern **Schrödinger** (1926) und **Heisenberg** (1925) brachte Licht über diese Phänomene und lieferte eine einheitliche Theorie, die sowohl den Korpuskelcharakter (z.B. Comptoneffekt) wie auch den Wellencharakter (Beugungsexperimente) von Licht und Materie(teilchen) widerspruchsfrei beschreibt.

Das vorliegende Buch unterstellt die Richtigkeit der Quantenmechanik ohne Hinterfragung.

Es beabsichtigt nicht, wie ein Lehrbuch alle Kapitel der Theorie durchzugehen, es beabsichtigt weiterhin nicht, sozusagen die Rolle der Entdecker nachzuspielen und anhand der Deutung der Experimente die Theorie neu einzuführen. Vielmehr hat es die Absicht, die Quantenmechanik, künftig mit QM abgekürzt, aus einem elementaren Blickwinkel neu hochzuziehen, wohl wissend, was die Ergebnisse sind und sein müssen.

Dieses beginnt mit der Einführung des **Vektorraums**, also von Vektoren und Matrizen, sowohl endlicher wie

unendlicher Dimension, als mathematischer und erkenntnistheoretischer Basis für die QM. Davon ausgehend werden durch Grenzübergang mit immer feineren Schrittweiten, die bekannten kontinuierlichen reellen Größen und Variablen sowie Differentialquotienten (Differentialoperatoren), z.B. für Ort und Impuls, Zeit und Energie, inklusive ihrer Vertauschungsregeln abgeleitet. Letztere sind in der QM so zu sagen Alltag und bringen für die praktischen Rechnungen erhebliche Vereinfachungen gegenüber dem Diskontinuierlichem.

Weiterhin wird eingangs die QM nur für eine klassische Dimension entwickelt, konkret für den Ortsraum, so als gäbe es für eine punkartige Masse m , die man als greifbares Objekt einfach unterstellen muss, nur die eine Eigenschaft, dass sie sich am Ort x befindet, wobei jedem Ort x , und das ist das Neue der QM gegenüber der klassischen Mechanik, einem Vektor im Sinne der QM entspricht.

Wohl wissend, dass etwa ein konkretes Elementarteilchen mehr Eigenschaften hat, werden weitere Vektorräume eingeführt. So gibt es neben dem Raum für die Ortsvariable x auch die Räume für die Ortsvariablen y und z , für die Zeitkoordinaten t , und später auch den Raum für Spin s , Isospin I , usw.

Die Verbindung dieser (Vektor)räume geschieht prinzipiell, und dieser Ansatz wird durchgehalten, durch **Produktbildung der Räume**, durch Bildung des kartesischen Produkts der Räume, was man sich wie ein Nebeneinanderstellen denken kann.

So bekommt man einen systematischen Aufbau der QM, der nach oben offen ist, denn es ist von vornherein nicht festgelegt, welche Räume zur Beschreibung der Phänomene noch hinzugefügt werden sollen. So waren ursprünglich nur die Räume für Ort und Zeit x, y, z, t und und später auch für den Spin s vorgesehen. Eine adäquate Beschreibung der Elementarteilchen, z.B. des Typenpaares Proton-Neutron,

brachte die Hinzufügung des Raumes für den Isospin, ebenfalls mittels Produktbildung.

Dieses Buch unterstreicht die Bedeutung formaler Beziehungen und den Vorrang formaler Beziehungen gegenüber der Anschaulichkeit. Ein Beispiel hierfür ist die hohe Bedeutung des Distributivgesetzes, insbesondere für die Addition von Vektoren (Linearkombination, Superpositionsprinzip, Spektralanalyse). Ein Beispiel für den Vorrang von Regeln, von Axiomen, vor der Anschaulichkeit ist die Gleichwertigkeit von Koordinatensystemen.

Ob ein Dreieck in einem Koordinatensystem auf Tafel1 oder in einem anderen auf Tafel2 gezeichnet wird, spielt offenbar keine Rolle. Gegebenenfalls kann man die Koordinaten von einem System aufs andere umrechnen. Es kommt eigentlich nur auf die Gestalt an.

Wendet man dieses Prinzip auf die Physik an, die Gleichwertigkeit von Koordinatensystemen, und fügt hinzu, eine Auswahl ist zu treffen, dass dann fundamentale Größen wie Elektronenmasse, Plancksches Wirkungsquantum, Lichtgeschwindigkeit und andere, in jedem Koordinatensystem gleich zu sein haben, so wird insbesondere wegen der Gleichheit der Lichtgeschwindigkeit in zueinander gleichförmig bewegten Koordinatensysteme, die spezielle Relativitätstheorie gewissermaßen erzwungen, obwohl sie anschaulich Probleme macht.

Das Buch baut die QM in ihren wesentlichen Zügen Schritt für Schritt auf, bringt aber auch **Ungewöhnliches und Ergänzungen:**

Die Herleitung der Impuls-Orts-Vertauschungsrelation aus dem diskreten Ortsraum heraus,
die Herleitung der Lösung der freien Diracgleichung durch doppelte Anwendung der Helizitätsgleichung,
dabei Ersatz der bekannten diesbezüglichen Matrizen durch leichter händelbare Produktmatrizen,
die Erweiterung der Pauli-Matrizen auf das n-Dimensionale samt Vertauschungsregeln und Anwendungen,

allgemeine Relationen über unendliche und endliche Anzahlräume,
die Einführung des Begriffs der Diagonalmatrizen samt Rechenregeln und Anwendungen,
die allgemeine Beziehung zwischen klassischen Gruppen und der QM-Transformationsgruppen wie Drehungen, Lorentztransformation,
die Herleitung der Drehimpulsalgebra aus allgemeinen Betrachtungen über Schiebeoperatoren,
die Herleitung der Maxwellgleichungen und weitere über verschiedene Wege, so über Spin-Matrizen und über eine neue Art von Ortsvektoren,
Ableitung der Feldstärkematrix samt Gleichung unmittelbar aus den Maxwellgleichungen heraus und vieles andere mehr.

Es werden auch Anfänge der Quantenfeldtheorie gebracht.

Das Buch bringt viele **Beispiele** und viele **Nebenrechnungen**, die im Allgemeinen in der Literatur fehlen.

Insofern ist es für den Nicht-Profi lesenswert, für den Profi ist vielleicht auch Interessantes vorhanden.

Es lohnt sich, hineinzuschauen und es zu lesen.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung

1.0 Was ist eine Quantenmechanik

2.0 Mathematische Voraussetzungen

2.1 Vektoren

2.1.1 Allgemeines

2.1.2 Das Skalarprodukt

2.1.3 Das Vektorprodukt

2.1.4 Anwendungsbeispiel: Definition des Drehimpulses

2.1.5 Anwendungsbeispiel: Die Präzession eines einfachen Kreisels

2.2 Matrizen

2.3 Der komplexe Vektorraum

2.4 Standardabwandlungen von Matrizen und Matrizentypen

3.0 Einstieg in die QM, der eindimensionale Ortsraum

3.1 Allgemeines

3.2 Der diskrete Ortsraum

3.3 Interpretation des Zustandsvektors

3.4 Suche nach einem weiteren Operator des Ortsraums

3.5 Die Vertauschungsregel $P \cdot X - X \cdot P$ im diskreten Ortsraum

3.6 Der Begriff Unschärfe

3.7 Der Übergang vom diskreten zum kontinuierlichen Ortsraum

4.0 Weiterer Aufbau der QM im Eindimensionalen

4.1 Unitäre Transformationen und ihre Folgerungen

4.2 Generierung der Transformation U aus kleinen Transformationen dU

- [4.3 Die Eigenwertgleichung für P](#)
- [4.4 Identifizierung von P als Impulsoperator](#)
- [4.5 Der Impulsraum](#)
- [4.6 Darstellung von Orts-Zustandsvektoren durch Impuls-Eigenfunktionen](#)
- [4.7 Allgemeines über die Fouriertransformation](#)
- [4.8 Nützliche Formeln zur Deltafunktion](#)

5.0 Ergänzung zum vollständigen Orts- und Zeitraum durch Produktbildung

6.0 Justierung der QM durch de-Broglie-Wellen

- [6.1 Materiewellen](#)
- [6.2 Justierung der Operatoren für Impuls und Energie](#)
- [6.3 Mittelwerte, Unschärferelation](#)

7.0 Die Energiegleichung im eindimensionalen Ort- und Zeitraum

- [7.1 Die Schrödingergleichung](#)
- [7.2 Das kräftefreie Wellenpaket](#)
- [7.3 Das Gaußsche Wellenpaket](#)
- [7.4 Herleitung der eindim. Kontinuitätsgleichung an Hand eines einfachen Modells](#)
- [7.5 Das Zwei-Loch-Experiment](#)
- [7.6 Die Beugung am Spalt](#)
- [7.7 Der Tunneleffekt](#)
- [7.8 Der Unterschied zwischen Halbwertszeit und mittlerer Lebensdauer](#)

8.0 QM im Dreidimensionalen

- [8.1 Die Bahndrehimpulsoperatoren](#)
- [8.2 Die Bahndrehimpuls-Eigenfunktionen \(Kugelflächenfunktionen\)](#)
- [8.3 Die Schrödingergleichung mit elektromagnetischem Potential](#)

8.3.1 Die Kontinuitätsgleichung zur Schrödingergleichung

8.3.2 Kurzer Abriss über die Vektoranalysis

8.4 Kugelsymmetrische Potentiale (Wasserstoffatom)

9.0 Theorie-Nachschub

9.1 Die Hauptachsentransformation

9.2 Reelle Eigenwerte

9.3 Orthogonale Eigenvektoren

9.4 Simultane Eigenvektoren zweier Operatoren

9.5 Die allgemeine Drehimpulsalgebra

9.6 Die Addition zweier Drehimpulse

10.0 Der zweidimensionale (komplexe) Spinraum

10.1 Allgemeines, die Paulimatrizen

10.2 Das magnetische Moment

10.3 Über elektromagnetische Einheiten und die Feldkonstanten ϵ_0 und μ_0

10.4 Die Einheiten bei der Maxwell-Gleichung und Dirac-Gleichung

10.5 Die Pauli-Gleichung

11.0 Mehr-Teilchen- Systeme

11.1 Die formelhafte Erfassung des Pauli-Prinzips

11.2 Elementare Spin-Koppelungen

11.3 Ergänzung des Drehimpulses durch die Anzahl der Elementarspins

12.0 (Iso)spin-Koppelungen, Wirkungsquerschnitt

12.1 Koppelungen

12.2 Der differentielle und totale Wirkungsquerschnitt

12.2.1 Der Wirkungsquerschnitt bei Reflexion an einer harten Kugel

12.2.2 Der totale Wirkungsquerschnitt für Meteoriteneinschlag

12.2.3 Der Wirkungsquerschnitt der Rutherford-Streuung

[12.3 Allgemeines zum Wirkungsquerschnitt](#)

[12.4 Das Schwerpunktsystem](#)

[12.5 Die Streumatrix](#)

[12.6 Das Wigner-Eckart-Theorem](#)

[12.7 Verzweigungsverhältnisse von Wirkungsquerschnitten und Zerfällen](#)

13.0 Die erweiterten Pauli-Matrizen

[13.1 Die Ein-Element-Matrix](#)

[13.2 Ableitung der Vertauschungsregeln der erweiterten Pauli-Matrizen](#)

[13.3 Liste der Kommutatoren und Antikommutatoren](#)

[13.4 Erklärungen anhand der \$U_3\$](#)

[13.5 Eigenwerte und Basisvektoren](#)

[13.6 Liste der Kommutatoren und Antikommutatoren der \$U_3\$](#)

[13.7 Darstellung der Matrizen und Kommutatoren mit Schiebeoperatoren](#)

[13.8 Bedeutung der U-Matrizen](#)

14.0 Die erweiterten Pauli-Matrizen, Ergänzungen

[14.1 Ergänzung für Antiteilchen](#)

[14.2 \$U_n\$ -Produkträume, Kombination von Zuständen](#)

[14.3 Andere Sichten der \$U_n\$](#)

15.0 Kurze Vorstellung der relativistischen Mechanik

[15.1 Die Herleitung der Lorentz-Transformation](#)

[15.2 Folgerungen](#)

[15.2.1 Verlust der Gleichzeitigkeit](#)

[15.2.2 Längenkontraktion](#)

[15.2.3 Zeitdilatation](#)

[15.3 Die Lorentz-Transformation für Koordinatendifferenzen](#)

[15.4 Geschwindigkeits-Additionstheoreme](#)

[15.5 Kraft und Beschleunigung](#)

[15.6 Der Impuls](#)

[15.7 Die Energie \(\$E = mc^2\$ \)](#)

[15.8 Die dreidimensionalen Formeln](#)

[15.9 Die Lorentz-Transformation als Matrix](#)

[15.10 Der metrische Fundamentaltensor, die Metrik allgemein](#)

[15.11 Beschleunigte Bezugssysteme](#)

[15.12 Die rotierende Scheibe als Beispiel](#)

[15.13 Ein mit konstanter Geschwindigkeit \$v\$ bewegtes System, Ausdeutung](#)

[16.0 Das Produkt von Spinraum und Ortsraum](#)

[16.1 Die Helizitätsgleichung](#)

[16.2 Die Weyl-Gleichung](#)

[16.3 Raumspiegelung bei der Weyl-Gleichung](#)

[16.4 Die Ladungskonjugation bei der Weyl-Gleichung](#)

[17.0 Das Produkt von Ortszeitraum, Energievorzeichenraum und Spinraum](#)

[17.1 Die Dirac-Gleichung](#)

[17.1.1 Verschiedene Sets antikommutierender Matrizen](#)

[17.1.2 Lösung der Gleichung mit Einbeziehung der Helizitätsgleichung](#)

[17.1.3 Lösung der Gleichung, wenn der Spin in oder entgegen der z-Achse zeigt](#)

[17.1.4 Kovariante Darstellung der Gleichung](#)

[17.2 Herleitung der Weyl-Gleichung aus der Dirac-Gleichung](#)

[17.3 Raumspiegelung \$P\$](#)

[17.4 Ladungskonjugation \$C\$](#)

[17.5 Zeitumkehr \$T\$](#)

[17.6 Die eigentliche Lorentz-Transformation \$L\$](#)

[17.7 Beispiele zu den Transformationen \$P, C, T\$](#)

[17.8 Die Kontinuitätsgleichung zur Dirac-Gleichung](#)

[17.9 Die Klein-Gordon-Gleichung](#)

17.10 Die Kontinuitätsgleichung zur Klein-Gordon-Gleichung

18.0 Transformationen an Operatoren und ihre Entsprechung im Reellen

18.1 Definierende Eigenschaften

18.2 Beispiel Matrizensatz σ_μ , Drehungen

18.3 Beispiel Matrizensatz σ_μ , Lorentztransformation

18.4 Beispiel Matrizensatz $\tau_\mu\sigma_\nu$

18.5 Beispiel Translation (P,X)

18.6 Beispiel Drehung allgemein (J_i).

18.7 Allgemeine Regeln

19.0 Spin-1-0-Systeme, Maxwell-Gleichungen

19.1 Eigenwerte und Eigenvektoren (S-Matrizen)

19.2 Zwei Arten von Basisvektoren

19.3 Herleitung von Gleichungen mittels Spin-1-Matrizen

19.4 Hinzufügung des Spin-0-Anteils (R-Matrizen)

19.5 Vertauschungsregeln

19.6 Deutung der R-Matrizen

19.7 Allgemeines über Potentiale und Feldstärken

19.8 Hinzufügung von Strom und Ladung

19.9 Zur allgemeinen Lösung der Gleichungen

19.10 Darstellung der Gleichungen über eine Feldstärkematrix

20.0 Spin-1/2-1/2-Systeme

20.1 Basisvektoren in Matrizenform

20.2 Das Skalarprodukt zweier Vektoren in Matrizenform

20.3 Allgemeines Umsetzverfahren von Linearkombinationen mit Paar-Vektoren einerseits und Matrizen-Vektoren andererseits

20.4 Die Wirkungen von Operatoren auf Vektoren in Matrizenform

20.5 Die Maxwell-Gleichungen, dargestellt über Matrizen-Basis-Vektoren

21.0 Spin- $1/2$ - $1/2$ -Systeme mit Selbstwechselwirkung

21.1 Eindimensionale Selbstwechselwirkung

21.2 Mehrdimensionale Selbstwechselwirkung, die Gluon-Gleichung

22.0 Anzahlraum, Erzeugungsoperatoren und Vernichtungsoperatoren

22.1 Der Anzahlraum

22.2 Schiebeoperatoren im Anzahlraum (Erzeugung und Vernichtung)

22.3 Die Anfügung des Anzahlraums an die bisherigen Räume

22.4 Der endlich dimensionierte Anzahlraum

22.5 Der zweidimensionale Anzahlraum

22.6 Vereinfachte Schreibweise für Diagonalmatrizen

22.7 Rechnen mit Diagonalmatrizen

22.8 Die Mächtigkeit der Schiebeoperatoren

22.9 Herleitung der Drehimpulsoperatoren mittels Schiebeoperatoren

22.10 Sonder-Antivertauschungsregeln für den zweidimensionalen Anzahlraum

23.0 Linearkombinationen mit Schiebeoperatoren

23.1 Diskrete Linearkombinationen

23.2 Projektionsmatrizen

23.3 Übergang zum Kontinuierlichen

24.0 Folgerungen

24.1 Der Operator für die Gesamt-Energie

24.2 Der Operator für die Gesamt-Impuls

24.3 Der Operator für die Gesamt-Ladung

24.4 Interpretation

24.5 Das Normalprodukt, das Wicksche Theorem

25.0 Die Klein-Gordon-Gleichung und die Gleichung des harmonischen Oszillators

25.1 Der klassische harmonische Oszillator

25.2 Der eindimensionale harmonische Oszillator in der QM

25.3 Lösung der Klein-Gordon-Gleichung, Ein-Teilchen-System

25.4 Quantisierung der Klein-Gordon-Gleichung, Mehrteilchensystem

25.5 Die Feldoperatoren für Impuls und Energie

26.0 Die Green-Methode

26.1 Die Stufenfunktion und Allgemeines über Residuen und Pole

26.2 Tabellelarische Zusammenfassung der Achsen-Pol-Situation

26.3 Greenfunktionen

26.3.1 Die Stufenfunktion

26.3.2 Die Greenfunktion zum harmonischen Oszillator

26.3.3 Die Greenfunktion zur Klein-Gordon-Gleichung

26.4 Anwendungen von Greenfunktionen

26.4.1 Anwendung für das statische elektrische Potential

26.4.2 Anwendung für die zeitunabhängige Schrödingergleichung

26.4.3 Der Streuvorgang zur Schrödingergleichung (allgemein)

26.4.4 Der Streuvorgang beim (abgeschirmten) Coulomb-Potential

27.0 Die Green-Methode, Fortsetzung

27.1 Betreffend die Klein-Gordon-Gleichung

27.2 Das retardierte Potential einer allgemeinen elektrischen Ladung

[27.3 Das elektrische Potential einer bewegten Punktladung](#)

[27.4 Die Greenfunktion zur Weyl-Gleichung](#)

[27.5 Die Greenfunktion zur Dirac-Gleichung](#)

[27.6 Weiteres über Greenfunktionen](#)

[27.7 Zweipunktfunktionen](#)

[27.7.1 Die Zweipunktfunktion zur Klein-Gordon-Gleichung](#)

[27.7.2 Die Zweipunktfunktion zur Weyl-Gleichung](#)

[27.7.3 Die Zweipunktfunktion zur Dirac-Gleichung](#)

[28.0 Abschluss](#)

[Literaturverzeichnis](#)

[Stichwortverzeichnis](#)

[Über den Autor und Bemerkungen zur Auflage 2 und 3](#)

1.0 Was ist eine Quantenmechanik

Jede Theorie braucht zunächst einmal Begriffe, auf die sich Verknüpfungen beziehen können. Typische Begriffe der klassischen Physik, insbesondere der Mechanik, der Physik des Massenpunktes, sind

die
Ortskoordinaten
 x, y, z , vektoriell
mit \mathbf{x} oder \mathbf{r}
bezeichnet

die Zeit t

die Masse m

daraus
abgeleitete
Größen wie

die
Geschwindigkeit \mathbf{v}

die
Beschleunigung \mathbf{b}

die Kraft $\mathbf{K} = m * \mathbf{b}$ Masse mal
Beschleunigung

der Impuls $\mathbf{p} = m * \mathbf{v}$ Masse mal
Geschwindigkeit

der Drehimpuls $\mathbf{J} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ Ortsvektor
kreuz
Impulsvektor

das $\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{K}$ Ortsvektor

Drehmoment

kreuz Kraft

die Energie

$$E = \mathbf{K} * \mathbf{x}$$

Kraft mal Weg

Man kann \mathbf{x} , t , m , \mathbf{v} und \mathbf{b} als elementare Größen betrachten, die nicht mehr zerlegbar sind,

\mathbf{K} , \mathbf{p} , \mathbf{J} , \mathbf{M} und E als zusammengesetzte Größen, die dann konkret eine größere Variationsbreite erlauben. Haben etwa zwei Massen gleichen Impuls, so müssen sie nicht in m und \mathbf{v} übereinstimmen, es kann eine Masse größer als die andere sein und dafür die Geschwindigkeit kleiner. Weil die Energie darüber hinaus eine skalare (eindimensionale) Größe ist, ist die Variationsbreite besonders groß.

In der QM bleiben diese Begriffe erhalten, bekommen aber eine andere Gewichtung.

Im Blick stehen hier insbesondere die Begriffe Ort, Zeit, Impuls, Energie, Masse, Drehimpuls, weniger die Begriffe Kraft, Geschwindigkeit, Beschleunigung.

Nun kommt der bedeutende Unterschied:

In der klassischen Mechanik entsprechen diesen Begriffen Variablen, Zahlen oder zu Vektoren vereinigte Zahlen, in der QM entsprechen ihnen **(Hilbert)vektoren** und **Operatoren (Matrizen)**

Ein Beispiel:

Klassisch: Ein Massenpunkt m befinde sich am Ort x . x ist eine **Variable**.

Die Gesamtheit aller Orte bilden die x -Achse, die Menge aller reellen Zahlen.

QM: x ist keine Variable, sondern ein **(Hilbert)vektor** $|x\rangle$. x selbst dient zur Kennzeichnung des Vektors. Die Gesamtheit aller Orte bilden einen **Vektorraum**. Da es unendlich viele Werte von x gibt, sind es auch unendlich viele Vektoren. Die verschiedenen Werte von x sind in einem

Operator, Matrix als so genannte **Eigenwerte** untergebracht, explizit oder implizit.

Was das nun auf sich hat, wird noch im Einzelnen erläutert werden.

Anmerkung: David **Hilbert**, deutscher Mathematiker (1862-1943)

Nun ist es nicht so, dass jede klassische Größe in der QM in einen Hilbertvektor übergeführt wird, sondern manche Größen bleiben Zahlen, insbesondere Parameter wie die Masse, elektrische Elementarladung, Lichtgeschwindigkeit, Plancksches Wirkungsquantum, Koppelungskonstanten, usw

Auch sind die bei der Überführung entstehenden Vektorräume nicht immer unabhängig voneinander, sondern benutzen in manchen Fällen denselben Vektorraum auf verschiedene Weise und sind so gewissermaßen in Konkurrenz zueinander. So ist der Hilbertraum für Ort und Impuls eigentlich derselbe, was Abhängigkeit untereinander bewirkt (Unschärferelation).

Konkurrenz zwischen verschiedenen Variablen gibt es auch klassisch. So kann man für ein freies Teilchen Impuls und Energie nicht frei vorgeben, weil da Abhängigkeiten bestehen. In der QM wird diese Konkurrenz eine Stufe tiefer gelegt, eben Beispiel Ort und Impuls, auch Zeit und Energie. Das hat zur Folge, dass für quantenmechanische Berechnungen auch die Ausgangssituation, die Startwerte nicht immer in dem Umfang präzise vorgegeben werden können wie im Klassischen. Man kann, im Beispiel, einer Masse im Klassischen Ort und Geschwindigkeit (Impuls) beide exakt vorgeben, in der QM nicht oder nur mit Einschränkungen. Das wirkt sich natürlich auch auf die Ergebnisse aus. Man bleibt von Anfang bis Ende im System.

Man kann natürlich fragen, warum man nicht zu jeder klassischen Variablenart einen eigenen unabhängigen Vektorraum aufmacht, um das Problem der Konkurrenz nicht aufkommen zu lassen. Das ist deswegen, weil zu einem

Vektorraum meist mehrere Operatoren definierbar sind, die verschiedene klassische Variablen vertreten. Neben dem nun bekannten Beispiel ein anderes. Fasst man die drei unabhängigen Vektorräume für die Ortskoordinaten x , y und z zu einem zusammen, so sind darin nun auch die Drehimpulsoperatoren formulierbar, die untereinander und auch mit den anderen wiederum in Konkurrenz treten.

In der QM kommt eine neue Größe hinzu, die es klassisch nicht gibt, das sind die **Wahrscheinlichkeitsamplituden**, die Koeffizienten zu den **(Hilbert)vektoren**, die deren Isolierung aufheben und eine Verbindung zwischen ihnen herstellen. Aus ihnen sind dann **Wahrscheinlichkeiten** für physikalische Ereignisse errechenbar. Die Hilbertvektoren mit ihren Eigenwerten, auch **Observable** genannt, vertreten die experimentell erfassbaren Größen. Klassisch kennt man nur exakte Berechnung oder Rechnen mit Wahrscheinlichkeiten, aber eben nicht die Wahrscheinlichkeitsamplitude, sozusagen die „Wurzel aus der Wahrscheinlichkeit“.

Klassisch

Variable $x \Rightarrow$
Alle x -Werte

Elementar-
Variable ohne
Konkurrenz
zueinander

QM

Vektor zu x
Operator X als Träger der x -Werte
Vektorraum zu X
mit Wahrscheinlichkeitsamplituden
als Koeffizienten der Vektoren

teilweise in Konkurrenz

Man hat gewissermaßen eine Anhebung des Gesamtsystems von der Variablen-Ebene auf die Vektor-Ebene. Auch die Kompliziertheit der Rechnungen werden damit angehoben.

Die QM gilt als **indeterministisch**, wegen auch prinzipiell nicht weg retuschierbarer Wahrscheinlichkeiten, aber natürlich ist die **Mathematik**, die sie benutzt **deterministisch**, hier folgt aus dem Einen zwangsläufig das Andere. Das ist ihr fester Boden, auf dem sie steht.

Die QM beschäftigt sich hauptsächlich mit der Welt im Kleinen, mit atomaren Verhältnissen, wo das Plancksche Wirkungsquantum h nicht mehr vernachlässigbar ist. Hier hat sie das Sagen. Das Makroskopische, die Welt wie wir sie kennen, dagegen ist mehr das Feld der klassischen Physik. Tatsächlich hat die QM das Bestreben, das Kleine und noch Kleinere (Atome, Elementarteilchen) zu verstehen. Sie strebt ins Innere der Dinge.

2. Mathematische Voraussetzungen

2.1 Vektoren

2.1.1 Allgemeines

Sowohl in der klassischen Physik wie in der QM ist der Begriff Vektor von großer Bedeutung.

Ein Vektor ist eine Kolonne von Zahlen, oft waagrecht geschrieben, dann spricht man von einem **Zeilenvektor**, senkrecht geschrieben, spricht man von einem **Spaltenvektor**.

Die einzelnen Zahlen eines Vektors heißen **Komponenten des Vektors**, die Anzahl der Zahlen in einem Vektor heißt **Dimension**. Unter einem **n-dimensionalen Vektorraum** versteht man die Gesamtheit der Vektoren der Dimension n. Bei komponentenhafter Darstellung eines Vektors schreibt man seine Komponenten in Klammern, entweder zeilenartig waagrecht oder spaltenartig senkrecht. Vektoren werden oft mit symbolischen Namen versehen und können so als Gesamtheit angesprochen werden. Darin liegt eine der Vorteile der Vektorrechnung.

Als Beispiel sei ein Raumpunkt mit seinen drei Koordinaten als Vektor dargestellt, etwa $\mathbf{x} = (2, -3, 5)$, er hat also die Koordinaten $x=2$, $y=-3$, $z=5$.

Wie man am Beispiel sieht, geometrisiert man gern einen Vektorraum, indem man sich ein meist rechtwinkeliges n-dimensionales Koordinatensystem, im Beispiel $n=3$, zu Grunde liegend vorstellt, auch bei höheren Dimension $n>3$. In diesem Sinne kann man sich die Vektoren als Pfeile vorstellen, die vom Ursprung des KS ausgehen oder vom Pfeilschaft oder von der Pfeilspitze eines anderen Vektors oder von einem beliebigen Punkt ausgehen.

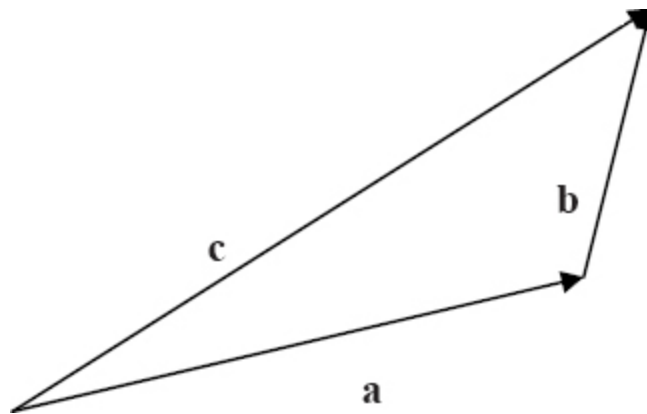
Durch seine Komponenten ist Richtung und Länge des Vektors fixiert, der Ausgangspunkt ist eigentlich beliebig.

Der Begriff Vektor wurde von Graßmann in die Mathematik eingeführt.

Anmerkung: Hermann **Graßmann**, deutscher Mathematiker, Physiker und Sprachforscher (1809-1877)

Beliebt ist natürlich wegen ihrer Anschaulichkeit die Darstellung zweidimensionaler Vektoren:

Figur:



Vektor **a**, Vektor **b**, Vektor **c** und es gilt hier offenbar $\mathbf{c} = \mathbf{a} + \mathbf{b}$

Man kann Vektoren addieren oder subtrahieren, indem man die entsprechenden Komponenten addiert oder subtrahiert.

Man kann einen Vektor mit einem Faktor multiplizieren, indem man jede Komponente mit diesem Faktor multipliziert. Dabei bleibt die Richtung des Vektors gleich, er wird verlängert oder verkürzt oder gar in seiner Richtung umgekehrt, wenn der Faktor negativ ist.

Eine erste Gruppe von **Axiomen** für Vektoren kann also unmittelbar von den Axiomen für reelle Zahlen übernommen werden. Es gilt offenbar für Vektoren **a**, **b** und **c**

$\mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{b} + \mathbf{a}$ Kommutativgesetz für die Addition

Bei der Summenbildung können die Einzelvektoren nach Belieben vertauscht werden.

$(\mathbf{a} + \mathbf{b}) + \mathbf{c} = \mathbf{a} + (\mathbf{b} + \mathbf{c})$ Assoziativgesetz für die Addition
Bei der Summenbildung können Einzelvektoren nach Belieben zu Teilvektoren zusammengefasst werden.

Bezüglich von Faktoren gilt offenbar auch

$\mathbf{a}*(\mathbf{b}*\mathbf{a}) = \mathbf{a}*b*\mathbf{a}$ $\mathbf{a}*(\mathbf{a} + \mathbf{b}) = \mathbf{a}*\mathbf{a} + \mathbf{a}*\mathbf{b}$ sowie $(\mathbf{a}+\mathbf{b})*\mathbf{a} = \mathbf{a}*\mathbf{a} + \mathbf{b}*\mathbf{a}$

Letztere sind die Distributivgesetze für Faktoren.

Die Regeln für die Summenbildung von Vektoren eröffnen auch, umgekehrt gelesen, die Möglichkeit, einen Vektor nach Belieben in Einzelvektoren zu zerlegen, wenn nur deren Summe stimmt.

Von besonderer Bedeutung sind die **Basisvektoren**. Bei gedachter Zugrundelegung eines Koordinatensystems weisen sie je in Richtung einer Koordinatenachse.

Bei einem **elementaren Basisvektor** sind alle Komponenten gleich 0 bis auf die eine Komponente der betroffenen Achse. Sie lauten also der Reihe nach $\mathbf{e}_1 = (1,0,0,\dots)$, $\mathbf{e}_2 = (0,1,0,\dots)$, $\mathbf{e}_3 = (0,0,1,0,\dots)$, usw

Jeder Vektor ist in Basisvektoren zerlegbar oder kann, umgekehrt, aus ihnen kombiniert werden. Je nach Sicht kann man von einer **Spektralzerlegung in Basisvektoren** oder von einer **Linearkombination aus Basisvektoren** sprechen.

Gegeben seien die Basisvektoren $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n$

Ein Vektor \mathbf{a} kann dann dargestellt werden

durch $\mathbf{a} = a_1*\mathbf{e}_1 + a_2*\mathbf{e}_2 + \dots + a_n*\mathbf{e}_n$ n ist die Dimension

a_i sind die Komponenten des Vektors, man schreibt auch $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \dots, a_n)$

2.1.2 Das Skalarprodukt

Der Vergleich zweier Vektoren \mathbf{a} und \mathbf{b} fällt leicht, wenn beide richtungsgleich oder richtungsentgegengesetzt sind, wenn sie sich also nur um einen Faktor unterscheiden. Trifft

dies nicht zu, so stellt sich die Frage, was der Vergleich eigentlich aussagen soll.

Neben der **Richtungsgleichheit** ist die **Orthogonalität** zweier Vektoren, das zueinander Senkrechtstehen, ein besonderes Verhältnis zueinander hinsichtlich ihrer Lage, wie man aus der Geometrie allgemein kennt.

Bei Vorliegen ihrer Zahlenkolonnen kann man aber im Allgemeinen nicht unmittelbar erkennen, ob dies der Fall ist. Leicht hingegen tut man sich bei elementaren Basisvektoren.

Elementare Basisvektoren sind zu sich selber richtungsgleich, ansonsten orthogonal zueinander, weil nur eine Komponente ungleich 0 besetzt ist.

Es gibt daher Sinn, das skalare Produkt für Vektoren zunächst für elementare Basisvektoren einzuführen, das sowohl Richtungsgleichheit wie Orthogonalität ausdrückt, nämlich

Gegeben seien die elementaren Basisvektoren $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n$

Dann ist deren Skalarprodukt gegeben durch

$$\mathbf{e}_i * \mathbf{e}_j = \mathbf{1} \text{ wenn } i = j \text{ die } i\text{-te Komponente ist je } = 1$$

Die Vektoren sind **richtungsgleich**.

$\mathbf{e}_i * \mathbf{e}_j = \mathbf{0}$ wenn $i \neq j$ entsprechende Komponenten sind ungleich

Die Vektoren sind **orthogonal** zueinander.

Man kann darin auch die Multiplikation betroffener stellungsgleicher Komponenten sehen.

Gegeben sei nun ein Vektor $\mathbf{a} = a_1 * \mathbf{e}_1 + a_2 * \mathbf{e}_2 + \dots + a_n * \mathbf{e}_n$

sowie ein Vektor $\mathbf{b} = b_1 * \mathbf{e}_1 + b_2 * \mathbf{e}_2 + \dots + b_n * \mathbf{e}_n$

Wir wenden nun das **Distributivgesetz** an und multiplizieren beide Ausdrücke

$$\mathbf{a} * \mathbf{b} = (a_1 * \mathbf{e}_1 + a_2 * \mathbf{e}_2 + \dots + a_n * \mathbf{e}_n) * (b_1 * \mathbf{e}_1 + b_2 * \mathbf{e}_2 + \dots + b_n * \mathbf{e}_n)$$

Nun ist das Skalarprodukt der Basisvektoren mit verschiedenen Indizes gleich 0, so verbleibt

$$\mathbf{a} * \mathbf{b} = a_1 * b_1 * \mathbf{e}_1 * \mathbf{e}_1 + a_2 * b_2 * \mathbf{e}_2 * \mathbf{e}_2 + \dots = a_1 * b_1 + a_2 * b_2 + \dots + a_n * b_n$$

Das ist nun die allgemeine Definition des Skalarprodukts zweier Vektoren. Das Ergebnis ist ein Skalar, eine Zahl

Allgemeine Eigenschaften des Skalarprodukts

Das Skalarprodukt eines Vektors mit sich selbst

$$\mathbf{a} * \mathbf{a} = a_1 * a_1 + a_2 * a_2 + \dots + a_n * a_n$$

ist geometrisch gesehen das Längenquadrat des Vektors und wird auch als Normquadrat des Vektors bezeichnet. Links ist das Quadrat der Hypotenuse, rechts sind die Quadrate der (An)katheten gemäß dem pythagoräischen Lehrsatz erkennbar. Das gilt nicht nur für den zwei-, drei-, sondern allgemein für den n-dimensionalen Raum.

Anmerkung: **Pythagoras** von Samos, griech. Philosoph (~570-500 v.Chr.)

Weiterhin gilt für das Skalarprodukt

$\mathbf{a} * \mathbf{b} = \mathbf{b} * \mathbf{a}$ Kommutativgesetz, speziell bei Vektoren mit reellen Zahlen

$$(\mathbf{a} + \mathbf{b}) * \mathbf{c} = \mathbf{a} * \mathbf{c} + \mathbf{b} * \mathbf{c} \text{ Distributivgesetz}$$

$$\mathbf{a} * (\mathbf{b} + \mathbf{c}) = \mathbf{a} * \mathbf{b} + \mathbf{a} * \mathbf{c} \text{ Distributivgesetz}$$

Das Skalarprodukt einer Summe von Vektoren ist gleich der Summe der Skalarprodukte der Vektoren.

$(f * \mathbf{a}) * \mathbf{b} = f * \mathbf{a} * \mathbf{b}$ speziell bei Vektoren mit reellen Zahlen, f ist ein Faktor

$$\mathbf{a} * (f * \mathbf{b}) = f * \mathbf{a} * \mathbf{b}$$

$\mathbf{a} * \mathbf{b} = \mathbf{0}$ wenn \mathbf{a} und \mathbf{b} orthogonal zueinander sind

Dass dieses die **Bedingung für die Orthogonalität** ist, wollen wir nun **beweisen**. Wir wählen einen anschaulichen geometrischen Beweis, schließlich stammt der Begriff rechter Winkel, senkrecht und orthogonal aus der euklidischen Geometrie und wurde erst nachträglich verallgemeinert.

Also:

Gegeben sei ein Vektor **a**, von dessen Pfeilspitze gehe ein Vektor **b** ab, sowie ein weiterer Vektor **a**. Wenn nun **b** senkrecht zu **a** sein soll, so muss die Pfeilspitze von **b** vom Beginn des ersten Vektors **a** und vom Ende des zweiten Vektors **a** gleichweit entfernt sein (siehe Figur):

Der erste Distanzvektor ist $\mathbf{c} = \mathbf{a} + \mathbf{b}$

Der zweite Distanzvektor ist $\mathbf{d} = \mathbf{c} - 2*\mathbf{a} = \mathbf{b} - \mathbf{a}$, wegen $2*\mathbf{a} + \mathbf{d} = \mathbf{c}$

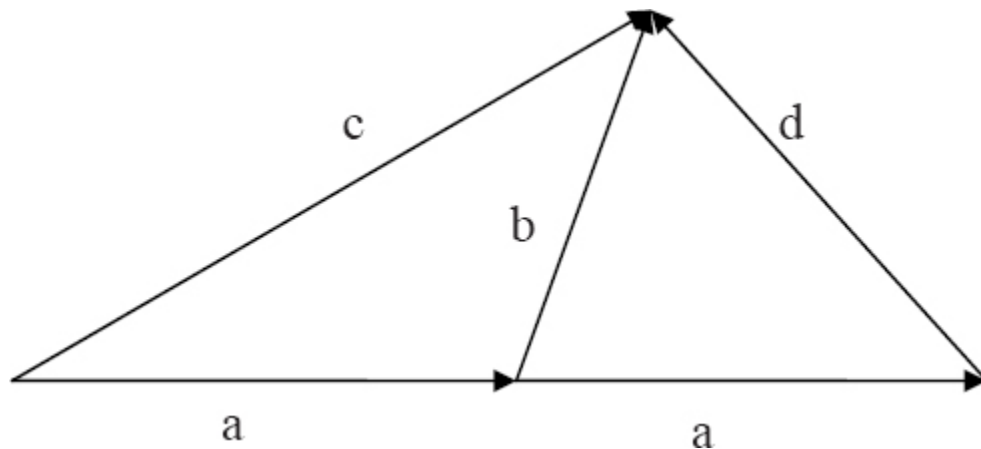
Die Längen und somit auch die Längenquadrate der Distanzvektoren sollen gleich sein, also muss sein $\mathbf{c}*\mathbf{c} = \mathbf{d}*\mathbf{d}$

oder $(\mathbf{a}+\mathbf{b})*(\mathbf{a}+\mathbf{b}) = (\mathbf{b}-\mathbf{a})*(\mathbf{b}-\mathbf{a})$

Ausrechnen ergibt $\mathbf{a}*\mathbf{a} + \mathbf{b}*\mathbf{b} + 2*\mathbf{a}*\mathbf{b} = \mathbf{a}*\mathbf{a} + \mathbf{b}*\mathbf{b} - 2*\mathbf{a}*\mathbf{b}$

Linke und rechte Seite können nur gleich sein, wenn $\mathbf{a}*\mathbf{b} = \mathbf{0}$ ist. Somit bewiesen.

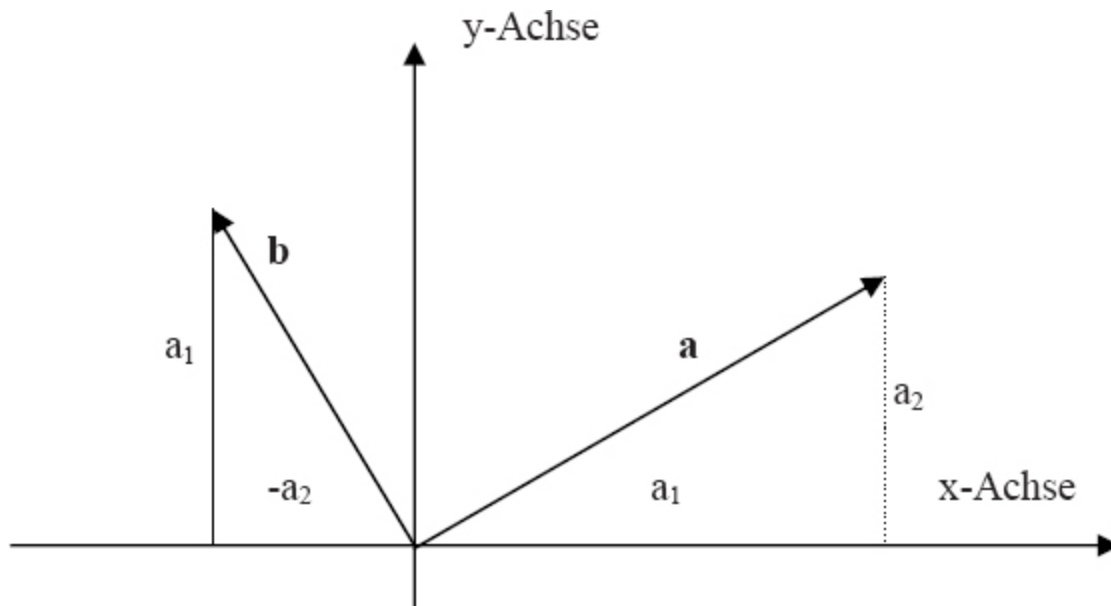
Anmerkung: **Euklid**, griech. Mathematiker (~365-300 v.Chr.)



Nun ein **Beispiel für orthogonale Vektoren im Zweidimensionalen.**

Zu dem Vektor $\mathbf{a} = (a_1, a_2)$ ist der Vektor $\mathbf{b} = (-a_2, a_1)$ orthogonal.

Figur



$$\text{Denn } \mathbf{a} * \mathbf{b} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} -a_2 \\ a_1 \end{pmatrix} = -a_1 * a_2 + a_2 * a_1 = 0$$

Der erste Vektor wird als Zeile, der zweite als Spalte geschrieben.

Dieses verallgemeinert den Begriff des Basisvektors. Basisvektoren sind (im Allgemeinen) zueinander orthogonale Vektoren, die auf 1 normiert sind und den ganzen Vektorraum aufspannen. Für den n-dimensionalen Vektorraum braucht man n Basisvektoren. Es ist nicht möglich, einen Basisvektor durch die restlichen Basisvektoren des Vektorraums auszudrücken, zu kombinieren, denn seien \mathbf{a}_i die Basisvektoren und sei z.B. $\mathbf{a}_1 = a_2 * \mathbf{a}_2 + \dots + a_n * \mathbf{a}_n$