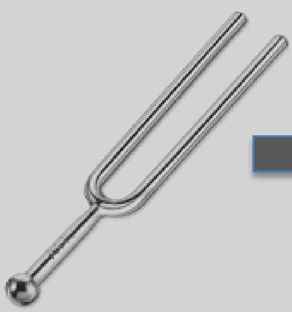
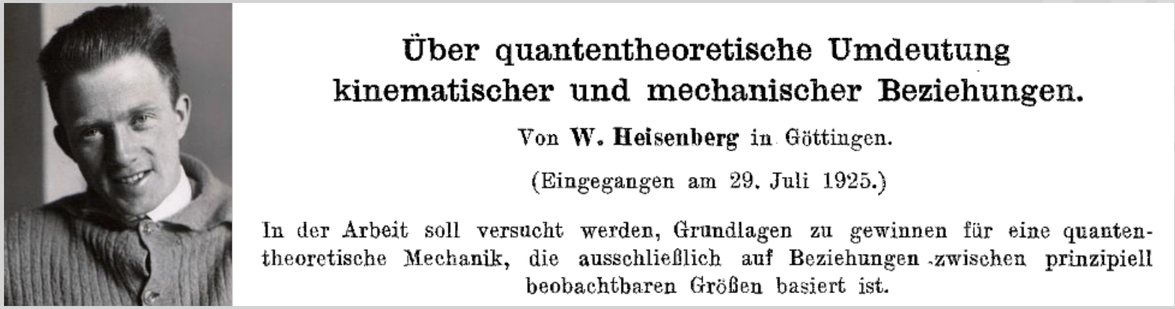
Von der Stimmgabel zur Matrizenmechanik

Oliver Passon
Bergische Universität Wuppertal





Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen.

Von **W. Heisenberg** in Göttingen.

(Eingegangen am 29. Juli 1925.)

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

$$f_1 = 440\text{Hz}$$

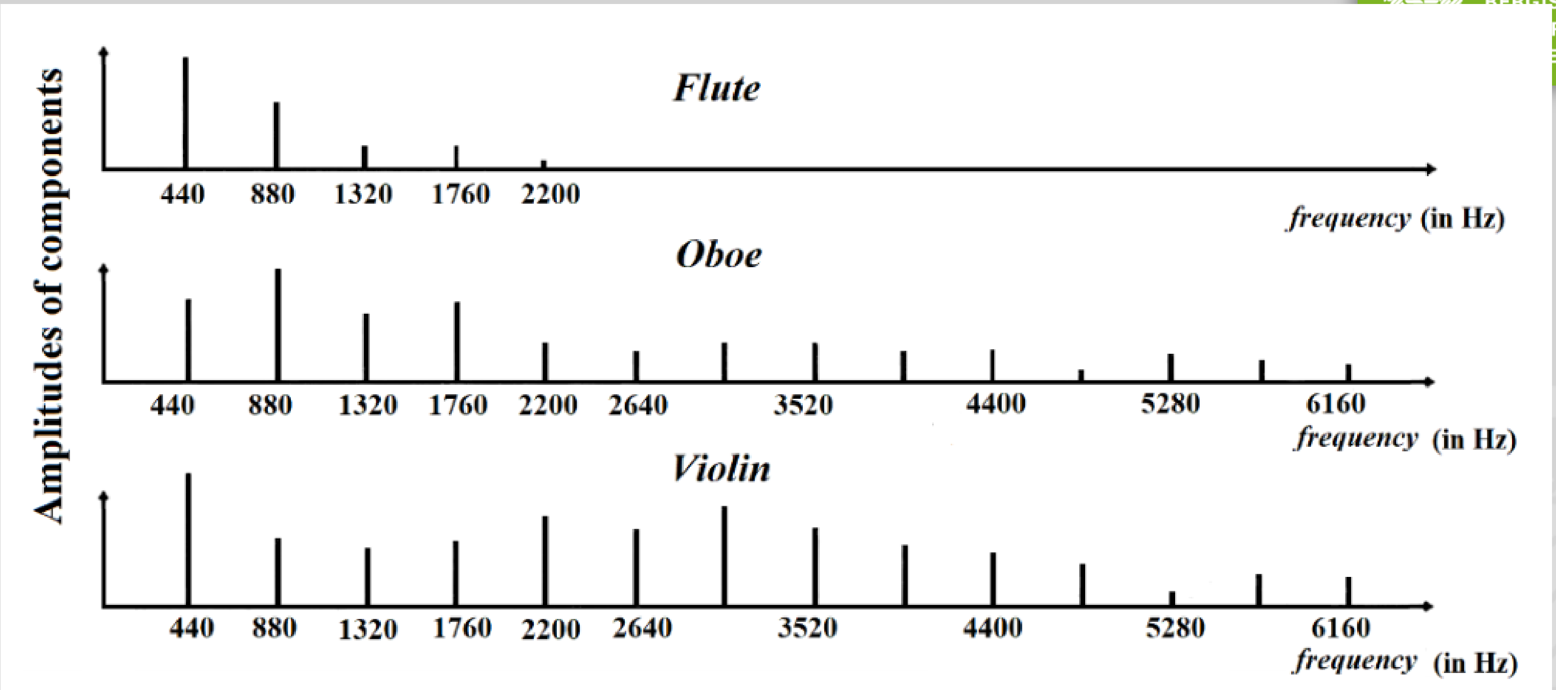
$$\left.\begin{aligned} f_2 &= 2 \cdot f_1 = 880\text{Hz}\ (\text{a}^2) \\ f_3 &= 3 \cdot f_1 = 1320\text{Hz}\ (\text{e}^3) \end{aligned}\right\} \text{Quinte (2:3)}$$

$$\left.\begin{aligned} f_4 &= 4 \cdot f_1 = 1760\text{Hz}\ (\text{a}^3) \\ f_5 &= 5 \cdot f_1 = 2200\text{Hz}\ (\text{cis}^4) \end{aligned}\right\} \text{Große Terz (4:5)}$$

$$\vdots$$

$$f_m = m \cdot f_1$$

Das Spektrum der Oberschwingungen charakterisiert die Schallquelle!



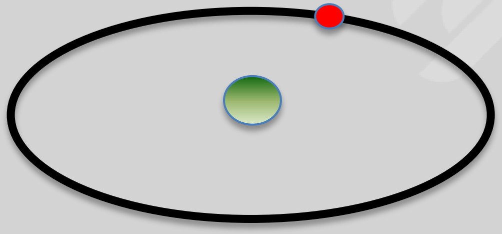
$$x(t) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} a_m \cdot \exp i\omega_m t.$$

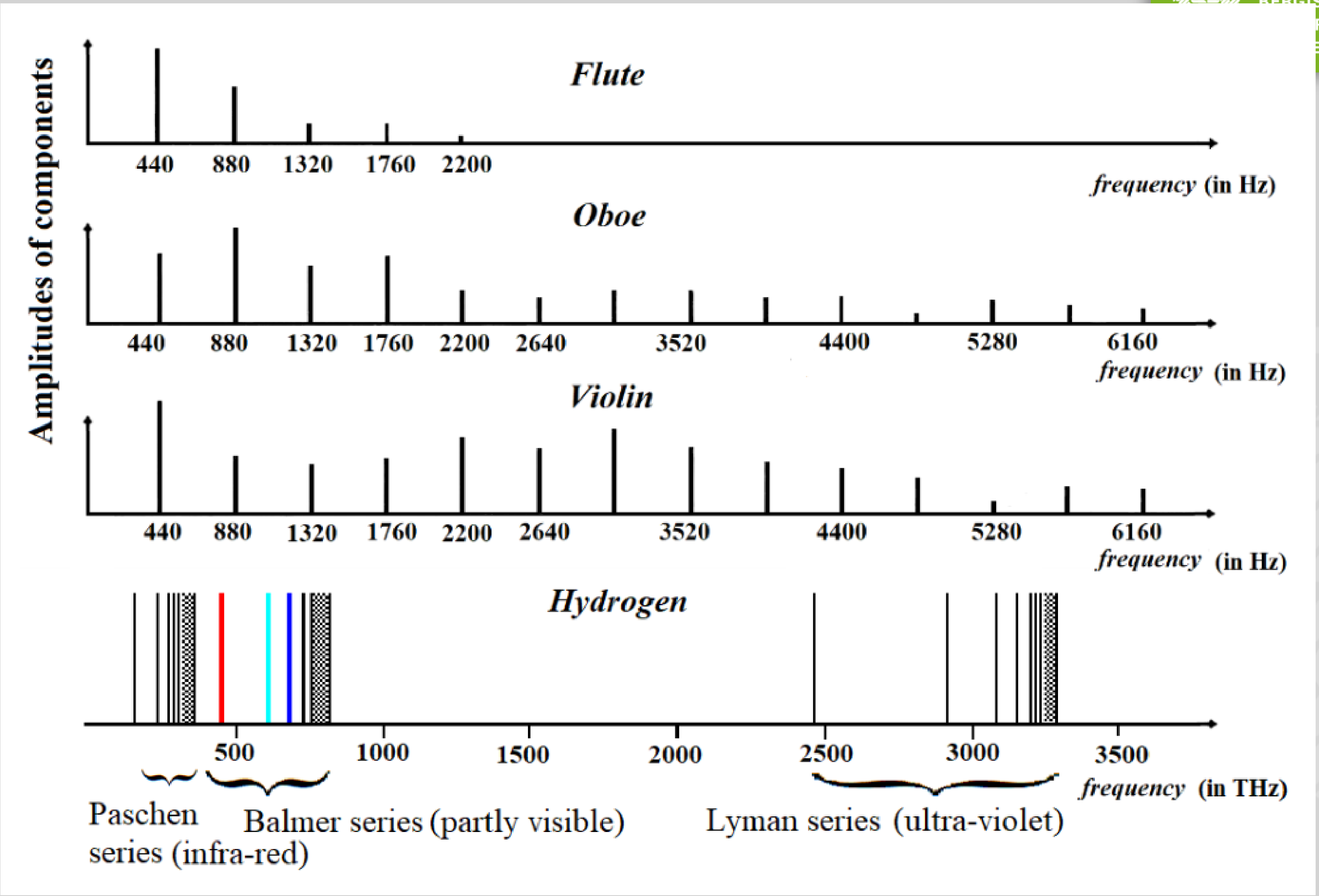
Jede periodische Bewegung kann als (Fourier-)Summe aus Grund- und Oberschwingungen dargestellt werden ($\omega_m = m \cdot \omega_0$).

Akustische Schwingungen entstehen durch vibrierende Körper – elektromagnetische Schwingungen durch vibrierende Ladungen.

Das Monochord der Atomphysik heißt…

…Wasserstoff:





Was und wie schwingt der Wasserstoff?

Alles andere als regellos:

Rydberg-Formel (1888): $$\frac{1}{\lambda_{mn}} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

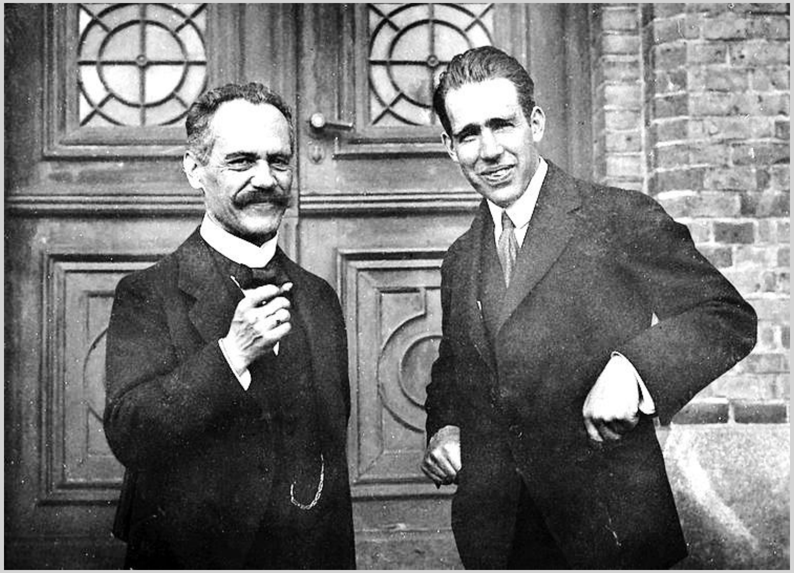
Ritzsches Kombinationsprinzip (1908): $\nu_{ij} + \nu_{jk} = \nu_{ik}$

There is one circumstance which suggests doubts whether the analogue of radiating bodies is to be sought at all in ordinary mechanical or acoustical systems vibrating about equilibrium. For the latter [...] give rise to equations involving the square of the frequency [...]. On the other hand, the formulæ and laws derived from observation of the spectrum appear to introduce more naturally the first power of the frequency. For example, this is the case with Balmers's formula.

Lord Rayleigh F.R.S. (1897) XLV. On the propagation of waves along connected systems of similar bodies. *Philosophical Magazine* 44:269, 356–36.

$$x(t) \propto e^{i\omega t} \rightarrow \ddot{x} \propto \omega^2 \cdot x(t)$$

Niels Bohr (1913)



Idee: Diskrete Bahnen mit $L = n\hbar$. Strahlung hat nicht die Frequenz der **Umlaufbewegung**, sondern entspricht der Energiedifferenz eines **Übergangs** zwischen zwei Zuständen!

$$\underbrace{\nu_{m,n} = \frac{E_m - E_n}{h}}_{\text{Ritz}} \qquad \underbrace{E_n \propto \frac{1}{n^2}}_{\text{Rydberg}}$$

Häufiger Einwand: „Das ist bloß eine ad-hoc Lösung."

Replik: „Bohr nimmt der Bewegung der Elektronen auf ihrer Bahn ihre ***physikalische Bedeutung***. Dies ist der erste Schritt zur ***Abschaffung*** der Bahn!"

Strahlungsfrequenz ≠ Umlauffrequenz

Das Bohrsche Korrespondenzprinzip

$$\frac{1}{\lambda_{nm}} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

$$\nu_{nm} = cR\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

$$\nu_{nm} = cR\left(\frac{n^2 - m^2}{n^2 m^2}\right)$$

$$= cR\,\frac{(n-m)(n+m)}{n^2 m^2}$$

Annahme: $n \approx m \gg (n-m) = \Delta n$

$$\nu_{nm} \approx cR\,\frac{\Delta n \cdot 2n}{n^4} = \underbrace{\frac{2cR}{n^3}}\Delta n$$

$$\frac{2cR}{n^3} = \frac{m_e e^4}{4h^3 {\varepsilon_0}^2 n^3} = \nu_n$$

Bahnfrequenz

Bei hoher Anregung und $\Delta n = 1$ entspricht die Abstrahlung der Bahnfrequenz!

Ein konkretes Beispiel:

$$n = 500 \to m = 499, 498, \cdots$$

$$\begin{aligned} \nu_{500,499} &\equiv \nu \\ \nu_{500,498} &= 2,0 \cdot \nu \\ \nu_{500,497} &= 3,0 \cdot \nu \\ \nu_{500,496} &= 4,0 \cdot \nu \end{aligned}$$

Für hochangeregte Atome ergibt sich ein harmonisches Spektrum. $\nu_{500\ 499}$ entspricht der Bahnfrequenz für $n \approx m$. Bei $500 \to 498$ ergibt sich die „Oktave“ $\nu' = 2\nu$…

Korrespondenz zwischen *Ordnung der Obertöne* n und *Weite des Quantensprungs* Δn.

Das ***Korrespondenzprinzip*** macht noch weitere (sehr spezifische) Vorhersagen:

Intensität der Strahlung:

„Klassisch": $I \propto {a_m}^2$

$$x(t) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} a_m \cdot \exp i\omega_m t.$$

Einstein-Koeffizient (1917)

Nach Bohr: $I \propto A_{nm}$

Bei $n \approx m \gg \Delta n$ Korrespondenz $A_{nm} \cong |a_{\Delta n}|^2$

Daraus folgt die Möglichkeit Auswahlregeln zu begründen etc. siehe:
Fedak und Prentis (2002) Quantum jumps and classical harmonics. AJP **70**(3): 332.

BERGISCHE UNIVERSITÄT WUPPERTAL

Heisenberg 1925:

Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen.

Von **W. Heisenberg** in Göttingen.

(Eingegangen am 29. Juli 1925.)

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

Grundidee: Anstatt das Korrespondenzprinzip auf ***einzelne Probleme*** anzuwenden (manchmal erfolgreich – manchmal nicht) sollte man ein ***generisches Problem*** mit ihm lösen und dadurch den ***allgemeinen Formalismus*** der neue Quantenmechanik erhalten!

„klassisch“

$$x(t) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} a_m \cdot \exp i\omega_m t.$$

quantenmechanisch

$$\hat{x}(t) = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2}e^{i\omega_{1,2}t} & a_{1,3}e^{i\omega_{1,3}t} & \cdots \\ a_{2,1}e^{i\omega_{2,1}t} & a_{2,2} & a_{2,3}e^{i\omega_{2,3}t} & \cdots \\ a_{3,1}e^{i\omega_{3,1}t} & a_{3,2}e^{i\omega_{3,2}t} & a_{3,3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\omega_{n,m} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$$

Heisenberg kannte 1925 den Begriff „Matrix“ noch nicht. Er findet die „Matrizenmultiplikation“ auf folgendem Wege: Wenn das Zahlenschema $x_{nm}(t)$ die Ortsfunktion $x(t)$ ersetzt, wie bildet man z. Bsp. ${x_{nm}}^2$?

$$\begin{aligned} (|x(t)|^2)_{n,m} &= \sum_k a_{n,k} \exp(i\omega_{n,k}t) a_{k,m} \exp(i\omega_{k,m}t) \\ &= \sum_k a_{n,k} a_{k,m} \exp\big(i\underbrace{(\omega_{n,k} + \omega_{k,m})}_{=\omega_{n,m}} t\big). \end{aligned}$$

„Zeile × Spalte“

Ritzsches Kombinationsprinzip (1908)

Der wichtigste Schritt ist getan!

> **Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen.**
>
> Von **W. Heisenberg** in Göttingen.
>
> (Eingegangen am 29. Juli 1925.)
>
> In der Arbeit soll versucht werden, Grundlagen zu gewinnen für eine quantentheoretische Mechanik, die ausschließlich auf Beziehungen zwischen prinzipiell beobachtbaren Größen basiert ist.

Wird der „Ort“ $x(t)$ zu einer Matrix $x_{n,m}(t)$?

Besser: Wo bisher die reelwertige Funktion $x(t)$ verwendet wurde, muss in der QM das Zahlenschema $x_{n,m}(t)$ eingesetzt werden. Das bedeutet:

- Die QM ist eine Theorie der ***Übergänge*** und nicht der ***Zustände***.
- Die QM erlaubt ***keine*** raumzeitliche Einbettung der Vorgänge!
- Dies steckt bereits in der Bohrschen Frequenzbed.: $\nu_{mn} = \frac{E_m - E_n}{h}$

Was macht man mit der Quantisierungsbedingung?

$$J = \oint p dq = nh.$$

(Integration über eine Periode)

Im eindimensionalen Fall: $p = m_e \dot{x}$ also $dq = dx = \dot{x} dt$

$$\oint m_e \dot{x}^2 dt = nh.$$

Um den „$x \longrightarrow x_{nm}$-Trick“ anwenden zu können, muss dies zunächst als (klassische) Fourierreihe dargestellt werden:

$$m_e \dot{x} = m_e \sum_{m=-\infty}^{+\infty} i\omega_{n;m} \cdot x_{n;m} \cdot e^{i\omega_{n;m} t}.$$

Achtung: Zwei Indizes $(n; m)$ obwohl klassisch! n nummeriert den Zustand und m die Ordnung des Obertons ($\omega_{n;m} = m \cdot \omega_{n;1}$). Konvention ab jetzt: Semikolon trennt klassische und Komma Quantenvariablen!

Also:

$$m_e\dot{x} = m_e \sum_{m=-\infty}^{+\infty} i\omega_{n;m} \cdot x_{n;m} \cdot e^{i\omega_{n;m}t}.$$

mit $\dot{x}(t) = \sum i\omega_{n;k} x_{n;k} e^{i\omega_{n;k}t}$ multiplizieren,

in $\oint m_e \dot{x}^2 dt = nh.$ einsetzen und integrieren!

Überraschung: Diese Rechnung ist ganz einfach! Weil über eine volle Periode $T = \frac{2\pi}{\omega_{n;1}}$ integriert wird und die Funktionen periodisch sind ($f(x) = f(x+T)$) fällt fast alles weg! Nur die Terme mit $k = -m$ überleben. Die Stammfunktion lautet dann $\omega_{n;m}{}^2 |x_{n;m}|^2 t$. Wegen $\omega_{n;m} = m \cdot \omega_{n;1}$ findet man schließlich:

$$\oint m_e \dot{x}^2 dt = 2\pi m_e \sum_{m=-\infty}^{+\infty} m^2 \omega_{n;1} |x_{n;m}|^2.$$

$$\oint m_e \dot{x}^2 dt = 2\pi m_e \sum_{m=-\infty}^{+\infty} m^2 \omega_{n;1} |x_{n;m}|^2.$$

Von diesem (klassischen) Ausdruck wurde bisher gefordert, dass er ein ***Vielfaches*** von h ist! Das sollte besser gehen…

$$\frac{d}{dn} nh = \frac{d}{dn} \oint m_e \dot{x}^2 dt$$

$$h = 2\pi m_e \sum_{m=-\infty}^{+\infty} m \frac{d}{dn} [\underbrace{m \cdot \omega_{n;1}}_{=\omega_{n;m}} \cdot |x_{n;m}|^2]$$

Aus der Dispersionstheorie war folgende Korrespondenzregel bekannt:

$$\alpha \frac{d\Phi(n;\alpha)}{dn} \longleftrightarrow \phi(n+\alpha, n) - \Phi(n, n-\alpha).$$

Gar nicht unplausibel: $\nu = \frac{dE}{dJ}$ entspricht $\nu = \frac{\Delta E}{h}$

$$h = 2\pi m_e \sum_{m=-\infty}^{+\infty} m \frac{d}{dn} [\underbrace{m \cdot \omega_{n;1}}_{=\omega_{n;m}} \cdot |x_{n;m}|^2]$$

$$\alpha \frac{d\Phi(n;\alpha)}{dn} \longleftrightarrow \phi(n+\alpha,n) - \Phi(n,n-\alpha).$$

$$h = 4\pi m_e \sum_{m=0}^{+\infty} [\omega_{n,m} \cdot |x_{n,m}|^2] - [\omega_{m,n} \cdot |x_{m,n}|^2]$$

Wenn man verallgemeinerte Koordinaten q verwendet (q und p bleiben unabhängig) findet man (Born & Jordan 1925):

$$\sum_m p_{n,m} q_{n,m} - q_{m,n} p_{m,n} = \frac{h}{2\pi i}$$

Dies sind aber gerade die Diagonalterme der berühmten Vertauschungsrelation:

$$\boxed{\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = \frac{h}{2\pi i}\mathbf{1}.}$$

Dies ist die einzige Grundgleichung der Matrizenmechanik, in die das Plancksche Wirkungsquantum eingeht!

Und die Heisenberggleichung: $\frac{d\boldsymbol{q}}{dt} = \frac{2\pi i}{h}[H, \boldsymbol{q}]$?

Die Energie muss auch durch eine Matrix $H_{i,j}$ beschrieben werden. Da $\dot{H} = 0$ müssen die Terme $i \neq j$ Null sein.

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & \cdots \\ 0 & E_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$[H, \mathbf{q}] = \underbrace{\begin{pmatrix} E_1 & 0 & \cdots \\ 0 & E_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{q}_{1,1} & \mathbf{q}_{1,2} & \cdots \\ \mathbf{q}_{2,1} & \mathbf{q}_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}}_{= \begin{pmatrix} E_1\mathbf{q}_{1,1} & E_1\mathbf{q}_{1,2} & \cdots \\ E_2\mathbf{q}_{2,1} & E_2\mathbf{q}_{2,2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}} - \underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{q}_{1,1} & \mathbf{q}_{1,2} & \cdots \\ \mathbf{q}_{2,1} & \mathbf{q}_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} E_1 & 0 & \cdots \\ 0 & E_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}}_{= \begin{pmatrix} E_1\mathbf{q}_{1,1} & E_2\mathbf{q}_{1,2} & \cdots \\ E_1\mathbf{q}_{2,1} & E_2\mathbf{q}_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & (E_1 - E_2)\mathbf{q}_{1,2} & \cdots \\ (E_2 - E_1)\mathbf{q}_{2,1} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$[H, \mathbf{q}] = \frac{h}{2\pi i} \begin{pmatrix} 0 & i\omega_{1,2}\mathbf{q}_{1,2} & \cdots \\ i\omega_{2,1}\mathbf{q}_{2,1} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\frac{d\mathbf{q}}{dt} = \frac{2\pi i}{h}[H, \mathbf{q}]$$

…der Rest ist Geschichte…

(langweilige) Zusammenfassung

Heisenbergs Matrizenmechanik wird i.d.R. verkannt.

Sie mag für praktische Anwendungen wenig geeignet sein (+ Schwierigkeit der Verallgemeinerung auf nicht-periodische Probleme).

Aber sie ist organisch aus dem Bohrschen Atommodell und dem Korrespondenzprinzip gewachsen! Mit ihrer Hilfe erkennt man also, dass die „moderne Quantentheorie“ gar kein harter Bruch mit der „alten Quantentheorie“ war.

Arnold Sommerfeld schreibt 1929 im Rückblick auf 1925/26:

> „Die neue Entwicklung bedeutet nicht einen Umsturz, sondern eine erfreuliche Weiterbildung des Bestehenden mit vielen grundsätzlichen Klärungen und Verschärfungen.“

Sommerfeld, A. (1929) „Wellenmechanischer Ergänzungsband“ zu „Atombau und Spektrallinien“)

Vielen Dank für ihre Aufmerksamkeit!