

Die Jahre 1925 und 1926

Kurztext im Rahmen von „Quanten auf Reisen“

Physikdidaktik, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg



Weitere Kurztexte hier: <https://physikdidaktik.uni-freiburg.de/kurztexte/>

Gefördert durch:



Bundesministerium
für Forschung, Technologie
und Raumfahrt

universität freiburg



Inhaltsverzeichnis

1	Die Jahre 1925 und 1926	3
1.1	Die Matrizenmechanik von 1925	3
1.1.1	Die Bohr-Sommerfeld'schen Atommodelle	4
1.1.2	Heisenbergs Umdeutung – Juli 1925	5
1.1.3	Born und Jordan – September 1925	7
1.1.4	Dirac – November 1925	8
1.2	Die Wellenmechanik von Schrödinger 1926	8
1.2.1	Von Fermat und Huygens zu Hamilton und Jacobi	9
1.2.2	Das Fermat'sche Prinzip	10
1.2.3	Das Huygens'sche Prinzip	11
1.2.4	Die Hamilton-Jacobi-Gleichung	11
1.2.5	Der Ansatz von Schrödinger	12
1.3	Die Äquivalenz zwischen Schrödinger und Heisenberg	14

Kapitel 1

Die Jahre 1925 und 1926

Autor: Thomas Filk, Version vom: 5.10.2025

Im Sommer 1925 erschien die berühmte „Umdeutungsarbeit“ von Werner Heisenberg, in welcher er den Grundstein für die sogenannte Matrizenmechanik legte [5]. Noch im selben Jahr folgten zwei weitere Arbeiten, einmal von Max Born und Pascual Jordan [2], und dann die bekannte „Drei Männer Arbeit“ von Born, Jordan und Heisenberg [3]. In diesen Arbeiten wurde die Matrizenmechanik nahezu in ihrer heutigen Form formuliert. Insbesondere findet man schon in der Arbeit von Born und Jordan die kanonischen Vertauschungsrelationen für die „Matrizen“ zum Orts- und Impulsoperator, die in der früheren Arbeit von Heisenberg nur andeutungsweise auftauchen. Noch im November 1925 schrieb Paul Dirac einen Artikel zu den „Grundgleichungen der Quantentheorie“, in dem er sich auf Heisenberg bezog. Im Januar 1926 konnte Wolfgang Pauli das Spektrum des Wasserstoffatoms aus der Matrizenalgebra ableiten.

Anfang 1926 erschien dann die erste von insgesamt vier „Mitteilungen“ von Erwin Schrödinger mit dem Titel „Quantisierung als Eigenwertproblem“, in welcher Schrödinger seine Wellenmechanik formulierte [7]. Schon sehr bald (April 1926) erschien eine weitere Arbeit von Schrödinger, in der er die Äquivalenz zwischen dem Formalismus von Heisenberg und seiner Wellenmechanik zeigen konnte [8].

Auch wenn wir heute die Quantenmechanik in einer ausgereifteren Form lehren und verwenden, lohnt es sich, einen Blick in die Originalarbeiten zu werfen und die Gedankengänge von Heisenberg und Schrödinger nachzuvollziehen.

1.1 Die Matrizenmechanik von 1925

Schon das sehr kurze Abstract der Heisenberg’schen Umdeutungsarbeit deutet die Absicht Heisenbergs an, eine neue Theorie der Mechanik ausschließlich auf beobachtbare Größen aufzubauen:

In der Arbeit soll versucht werden, Grundlagen zu gewinnen für eine quantentheoretische Mechanik, die ausschließlich auf Beziehungen zwischen prinzipiell beobachtbaren Größen ba-

siert.

Die Gründe für diesen Ansatz lagen in der älteren Atomphysik, auf die wir kurz eingehen.

1.1.1 Die Bohr-Sommerfeld'schen Atommodelle

1913 hatte Niels Bohr ein Modell für das Wasserstoffatom vorgeschlagen, bei dem sich ein Elektron auf einer Kreisbahn um einen positiv geladenen Atomkern bewegt [1]. Dies entsprach auch dem zwei Jahre zuvor entwickelten Atommodell von Rutherford. Allerdings hatte Bohr eine einschränkende Bedingung an die Kreisbahnen postuliert, in der die Konstante h , das Planck'sche Wirkungsquantum, auftauchte. Insofern kann man das Bohr'sche Atommodell als erstes Quantenmodell des Atoms auffassen.

Für Kreisbahnen ist die Bohr'sche Quantisierungsbedingung äquivalent zu folgender Bedingung an den Drehimpuls L des Elektrons:

$$L = r_n \cdot p_n = n\hbar, \quad (1.1)$$

wobei r_n und p_n der Radius und der zugehörige Impuls der Kreisbahn zu einer Quantenzahl n sind. Erlaubte Kreisbahnen sind somit solche, bei denen der Bahndrehimpuls ein ganzzahliges Vielfaches von \hbar ist. Zusammen mit der klassischen Bedingung, dass bei einer Kreisbahn die Impulsänderung (manchmal spricht man auch von der Fliehkraft) $\dot{p} = mv^2/r = p^2/mr$ gleich der Coulomb-Kraft sein muss, also

$$\frac{p^2}{mr} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2} \quad (1.2)$$

(m Elektronenmasse, e Elektronenladung, ϵ_0 elektrische Feldkonstante), erhalten wir zwei Bedingungen zwischen p_n und r_n , sodass wir beide Größen als Funktion der Quantenzahl n ausdrücken können:

$$p_n = \frac{e^2 m}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \frac{1}{n} \quad \text{und} \quad r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m} n^2. \quad (1.3)$$

Hier wurde angenommen, dass der Atomkern wesentlich schwerer ist als die Masse der Elektronen. Möchte man die endliche Masse des Atomkerns berücksichtigen, muss man in den folgenden Gleichungen die Elektronenmasse m durch die reduzierte Masse $\mu = mM/(m+M)$ (M die Kernmasse) ersetzen.

Setzt man diese Beziehungen in die klassische Formel für die Energie ein,

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}, \quad (1.4)$$

erhalten wir die nach der Quantisierungsbedingung erlaubten Energien in einem Wasserstoffatom:

$$E_n = -\frac{e^4 m}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (1.5)$$

Eine zweite wichtige Annahme von Bohr war, dass die beobachteten Frequenzen der emittierten oder absorbierten Strahlung von einem Atom nicht den Energien der möglichen

Zustände entsprechen, sondern den Übergängen zwischen zwei möglichen Energien in einem Atom. Das bedeutet, wenn ein Elektron von einem erlaubten Zustand E_n zu einem erlaubten Zustand E_m springt, wird eine Energie $\Delta E = E_m - E_n$ von dem Elektron in Form von Strahlung aufgenommen bzw. abgegeben. Schließlich war die dritte Annahme von Bohr, dass diese Energiedifferenz, die als Strahlung absorbiert bzw. emittiert wird, über die Formel von Planck und Einstein, $\Delta E = h \cdot \nu$, mit der beobachteten Frequenz ν der Strahlung – bzw. der beobachteten Wellenlänge $\lambda = c/\nu$ – in Beziehung steht. Damit waren nach dem Bohr'schen Atommodell die folgenden Frequenzen als Absorptions- bzw. Emissionslinien erlaubt:

$$\nu(n,m) = \frac{1}{h}(E_n - E_m) = \frac{e^4 m}{8\epsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (m,n = 1,2,3,\dots). \quad (1.6)$$

Sommerfeld konnte dieses Modell auf elliptische Bahnkurven erweitern und damit das Verhalten von Wasserstoff in einem magnetischen oder auch einem elektrischen Feld erklären. Doch schon für das Heliumatom schlugen alle Erklärungsansätze fehl. Und auch für die Atome mit mehreren Elektronen konnten keine Bahnkurven für die Elektronen konstruiert werden. Es zeigte sich, dass die Ansätze zur Konstruktion von erlaubten Bahnkurven für die Elektronen nur für integrable Modelle funktionierten, bei denen die Bahnkurven periodisch sind.

1.1.2 Heisenbergs Umdeutung – Juli 1925

Wie schon erwähnt, versucht Heisenberg, die neue Quantenmechanik ausschließlich auf beobachtbare Größen zu bauen. Darunter versteht er in erster Linie die Intensitäten und die Frequenzen der Emissions- und Absorptionslinien. Er verbindet mit den klassischen Variablen x und p (Ort und Impuls) neue Größen X und P , die direkt mit diesen beobachtbaren Intensitäten und Frequenzen zusammenhängen sollen.

Heisenberg möchte in seiner Arbeit vom Juli 1925 zunächst eine vergleichsweise harmlose Frage klären: Wenn ein klassisches Objekt x durch ein quantenmechanisches Objekt X ersetzt wird, durch welches quantenmechanische Objekt wird dann x^2 ersetzt? Zur Klärung dieser Frage betrachtet er zunächst eine Bahnkurve $x(t)$ aus der klassischen Physik. Wir beschränken uns hier auf periodische Bahnkurven (Heisenberg betrachtet auch den aperiodischen Fall, allerdings ist dieser etwas problematisch), sodass wir für die Zeitabhängigkeit dieser Kurve eine Fourier-Zerlegung ansetzen können:

$$x(t) = \sum_m x(m) e^{2\pi i m \nu t}. \quad (1.7)$$

(Die Summation erstreckt sich über alle $m \in \mathbb{Z}$, wobei aus der Realität von $x(t)$ die Einschränkung $x(-m) = x^*(m)$ folgt.) ν ist die Grundfrequenz und $m\nu$ sind die (harmonischen) Oberfrequenzen. Für einen besseren Vergleich zwischen der klassischen Mechanik und den „umgedeuteten“ quantenmechanischen Größen kennzeichnet Heisenberg eine solche Trajektorie noch durch ihren Drehimpuls J , wobei er $J = n\hbar$ schreibt und den Index n für eine klassische Trajektorie noch kontinuierlich lässt. Damit erhält er

$$x(n; t) = \sum_m x(n,m) e^{2\pi i m \nu(n) t}. \quad (1.8)$$

Bildet man das Quadrat dieser Funktion, erhält man:

$$x(n; t)^2 = \sum_{m,k} x(n,m)x(n,k)e^{2\pi i(m+k)\nu(n)t} = \sum_m \left(\sum_k x(n,m-k)x(n,k) \right) e^{2\pi im\nu(n)t}. \quad (1.9)$$

Heisenberg leitet daraus ein klassisches Multiplikationsgesetz für die Objekte $x(n,m)$ ab: $x^2(n,m) = \sum_k x(n,m-k)x(n,k)$. Dies entspricht einer diskreten Faltung im zweiten Index.

Heisenberg möchte nun die klassischen Objekte $x(n,m)$ (die Amplituden) und $\nu(n)$ (die Frequenzen) durch die quantenmechanisch beobachtbaren Größen $X(n,m)$ und $\nu(n,m)$ ersetzen, die er mit den Intensitäten und Frequenzen zu einem Übergang von einem Zustand m in einen Zustand n in Verbindung bringt. Die Frequenzen sollen dabei dem Ritz'schen Kombinationsprinzip genügen, d.h., zu $\nu(n,m)$ soll es Frequenzen $\nu(n)$ und $\nu(m)$ geben, sodass $\nu(n,m) = \nu(n) - \nu(m)$. Für die Größen $X(n,m)$ postuliert Heisenberg aus rein physikalischen Überlegungen zur Kombination der Übergänge zwischen den Zuständen die Regel:

$$X^2(n,m) = \sum_k X(n,k)X(k,m). \quad (1.10)$$

Er drückt diese Gleichung allerdings etwas anders aus (im Wesentlichen ist m für ihn die Differenz zwischen Anfangs- und Endzustand) und erkennt vermutlich nicht, dass es sich hierbei um eine einfache Matrizenmultiplikation handelt. Matrizen gehörten damals nicht zur Standardausbildung in der Physik.

Heisenberg nutzt nun diese Multiplikationsregel, um beispielsweise die Korrekturen zum anharmonischen Oszillator (also einem Oszillator, bei dem in der ansonsten linearen Bewegungsgleichung ein Term proportional zu x^2 auftritt) zu berechnen und vergleicht diese mit bekannten Korrekturtermen.

Heisenberg formuliert für seine „Umdeutungsvariablen“ X das Programm: Man bestimme zunächst Lösungen der Bewegungsgleichungen für X , d.h., wenn die klassischen Bewegungsgleichungen für die Trajektorien die Form

$$\ddot{x} + f(x) = 0 \quad (1.11)$$

haben, dann sollen für X dieselben Bewegungsgleichungen gelten. Er begründet dies mit dem Korrespondenzprinzip zwischen klassischen und quantenmechanischen Größen.

Außerdem soll X eine Quantisierungsbedingung auferlegt werden, die – ebenfalls nach dem Korrespondenzprinzip – das Analogon zur klassischen Quantisierungsbedingung

$$\oint p \, dq = nh \quad (1.12)$$

sein soll. Er benötigt dazu das Produkt von X mit P , den quantenmechanischen Gegenstücken zum Ort x und zum Impuls p . Er stellt fest, dass das Produkt Gl. 1.10 für verschiedene Matrizen nicht kommutiert, also XP nicht dasselbe ist wie PX . Daher postuliert er für das Produkt eine Symmetrisierung: $(XP + PX)/2$. Er leitet dann speziell für den harmonischen Oszillator (bei dem die klassischen Bahnkurven periodisch sind) eine Beziehung ab, die in versteckter Form schon die kanonischen Vertauschungsrelationen enthält. Klar herausgearbeitet werden diese allerdings erst in der Arbeit von Born und Jordan.

1.1.3 Born und Jordan – September 1925

Max Born hatte Mathematik und Physik studiert und war seit 1921 Professor für theoretische Physik in Göttingen. Pascual Jordan war 1925 sein Assistent. Beide kannten Matrizen und erkannten in den Multiplikationsgesetzen der quantenmechanischen Objekte von Heisenberg die Matrixmultiplikation. Sie hatten die Ideen von Heisenberg auch im *statu nascendi* (wie sie selbst schreiben) kennengelernt.

Ihre Arbeit beginnt mit einer ausführlichen Einführung in die Theorie der Matrizen. Sie formulieren die heute als Heisenberg'schen Bewegungsgleichungen bekannten Gleichungen. Dazu erläutern sie zunächst, wie die Ableitung einer Funktion einer Matrix X , also $f(X)$, nach der Matrix X zu interpretieren ist. Dann fordern Sie als Teil des sogenannten Korrespondenzprinzips, dass für eine Hamilton-Matrix H , aufgefasst als Funktion von X (dem Quantenanalogon zur kartesischen Koordinate) und P (dem Quantenanalogon zum Impuls p), die Matrizen X und P die Gleichungen

$$\dot{X} = \frac{\partial H(X,P)}{\partial P} \quad \text{und} \quad \dot{P} = -\frac{\partial H(X,P)}{\partial X} \quad (1.13)$$

erfüllen sollen. Das sind genau die Bewegungsgleichungen, die wir heute als Heisenberg'sche Bewegungsgleichungen bezeichnen.

Von besonderer Bedeutung ist, dass sie die „alte“ Quantisierungsbedingung

$$\oint p \, dq = nh \quad (1.14)$$

durch eine neue, den Matrizen P und X angepasste Bedingung ersetzen, von der sie dann zeigen, dass sie äquivalent ist zu

$$\sum_k (P(n,k)X(k,m) - X(n,k)P(k,m)) = \frac{h}{2\pi i}, \quad (1.15)$$

also dem, was wir heute als die kanonischen Vertauschungsrelationen bezeichnen. Heisenberg hatte diese Beziehung nur an einem Spezialfall (dem harmonischen Oszillator) in versteckter Form erhalten.

Sie berechnen in ihrer Arbeit auch das Spektrum des Hamilton-Operators für den harmonischen Oszillator. Außerdem zeigen Sie, dass die Quadrate der Matrixelemente $|X(n,m)|^2$ mit den Wahrscheinlichkeiten für einen durch die Koordinate x (einen Dipol) induzierten Übergang vom Energiezustand zu der Frequenz $\nu(m)$ zur Energie zu der Frequenz $\nu(m)$ zusammenhängt.

Gelegentlich wurde spekuliert, weshalb Born und Jordan ihre Arbeit nicht zusammen mit Heisenberg geschrieben haben. Hierzu sollte man wissen, dass Heisenberg Mitte Juni nach seiner Rückkehr aus Helgoland, wo er wichtige Rechnungen zu seinen neuen Größen vorgenommen hatte, ein Exemplar seiner Arbeit Born gegeben und diesen gebeten hatte, die Arbeit einzureichen, sofern er den Inhalt als interessant erachtete. Anschließend fuhr Heisenberg bis Ende September in Urlaub und hatte mit Born nicht mehr gesprochen. Born hatte sich die Arbeit von Heisenberg zusammen mit Jordan genauer angeschaut und diese

dann auch eingereicht. Erst in diesem Zusammenhang erkannten Born und Jordan, dass Heisenberg im Wesentliche eine Matrixmultiplikation für seine Größen formuliert hatte. Die Ende September eingereichte Arbeit von Born und Jordan beruhte daher auf keinen weiteren Diskussionen mit Heisenberg und erschien deshalb wohl ohne ihn als Koautor. Erst nach Heisenbergs Rückkehr arbeiteten alle drei an der allgemeinen Formulierung zusammen und veröffentlichten diese Ergebnisse in der „Drei-Männer-Arbeit“.

1.1.4 Dirac – November 1925

Offenbar hatte Max Born ein Exemplar der Arbeit von Heisenberg auch an Ralph Fowler geschickt, der gerade zum Fellow of the Royal Society ernannt worden war, und dieser hatte es an Dirac weitergegeben, dessen Betreuer er war. Offenbar kannte Dirac die spätere Arbeit von Born und Jordan noch nicht, denn er bezieht sich ausschließlich auf die Arbeit von Heisenberg, kommt aber im Wesentlichen zu den gleichen Ergebnissen wie Born und Jordan.

Sein Schwerpunkt war die nicht-kommutative Algebra, die sich aus den Heisenberg'schen Multiplikationsregeln ergab. Anscheinend erkannte auch er nicht, dass es sich um ein Matrixprodukt handelt, sondern bezeichnet die neue Multiplikationsregel als „Heisenberg-Produkt“. Auch Dirac leitet zunächst wichtige Regeln für das Matrixprodukt ab, insbesondere auch Ableitungsregeln. Eine wesentliche Einsicht von Dirac ist, dass der Kommutator zweier Operatoren im Grenzfall großer Quantenzahlen und vergleichsweise kleiner Differenzen von Quantenzahlen bei atomaren Übergängen in eine klassische Poisson-Klammer übergeht. Bei ihm findet man daher die Quantisierungsregel, dass im Quantenformalismus die klassischen Poisson-Klammern durch den Kommutator (multipliziert mit $h/2\pi i$) zu ersetzen sind.

Zunächst irritierend an seiner Arbeit ist, dass Dirac die Poisson-Klammer mit dem heutigen Symbol für den Kommutator bezeichnet, d.h. $[x,y]$ ist die Poisson-Klammer für die beiden Observablen x und y . Der Kommutator wird immer explizit ausgeschrieben. Er formuliert als Quantisierungsbedingung explizit die kanonischen Vertauschungsrelationen:

$$q_r q_s - q_s q_r = 0 \quad p_r p_s - p_s p_r = 0 \quad q_r p_s - p_s q_r = \delta_{rs} i \frac{h}{2\pi} \quad (1.16)$$

Dirac verifiziert, dass der Kommutator von zwei Größen dieselben Beziehungen erfüllt wie die Poisson-Klammer (insbesondere die Antisymmetrie und die Jacobi-Identität) und folgert daraus, dass für die quantisierten Größen ganz allgemein dieselben Beziehungen gelten müssen wie im klassischen Fall. Schon in seiner Einleitung betont er, was erst in der Arbeit abgeleitet wird, dass die Beziehungen zwischen beobachtbaren Größen in der klassischen Physik und in der Quantenphysik dieselben sind, und dass lediglich die algebraischen Regeln – das Multiplikationsgesetz – für die quantenmechanischen Größen andere sind.

1.2 Die Wellenmechanik von Schrödinger 1926

Wenn man heute die Schrödinger-Gleichung ableitet, geschieht das meist über die klassische Energiebeziehung

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad (1.17)$$

von der man verlangt, dass sie über die de Broglie-Beziehungen $E = \hbar\omega$ und $p = \hbar k$ zu einer Dispersionsrelation zwischen der Winkelfrequenz ω und dem Wellenzahlvektor k für ein Feld $\psi(x,t)$ wird, d.h., ω erhält man durch die Ableitung nach der Zeit t und k durch die Ableitung nach dem Ort x .

Erwin Schrödinger hat „seine“ Gleichung im Jahr 1926 jedoch nicht auf diese Weise hergeleitet, sondern ist einen ganz anderen Weg gegangen. In diesem Jahr hat er mehrere Arbeiten zur Quantentheorie veröffentlicht, wobei zunächst von besonderer Bedeutung eine Serie von vier Arbeiten (er nannte sie „Mitteilungen“) mit dem Titel „Quantisierung als Eigenwertproblem“ [7] ist. In diesen Arbeiten entwickelte er seine Idee von einer Wellengleichung, die in ihrer zeitunabhängigen Form eine Eigenwertgleichung für die möglichen Energien eines Systems darstellt. In einer weiteren Arbeit, die am 18. März 1926 bei den Annalen der Physik einging, zeigte Schrödinger die Äquivalenz seiner Formulierung der Quantentheorie mit der Formulierung von Heisenberg.

Schrödinger war beeindruckt von der Arbeit von Louis de Broglie und der Idee, dass jede Form von Materie nicht nur Teilcheneigenschaften haben soll sondern auch Welleneigenschaften. Dies erinnerte ihn an einen Formalismus, der ursprünglich aus der Optik stammt, der von Hamilton aber auf die Mechanik übertragen worden war und als Hamilton-Jacobi-Formalismus bekannt war. Dieser Formalismus soll kurz angedeutet werden.

1.2.1 Von Fermat und Huygens zu Hamilton und Jacobi

In der Optik beschreiben wir die Ausbreitung von Licht oft nach zwei Prinzipien: Zum einen verwenden wir in der geometrischen Optik gerne das Fermat'sche Prinzip, wonach sich Licht in einer optisch inhomogenen Umgebung zwischen zwei Punkten so ausbreitet, dass die Zeit für die Zurücklegung dieser Wegstrecke minimal wird. Das Ergebnis dieses Extremalprinzips sind Trajektorien, die zwei Punkte verbinden. Diese Trajektorien bilden die Grundlage der geometrischen Optik.

Zum anderen verwenden wir das Huygens'sche Prinzip, wonach jeder Punkt einer Wellenfront zum Ausgangspunkt einer kreisförmigen Elementarwelle wird, sodass die Einhüllende all dieser Elementarwellen die neue Wellenfront bildet. Auch wenn wir heute das Huygens'sche Prinzip allgemein als ein Prinzip der Ausbreitung von Wellen interpretieren (Huygens stellte sich wohl eher Stoßprozesse in einem mit winzigen Kugeln angefüllten Medium vor), spielt beim Huygens'schen Prinzip die Wellenlänge keine Rolle; insofern steht das Huygens'sche Prinzip in seiner ursprünglichen Form noch zwischen der Wellenoptik und der geometrischen Optik.

Ausgehend vom Fermat'schen Prinzip gelangt man zu den Huygens'schen Wellenfronten, indem man ein Feld bestimmt, das zu jedem Raumpunkt x die Zeit angibt, die das Licht von einem festen Ausgangspunkt x_0 bis zu diesem Punkt x benötigt. Flächen konstanter Zeit bilden dann die Huygens'schen Wellenfronten. Da sich die Frequenz von Licht während seiner Ausbreitung nicht ändert (die Wellenlänge ändert sich mit der optischen Dichte eines Mediums nach der Gleichung $\nu\lambda(x) = c(x)$), sind Flächen konstanter Zeit auch gleichzeitig Flächen konstanter Phase. Umgekehrt kann man von dem Feld zu diesen Wellenfronten das

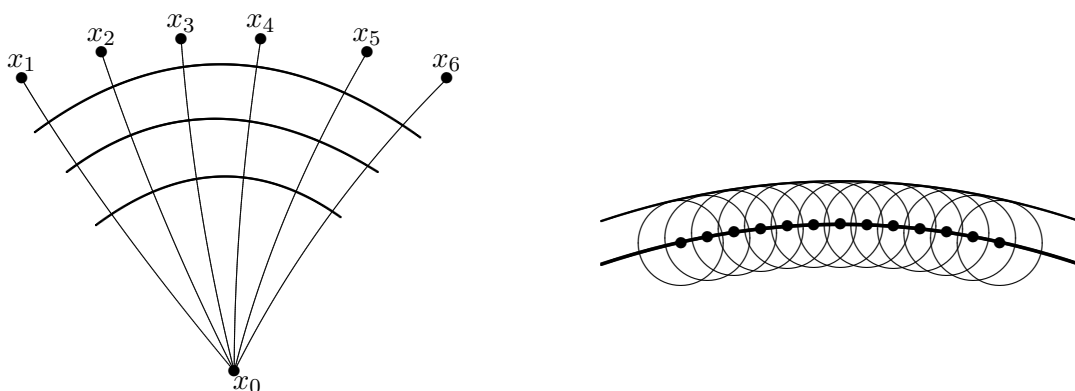


Abbildung 1.1: Die Beziehung zwischen dem Fermat'schen Ausbreitungsprinzip und dem Huygens'schen Ausbreitungsprinzip von Licht. (links) Nach dem Fermat'schen Prinzip breiten sich von einem Punkt x_0 die Strahlen zu Punkten x_i so aus, dass die benötigte Zeit minimal ist. Man kann nun jedem Punkt x im Raum die Zeitdauer t der Trajektorie zuordnen, die das Licht von x_0 zu diesem Punkt x benötigt. Die Linien konstanter Zeit bilden dann Flächen, die von den Trajektorien senkrecht durchstoßen werden. (rechts) Nach dem Huygens'schen Prinzip breiten sich von jedem Punkt einer Wellenfront (das sind die Flächen konstanter Zeit bei Fermat) kreisförmige Elementarwellen aus, deren Einhüllende die neue Wellenfront bildet.

Gradientenfeld bilden. Dieses definiert die Tangenten an die Fermat'schen Trajektorien.

1.2.2 Das Fermat'sche Prinzip

Die Geschwindigkeit von Licht $c(x)$ an einem Punkt x in einem Medium ist durch die optische Dichte bzw. den Brechungsindex $n(x)$ gegeben: $c(x) = c/n(x)$, wobei c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum ist. In optisch anisotropen Medien handelt es sich bei $n(x)$ um einen Tensor; diese Problematik soll hier aber außer Acht gelassen werden. Die Zeit $t(x)$, die das Licht von einem Punkt x_0 zu einem Punkt x entlang einer Trajektorie $\gamma = x(t)$ benötigt, ist

$$T[\gamma](x, x_0) = \int_{\gamma} \frac{n(x')}{c} dx' = \frac{1}{c} \int_{t(x_0)}^{t(x)} n(x(\tau)) \left| \frac{dx}{d\tau} \right| d\tau. \quad (1.18)$$

Hierbei wurde ausgenutzt, dass für genügend kleine Zeitspannen, in denen die Geschwindigkeit als konstant angesehen werden kann, $dt = ds/v$ gilt.

Nach dem Fermat'schen Prinzip ist die Aufgabe nun folgende: Gesucht ist die Trajektorie $x(t)$, die das Funktional $T[x(t)](x, x_0)$ bei festgehaltenem Anfangspunkt x_0 und festgehaltenem Endpunkt x minimiert. Angenommen, diese Trajektorie ist gefunden – dies ist die Trajektorie, die das Licht in der Näherung der geometrischen Optik tatsächlich durchläuft –, dann können wir jedem Punkt x im Raum diese Zeit $T(x, x_0) = \min_{[x(t)]} T[x(t)](x, x_0)$ zuordnen. Die Flächen $T(x, x_0) = \text{const}$ zu einem festgehaltenen Punkt x_0 bilden die Huygens'schen Wellenfronten.

1.2.3 Das Huygens'sche Prinzip

Kennt man umgekehrt diese Flächen konstanter Zeit (bzw. konstanter Phase), so kann man an jedem Punkt die Flächennormale bilden (genauer den Gradienten des Wirkungsfeldes, also $\nabla S(x)$) und zu diesem Vektorfeld die Trajektorien konstruieren. Diese Trajektorien sind die Fermat'schen Trajektorien. Sie durchstoßen die Huygens'schen Wellenfronten orthogonal (siehe Abb. 1.1 (links)).

Das Huygens'sche Prinzip beschäftigt sich mit der Ausbreitung dieser Flächen zu konstanten Zeiten. Jeder Punkt einer solchen Fläche bildet den Ausgangspunkt für eine Elementarwelle (siehe Abb. 1.1 (rechts)). Die Einhüllende all dieser Elementarwelle (die sich lokal jeweils mit der durch die optische Dichte des Mediums gegebenen Lichtgeschwindigkeit ausbreiten) bildet dann die nächste Fläche konstanter Zeit. Auf diese Weise erhält man die Flächen konstanter Zeiten und kann aus den Gradienten zu diesen Flächen wieder das Vektorfeld zu den Trajektorien bestimmen.

1.2.4 Die Hamilton-Jacobi-Gleichung

Wir beginnen die analytische Mechanik heute gerne mit dem Lagrange-Formalismus, aus dem die Bewegungsgleichungen – die Euler-Lagrange-Gleichungen – abgeleitet werden. Dieser Formalismus hat zwei große Vorteile: (1) das Hamilton'sche Prinzip, wonach das Integral über die Lagrange-Funktion als Funktional der Bahnkurven für die realisierte Bahnkurve stationär wird, ist unabhängig vom gewählten Koordinatensystem. Daher gilt es auch für verallgemeinerte Koordinaten, die den Zwangsbedingungen des Problems angepasst sind. (2) Das Prinzip lässt sich auch relativistisch invariant formulieren (z.B. in einer Feldtheorie), wohingegen der Hamilton'sche Formalismus die Auszeichnung einer Zeitkoordinate erfordert.

Gegeben sei eine Lagrange-Funktion $L(q, \dot{q}, t)$, die oft die Form

$$L(q, \dot{q}, t) = T(q(t), \dot{q}(t)) - V(q(t), t) \quad (1.19)$$

annimmt. T ist die kinetische Energie ausgedrückt in den verallgemeinerten Koordinaten q und \dot{q} und meist eine quadratische Funktion von \dot{q} . V ist die potenzielle Energie, die oft nur von q abhängt, aber eventuell noch explizit von der Zeit t abhängen kann. Wir definieren nun das Wirkungsfunktional:

$$S[q(t)](q_1, t_1, q_0, t_0) = \int_{t_0}^{t_1} L(q(t), \dot{q}(t), t) dt. \quad (1.20)$$

Das Wirkungsfunktional ist ein Funktional von Wegen $q : [t_0, t_1] \rightarrow \mathbb{R}^n$, die alle zum Zeitpunkt t_0 an einem Punkt $q_0 = q(t_0)$ beginnen und zum Zeitpunkt t_1 am Punkt $q_1 = q(t_1)$ enden. Diese funktionale Abhängigkeit wird durch die eckige Klammer $[q(t)]$ ausgedrückt. Zur Ableitung der Euler-Lagrange-Gleichungen bestimmt man die erste Variation von $S[q(t)]$ unter den genannten Randbedingungen, Anfangs- und Endpunkt also festgehalten werden.

Wir betrachten nun die Wirkung als eine Funktion des Orts q und der Zeit t , bei dem eine Trajektorie endet, die bei q_0 zum Zeitpunkt t_0 beginnt. Bei dieser Trajektorie soll es

sich um eine Lösung der Euler-Lagrange-Gleichung handelt. Das bedeutet:

$$S(q,t; q_0, t_0) = \min_{[q(t)]} S[q(t)](q,t, q_0, t_0) = \min_{[q(t)]} \int_{t_0}^{t_1} L(q(t), \dot{q}(t), t) dt. \quad (1.21)$$

Wir setzen also in Gl. 1.20 eine Lösung der Euler-Lagrange-Gleichung ein und betrachten die Wirkung nicht mehr als Funktional von Trajektorien sondern als Funktion der Endpunkte für die physikalisch realisierten Trajektorien. Die Ausgangsdaten, q_0 und t_0 , werden festgehalten, sodass die Wirkung zu einem Feld $S(q,t)$ wird.

Statt nun dieses Feld dadurch zu berechnen, dass man für jeden Punkt (q,t) die Lösung der Euler-Lagrange-Gleichung bestimmt, diese Lösung in die Lagrange-Funktion einsetzt und das Wirkungsintegral berechnet, kann man direkt eine partielle Differentialgleichung für $S(q,t)$ aufstellen. Man erhält diese Differentialgleichung, indem man zunächst die Legendre-Transformierte $H(q,p,t)$ von $L(q,\dot{q},t)$ bezüglich der Variablen \dot{q} bestimmt, also

$$H(q,p,t) = \min_{\dot{q}} (p\dot{q} - L(q,\dot{q},t)). \quad (1.22)$$

Dies ist die Hamilton-Funktion. Ersetzt man nun den Impuls p durch den Gradienten von S ,

$$p = \nabla S(q,t), \quad (1.23)$$

und berücksichtigt, dass die Zeitableitung der Wirkung gleich der Hamilton-Funktion ist, erhält man

$$H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) = -\frac{\partial S}{\partial t}. \quad (1.24)$$

Dies ist die Hamilton-Jacobi-Gleichung. Wurde die Funktion $S(q,t)$ gefunden, erhält man daraus eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung für die Impulse (Gl. 1.23).

1.2.5 Der Ansatz von Schrödinger

In seiner ersten Mitteilung vom Januar 1926 löst Schrödinger das Wasserstoffproblem und zeigt, dass er mit seiner Formulierung, die sich aus einem Extremalprinzip ergibt, dieselben Energiewerte erhält wie sie aus der Bohr'schen Quantisierungsbedingung folgen.

Die Idee von Schrödinger ist folgende: Ausgangspunkt ist die Hamilton-Jacobi-Gleichung (s.o.) für das Wasserstoffproblem. Das Feld $S(q,t)$ fasst er als (komplexe) Phase einer Welle auf, wie es auch bei einer Kurzwellenasymptotik gemacht wird:

$$\psi(q,t) = \exp \frac{S(q,t)}{K}. \quad (1.25)$$

Die Konstante K führt er aus Dimensionsgründen ein – sie muss die Dimension einer Wirkung haben – und setzt sie später gleich $h/2\pi$, um die volle Übereinstimmung mit den Bohr'schen Energiewerten zu erhalten. Außerdem nutzt er aus, dass $\frac{\partial S}{\partial t} = -E$ ist. Mit

$$\frac{\partial S}{\partial q} = \frac{K}{\psi(q,t)} \frac{\partial \psi(q,t)}{\partial q} \quad (1.26)$$

ergibt sich für die Hamilton-Jacobi-Gleichung:

$$\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)^2 - \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r}\right) \psi(q,t)^2 = 0. \quad (1.27)$$

Bisher hat Schrödinger nur eine Umformulierung der klassischen Hamilton-Jacobi-Gleichung vorgenommen. Nun definiert Schrödinger eine „Wirkung“ zu dieser Feldgleichung, indem er einfach das räumliche Integral bildet:

$$J = \int dx dy dz \left\{ \left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)^2 - \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r}\right) \psi(x,y,z,t)^2 \right\}. \quad (1.28)$$

Aus dieser Wirkung formuliert Schrödinger eine Quantisierungsbedingung, die darin besteht, dass die erste Variation verschwinden soll. Dies führt auf die Gleichung

$$\Delta\psi + \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r}\right) \psi = 0 \quad (1.29)$$

bzw., mit $K = h/2\pi$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi(q,t) - \frac{e^2}{r} \psi(q,t) = E\psi(q,t). \quad (1.30)$$

Dies ist die Schrödinger-Gleichung in ihrer heutigen Form. Schrödinger erkannte, dass es sich hier um eine Eigenwertgleichung handelt, daher postuliert er als Quantisierungsbedingung die Lösungen dieser Eigenwertgleichung. Er zeigt, dass es für positive Energien und physikalisch sinnvolle Randbedingungen immer Lösungen gibt, dass die negativen Energien aber diskret sind und mit den Bohr'schen Energien übereinstimmen.

Der Hamilton-Jacobi-Formalismus enthält keine Wellenlänge, ebenso wie auch das Huygens'sche Prinzip für die Optik unabhängig von einer Wellenlänge ist. Schrödinger war aber bekannt, dass sich das Huygens'sche Prinzip bzw. die Eikonalgleichung (die „Hamilton-Jacobi-Gleichung“, die sich aus dem Fermat'schen Extremalprinzip ergibt) als der führende Term einer Kurzwellenasymptotik, also einer Näherung für sehr kurze Wellenlängen (im Vergleich zu den Abmessungen von optischen Hindernissen oder Inhomogenitäten), aus den Maxwell-Gleichungen ergibt.

Während Schrödinger in seiner ersten Mitteilung vom Januar 1925 „seine“ Gleichung aus einem Variationsprinzip ableitet, dessen Wirkungsfunktional er mehr oder wenige willkürlich als Integral über die Hamilton-Jacobi-Gleichung schreibt, versucht er in seiner zweiten Mitteilung vom 23. Februar 1926 seine Feldgleichung aus einer Wellengleichung (mit einem d'Alembert-Operator) abzuleiten. Erst in seiner vierten Mitteilung formuliert Schrödinger die zeitabhängige Version in der Form, wie wir sie heute kennen.

In seiner zweiten Mitteilung geht er auch ausführlicher auf die Beziehungen zur Optik – die Beziehung zwischen Fermat'schem und Huygens'schem Prinzip – ein. Außerdem löst er auch das Eigenwertproblem für den harmonischen Oszillator sowie für den rotierenden Körper.

1.3 Die Äquivalenz zwischen Schrödinger und Heisenberg

Die Lösungen „seiner“ Gleichung waren Wellenfunktionen $\psi_n(x)$ zu den möglichen Energien E_n . Die wesentliche Beziehung zwischen dem Heisenberg'schen Formalismus, bei dem jeder klassischen Größe (Ort, Impuls, Energie, Drehimpuls, etc.) eine Matrix – ein mathematisches Objekt mit zwei Indizes – zugeordnet wurde, und seinem Formalismus bestand in der Beziehung

$$F(m,n) = \int_V \psi_m(x) f(x, -i\hbar\partial/\partial x) \psi_n(x) dV. \quad (1.31)$$

Hierbei ist $f(x,p)$ eine klassische beobachtbare Größe, ausgedrückt als Funktion des Orts x und des Impulses p . Den Impuls p ersetzt Schrödinger durch den Operator $-i\hbar\partial/\partial x$, wobei er die Beziehung von de Broglie zwischen dem Impuls und der Wellenlänge ausnutzt. Wenn, nach de Broglie, ein Elektron mit einem scharfen Impuls p durch eine Welle mit einer scharfen Wellenlänge $\lambda = p/h$ und damit durch

$$\psi(x) = \exp\left(i\frac{px}{h}\right) \quad (1.32)$$

zu beschreiben ist, dann erhält man den Impuls durch die Ableitung nach x , multipliziert mit h (und der imaginären Einheit i). Schrödinger diskutiert ausführlich, weshalb man die Funktion f in ihren Argumenten x und p noch symmetrisieren muss, da die Multiplikation mit x und die Ableitung nach x nicht vertauschen. Die Größe $F(m,n)$ entspricht dann der Heisenberg'schen Matrix, durch die man die klassische Größe in der Quantentheorie zu ersetzen hat.

Zum Zeitpunkt dieser Publikation kannte Schrödinger alle drei Arbeiten von Heisenberg, Born und Jordan, und er bezieht sich auch darauf. Er hatte erkannt, dass das allgemeine Problem – bestimme das Spektrum des Energieoperators $H = \frac{1}{2m}P^2 + V(Q)$ für Operatoren P und Q , welche den kanonischen Vertauschungsrelationen $[Q,P] = -i\hbar$ genügen – äquivalent ist zu dem Problem, die Eigenwertgleichung für den Operator $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)$ zu lösen. Insbesondere erkannte er, dass die Operatoren „Multiplikation mit x “ und $-i\hbar\partial/\partial x$ die von Born und Jordan gefundenen kanonischen Vertauschungsregeln erfüllen.

Literaturverzeichnis

- [1] Bohr, N.; *On the Constitution of Atoms and Molecules*; Philosophical Magazine **26**,1 (1913).
- [2] Born, M., Jordan, P.; *Zur Quantenmechanik*; Zeitschrift für Physik Bd. 34 (1925) 858–888.
- [3] Born, M., Heisenberg, W., Jordan, P.; *Zur Quantenmechanik II*; Zeitschrift f. Physik 35 (1925) 557–615.
- [4] Dirac, P.; *The fundamental equations of quantum mechanics*; Proceedings Royal Society, Band 9, 1925, S. 642–653.
- [5] Heisenberg, W.; *Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen*; Zeitschrift für Physik Bd. 33 (1925) 879–893.
- [6] Pauli, W.; *Über das Wasserstoffspektrum vom Standpunkt der neuen Quantenmechanik*; Zeitschrift für Physik, Band 36 (1926) 336–363.
- [7] Schrödinger, E.; *Quantisierung als Eigenwertproblem*; Annalen der Physik 1926, 4. Folge; Erste Mitteilung, Bd. 79, S. 361–376 (eingegangen 27. Januar 1926), Zweite Mitteilung, Bd. 79, S. 489–527 (eingegangen 23. Februar 1926), Dritte Mitteilung, Bd. 80, S. 437–490 (eingegangen 10. Mai 1926), Vierte Mitteilung, Bd. 81, S. 109–139 (eingegangen 21. Juni 1926).
- [8] Schrödinger, E.; *Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen*; Annalen der Physik 79 (1926) 734–756 (eingegangen 18. März 1925).