

## Bestimmt Schrödingers Wellenmechanik die Bewegung eines Systems vollständig oder nur im Sinne der Statistik?

Passage aus einem Notizbuch von A. Einstein

Bekanntlich herrscht gegenwärtig die Meinung, dass im Sinne der Quantenmechanik eine vollständige zeit-räumliche Beschreibung der Bewegung eines mechanischen Systems nicht existiere. Es soll beispielsweise keinen Sinn haben, nach der momentanen Konfiguration und nach den momentanen Geschwindigkeiten der Elektronen eines Atoms zu sprechen [sic]. Dem gegenüber soll im Folgenden gezeigt werden, dass Schrödingers Wellenmechanik es nahe legt, jeder Lösung der Wellengleichung Bewegungen des Systems eindeutig zuzuordnen. Ob diese Zuordnung den Thatsachen gerecht wird, kann dann durch Ausrechnung von Spezialfällen ermittelt werden.

Es sei  $\psi$  eine Lösung der zu einer gegebenen potenziellen Energiefunktion  $\Phi$  gehörigen Schrödinger'schen Gleichung

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2}{h^2}(\mathcal{E} - \Phi)\psi = 0. \quad (1)$$

Ist  $\psi$  gegeben, so ist durch (1) in jedem Konfigurationspunkte  $\mathcal{E} - \Phi$ , d.h. die kinetische Energie  $\mathcal{L}$  bestimmt. Handelt es sich um ein System von nur einem Freiheitsgrade, so bestimmt  $\mathcal{L}$  die Geschwindigkeit zweideutig. Dadurch ist die Bewegung vollständig bestimmt, wenn man die Bedingung hinzunimmt, dass die Geschwindigkeit sich nur stetig ändern soll. Bei Systemen von mehreren Freiheitsgraden versagt diese Methode, weil man die Richtung der Bewegung nicht kennt. Es führt aber folgende Überlegung zum Ziel.

Gesetzt, es wäre möglich der Funktion  $\psi$  in jedem Punkte des  $n$ -dimensionalen Konfigurationsraumes  $n$  verschiedene Richtungen eindeutig zuzuordnen, und die kinetische Energie in  $n$  Summanden zu zerlegen, deren jeder einer dieser Richtungen eindeutig zugeordnet ist, Dann könnte man jeder dieser Richtungen auch eine jenem Summanden entsprechende Geschwindigkeit in dieser Richtung zuordnen. Die Resultierende aller dieser Geschwindigkeiten wäre dann der Geschwindigkeitsvektor des Systems im Konfigurationsraume. Diesen Gedanken will ich nun durchführen.

Das Zeichen  $\Delta\psi$  in (1) bezieht sich nach Schrödinger auf eine Metrik des Konfigurationsraumes, welche durch

$$2\mathcal{L} = g_{\mu\nu}\dot{q}_\mu\dot{q}_\nu = \frac{ds^2}{dt^2} \quad (2)$$

charakterisiert ist. Es ist dann

$$\Delta\psi = g^{\alpha\beta}\psi_{\alpha\beta}, \quad (3)$$

wobei  $\psi_{\alpha\beta}$  den zweiten kovarianten räumlichen Differentialquotienten von  $\psi$  im Konfigurationsraum bezeichnet

$$\psi_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2\psi}{\partial q_\alpha\partial q_\beta} - \left\{ \begin{matrix} \alpha\beta \\ \sigma \end{matrix} \right\} \frac{\partial\psi}{\partial q_\sigma}. \quad (4)$$

Wir wollen  $\psi_{\alpha\beta}$  den ‘‘Tensor der  $\psi$ -Krümmung’’,  $\Delta\psi$  als den Skalar dieses Tensors als den ‘‘Skalar der  $\psi$ -Krümmung’’ bezeichnen.

Unsere erste Aufgabe ist zunächst die, dem Tensor der  $\psi$ -Krümmung  $n$  Richtungen eindeutig zuzuordnen. Ist  $A^\alpha$  ein Einheitsvektor, welcher demnach die Gleichung

$$g_{\mu\nu}A^\mu A^\nu = 1 \quad (5)$$

erfüllt, so bestimmt dieser Richtungsvektor mit  $\psi_{\alpha\beta}$  den Skalar

$$\psi_{\mu\nu}A^\mu A^\nu = \psi_A.$$

Wir fragen nach den Richtungen  $A^\mu_{(\alpha)}$ , für welche  $\psi_A$  zu einem Extremum wird. Lagrange’s Methode liefert hierfür die Bedingungen

$$(\psi_{\mu\nu} - \lambda g_{\mu\nu})A^\nu = 0. \quad (6)$$

Diese involvieren die Determinantengleichung

$$|\psi_{\mu\nu} - \lambda g_{\mu\nu}| = 0, \quad (7)$$

welche  $n$  Wurzeln ( $\lambda_\alpha$ ) hat. Sind diese alle reell und von einander verschieden, so bestimmen die Gleichungen (6)  $n$  Richtungen, bzw.  $n$  Einheitsvektoren  $A^\mu_{(\alpha)}$  bis auf das Vorzeichen (Hauptrichtungen). Diese Richtungen stehen auf einander senkrecht, wie man erkennt, wenn man von den Gleichungen

$$(\psi_{\mu\nu} - \lambda_{(\alpha)}g_{\mu\nu})A^\nu_{(\alpha)} = 0$$

$$(\psi_{\mu\nu} - \lambda_{(\beta)}g_{\mu\nu})A^\nu_{(\beta)} = 0$$

die erste mit  $A^\mu_{(\beta)}$ , die zweite mit  $A^\mu_{(\alpha)}$  multipliziert und hierauf beide voneinander subtrahiert. Diese  $n$  Richtungen bestimmen ein orthogonales Koordinatensystem der  $\xi^\alpha$ , in welchem die Metrik (im Ursprung) euklidisch ist

( $\overline{g_{\mu\nu}} = \delta_{\mu\nu}$ ). Allgemein wollen wir Grössen, die sich auf das lokale Koordinatensystem beziehen, durch einen darüber gesetzten Strich bezeichnen.

In diesem lokalen Koordinatensystem lässt sich der Tensor  $\psi_{\alpha\beta}$  der  $\psi$ -Krümmung in Summanden zerlegen, deren jeder einer der Haupt-Richtungen zugeordnet ist, denn nach (3) ist

$$\Delta\psi = \sum_{\alpha} \overline{\psi_{\alpha\alpha}}. \quad (8)$$

Jedem  $\overline{\psi_{\alpha\alpha}}$  entspricht nach (1) ein Summand der kinetischen Energie des Systems, welchen wir der betreffenden Hauptrichtung zuordnen. Im Lokalsystem ist nach (2)

$$2\mathcal{L} = \sum_{\alpha} \overline{\dot{q}_{\alpha}^2}. \quad (9)$$

Nach (1) und (8) ist ferner

$$2\mathcal{L} = \sum_{\alpha} \left( -\frac{h^2}{4\pi^2} \frac{\overline{\psi_{\alpha\alpha}}}{\psi} \right). \quad (10)$$

Nun führen wir die Hypothese ein, dass die Geschwindigkeitskomponenten nach den Hauptrichtungen, den auf sie entfallenden Anteilen der kinetischen Energie entsprechen. Wir setzen also demgemäss

$$\overline{\dot{q}_{\alpha}^2} = -\frac{h^2}{4\pi^2} \frac{\overline{\psi_{\alpha\alpha}}}{\psi}. \quad (11)$$

Damit sind die Geschwindigkeits-Komponenten des Systems (abgesehen vom Vorzeichen) aus der Wellenfunktion  $\psi$  bestimmt, und es bleibt nur die Aufgabe, dies Resultat auf das ursprüngliche Koordinatensystem zu übertragen.

Durch Anwendung von (6) auf das lokale System und auf die dem Index  $\alpha$  zugeordnete Fundamentalrichtung erhält man

$$(\overline{\psi_{\mu\nu}} - \lambda_{(\alpha)}\delta_{\mu\nu})\overline{A_{(\alpha)}^{\nu}} = 0.$$

Da aber  $\overline{A_{(\alpha)}^{\nu}}$  gleich 1 ist für  $\nu = \alpha$ , sonst aber verschwindet, folgt hieraus

$$\overline{\psi_{\alpha\beta}} = \lambda_{(\alpha)}\delta_{\alpha\beta}$$

oder

$$\left. \begin{aligned} \overline{\psi_{\alpha\alpha}} &= \lambda_{(\alpha)} \\ \overline{\psi_{\alpha\beta}} &= 0 \quad (\text{wenn } \alpha \neq \beta) \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Andererseits sind  $A_{(\alpha)}^\mu$  die Komponenten des Einheitsvektors in der Hauptrichtung  $\alpha$ . Also ist  $\overline{q_\alpha} A_{(\alpha)}^\mu$  der Anteil aus der  $\mu$ -Komponenten der Geschwindigkeit, welcher aus der Geschwindigkeit des Systems in der Hauptrichtung  $\alpha$  hervorgeht. Durch Summieren über alle Hauptrichtungen erhalten wir

$$\dot{q}_\mu = \sum_\alpha \overline{q_\alpha} A_{(\alpha)}^\mu. \quad (13)$$

Aus (13) erhält man mit Rücksicht auf (11) und (12)

$$\dot{q}_\mu = \frac{h}{2\pi} \sum_\alpha \pm \sqrt{-\frac{\lambda_{(\alpha)}}{\psi}} A_{(\alpha)}^\mu. \quad (14)$$

Diese Gleichung löst – falls die  $\frac{\lambda_{(\alpha)}}{\psi}$  negativ sind – in Verbindung mit (7), (6) und (5) die gestellte Aufgabe. Zu jeder Stelle des Konfigurationsraumes gehören  $2n$  mögliche Geschwindigkeiten. Diese Vieldeutigkeit ist im Hinblick auf die quasiperiodischen Bewegungen a priori zu erwarten.

Die vorstehende Betrachtung zeigt, dass die Zuordnung völlig bestimmter Bewegungen zu Lösungen der Schrödinger'schen Differentialgleichung wenigstens vom formalen Standpunkte aus ebensogut möglich ist wie die Zuordnung bestimmter Bewegungen zu Lösungen der Hamilton–Jacobi'schen Differentialgleichung in der klassischen Mechanik.

*Nachtrag zur Korrektur.* Herr Bothe hat unterdessen das Beispiel des anisotropen zweidimensionalen Resonators nach dem hier angegebenen Schema durchgerechnet und dabei Ergebnisse gefunden, welche vom physikalischen Standpunkte aus sicher zu verwerfen sind. Hierdurch angeregt habe ich gefunden, dass dies Schema einer allgemeinen Bedingung nicht gerecht wird, welche an ein allgemeines Bewegungsgesetz der Systeme gestellt werden muss.

Es wurde nämlich ein System  $\Sigma$  betrachtet, welches aus zwei energetisch voneinander unabhängigen Teilsystemen  $\Sigma_1$  und  $\Sigma_2$  besteht; dies bedeutet, dass sowohl die potentielle Energie als auch die kinetische Energie sich additiv aus zwei Teilen zusammensetzt, von denen der erste nur auf  $\Sigma_1$  bezügliche, der zweite nur auf  $\Sigma_2$  bezügliche Grössen enthält. Es ist dann bekanntlich

$$\psi = \psi_1 \cdot \psi_2,$$

wobei  $\psi_1$  nur von den Koordinaten aus  $\Sigma_1$ ,  $\psi_2$  nur von den Koordinaten aus  $\Sigma_2$  abhängt. In diesem Falle muss gefordert werden, dass die Bewegungen des

Gesamtsystems Kombinationen von möglichen Bewegungen der Teilsysteme seien.

Dieser Bedingung entspricht das angegebene Schema nicht. Sei nämlich  $\mu$  ein Index, der zu einer Koordinate von  $\Sigma_1$ ,  $\nu$  ein Index, der zu einer Koordinate von  $\Sigma_2$  gehört. Dann verschwindet  $\psi_{\mu\nu}$  nicht. Damit hängt dann zusammen (vgl. 7), dass die  $\lambda_{(\alpha)}$  von  $\Sigma$  nicht übereinstimmen mit den  $\lambda_{(\alpha)}$  von  $\Sigma_1$  und  $\Sigma_2$ , falls jedes dieser Systeme als isoliertes System der Betrachtung unterzogen wird.

Herr Grommer hat darauf aufmerksam gemacht, dass diesem Einwand Rechnung getragen werden könnte durch eine Abänderung des dargestellten Schemas, in welcher nicht der Skalar  $\psi$  selbst sondern der Skalar  $\chi = \log \psi$  zur Definition der Hauptrichtungen herangezogen wird. Die Durchführung hat keine Schwierigkeit, soll aber erst dann gegeben werden, wenn sie sich an Beispielen bewährt hat.