Visionen des UnSEHbaren – Impressionen aus der Welt der Quanten

Bernd Thaller

Institut für Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen,
Karl-Franzens-Universität Graz,
A-8010 Graz, Österreich

Einleitung

Ermöglicht durch die technologische Entwicklung werden heute in immer stärkerem Maße computererzeugte Visualisierungen eingesetzt, um komplizierte Sachverhalte verständlicher zu machen. Visualisierungen sollen uns zeigen, wie etwas aussieht. Wenn wir wissen, wie etwas aussieht, wird es für uns begreifbar, wird es Teil unserer Welt, Teil unserer Anschauung. Visualisierungen können uns auf Strukturen in komplizierten Datenfeldern aufmerksam machen, egal, ob diese Daten experimentell-messtechnisch gewonnen, oder theoretisch-mathematisch berechnet wurden. Die optische Wahrnehmung läßt uns typische Eigenschaften der Daten rascher und zuverlässiger erkennen als eine mathematische Analyse, insbesondere dann, wenn man noch nicht weiss, wonach man Ausschau zu halten hat. Manchmal stellen sich diese beobachteten Datenstrukturen bei genauerer Untersuchung als Aspekt eines realen Phänomens heraus. Auf diese Weise können Visualisierungen zur Entdeckung einer Gesetzmäßigkeit, also zum Erkenntnisgewinn, beitragen.

Im Bereich der Quantenmechanik sind computererzeugte Visualisierungen besonders lohnend, da man es hier mit Phänomenen zu tun hat, die auf andere Weise als mit den Mitteln der Computergrafik gar nicht abgebildet werden können. Frühere Versuche in dieser Richtung finden sich in der Arbeit von Genz, Kaiser und Staudenmaier [GS] und im „Picture Book of Quantum Mechanics“ [BD]. Es sei hier angemerkt, dass neuere Verfahren der Experimentalphysik der Abbildung von Quantensystemen allerdings recht nahe kommen. Insbesondere sei hier auf die Rastertunnelmikroskopie [He] und auf die Verfahren zur Abbildung von Bose-Einstein Kondensaten [CW] hingewiesen. Allerdings beruhen diese Abbildungen auf Vielteilchenprozessen, man sieht also bereits statistisch gemittelte Erscheinungen. Hier interessieren wir uns jedoch insbesondere für die Visualisierung elementarer Quantensysteme.

Die Resultate der Visualisierungsbemühungen haben oft einen eigenen ästhetischen Reiz. Durch die willkürliche Auswahl der Darstellungsform und des Visualisierungsverfahrens verfügt der Wissenschaftler auch über eine beträchtliche künstlerische Freiheit. Tatsächlich trifft der Wissenschaftler seine Entscheidungen aber nicht nur nach ästhetischen, sondern vor allem nach wissenschaftlichen Gesichtspunkten. Er ist ja daran interessiert, mit seinen Darstellungen ein möglichst instruktives Abbild tatsächlicher Sachverhalte zu erzeugen. So ist denn auch dieser wissenschaftliche Hintergrund der Abbildungen das Hauptthema dieses Artikels. Das versetzt uns in die wenig beneidenswerte Situation eines jeden, der über Quantenmechanik spricht oder schreibt, und nicht nur einen engbegrenzten Kreis von Fachleuten erreichen will. Zu Recht steht die Quantenmechanik im Ruf, unanschaulich und schwer verständlich zu sein. Sie hat zwar nie solchen Staub aufgewirbelt wie die

Relativitätstheorie, nie so zahlreiche Gegner und Besserwisser auf den Plan gerufen, aber sie erschüttert unsere Vorstellung von Realität, von Ursache und Wirkung, von dem, was „ist“, auf viel radikalere Weise. Dieser neue Blick auf die Realität darf bei einer Diskussion über Visualisierungen quantenmechanischer Objekte aber nicht außer Acht gelassen werden, gilt es doch zu klären, in welchem Verhältnis die visuellen Darstellungen zur Wirklichkeit stehen, inwieweit also unsere Bildersprache korrekt ist. Kurz gesagt, wir müssen der Frage nachgehen, was hier eigentlich visualisiert wird. Dabei können wir die quantenmechanische Theorie nur sehr oberflächlich streifen. Für weiter gehende Informationen sei daher auf die zitierte Literatur verwiesen.

Atommodelle als Visualisierungen quantenmechanischer Systeme

Wissenschaftler, die in ein neues Forschungsgebiet eindringen, machen sich zwangsläufig gewisse Vorstellungen. Sie arbeiten mit Bildern im Geist, auch wenn sie sich bemühen, vorurteilsfrei ans Werk zu gehen. Diese Bilder entstammen zunächst der Vorstellungswelt gut abgesicherter, vertrauter und bewährter Theorien, gilt es doch zu erproben, wie weit sich die Gültigkeit bekannter Ergebnisse in unbekannte Wissensregionen erstreckt. Ebenso gingen die Wissenschaftler Anfang des 20. Jahrhunderts vor, die sich daran machten, unsere Vorstellungen von der atomaren Welt zu formen. Als erste Visualisierungen quantenmechanischer Systeme könnte man daher die Atommodelle von Thomson, Rutherford und Bohr betrachten, die noch weitgehend in der klassischen Physik verwurzelt waren. Das Thomson-Modell entwirft das Bild von punktförmigen, negativ geladenen Elektronen, die in einem kontinuierlich verteilten „Pudding“ aus positiver Landung eingebettet sind. Dieses Bild wurde von Rutherford widerlegt, der zeigte, dass die gesamte positive Ladung in einem vergleichsweise winzigen Atomkern konzentriert ist. Das Rutherford-Bohrsche (so wie Newtonsche Gleichungen) Modell läßt das Atom wie ein Miniatursonnensystem erscheinen. Der Atomkern im Zentrum ist positiv geladen und vereinigt in sich fast die gesamte Masse des Atoms. Er wird umkreist von den punktförmigen, leichten, negativ geladenen Elektronen, so wie die Planeten die Sonne umkreisen. Dieses Atommodell findet sich noch immer in der populärwissenschaftlichen Literatur und in grafischen Darstellungen wieder (siehe Abbildung 1), ist aber seit der Formulierung der Quantenmechanik, also seit ungefähr 80 Jahren, obsolet.

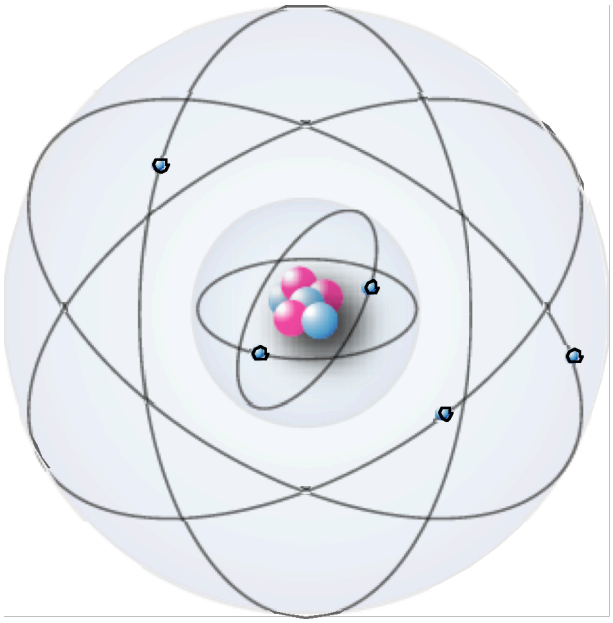

Abbildung 1: Rutherford-Bohrsches Atommodell

Die Antwort der modernen Physik auf die Frage nach dem Aussehen eines Atoms ist allerdings alles andere als leicht verständlich. Das Problem ist, dass der Begriff „Aussehen“ im eigentlichen Sinn des Wortes auf elementare Quantensysteme nicht zutrifft. Elementare Quantensysteme haben kein Aussehen, sie sind also nicht bloß unsichtbar, sie sind „unsehbar“. Eine konkrete Form und Gestalt, ein Aussehen also, erhalten Gegenstände erst, wenn Sie sich aus vielen Atomen zu makroskopischen Gebilden zusammenfügen. Dieses Zustandekommen von Form und Aussehen muss letztlich auch die Quantentheorie erklären, allerdings unter Verwendung der Quantentheorie von Vielteilchensystemen und des Lichts. Auf dem elementaren Niveau, das uns hier interessiert, sind diese Dinge noch nicht Teil der quantenmechanischen Wirklichkeit.

Wir wollen das heutige Bild von Atomen am kleinsten aller Atome, dem Wasserstoffatom, erläutern, da seine Struktur besonders einfach ist. Sein Atomkern besteht nur aus einem einzigen Proton. Das Proton ist ein aus drei Quarks zusammengesetztes, positiv geladenes Teilchen. Es ist kein punktförmiges, sondern räumlich ausgedehntes Objekt mit einem Durchmesser in der Größenordnung von 10^{-15} Metern und einer Masse, die beinahe das 2000fache der Masse eines Elektrons ist. Im Wasserstoffatom befindet sich noch genau ein Elektron. Es ist negativ geladen und wird durch die Anziehungskraft des Protons gebunden, hält sich also in der Nähe des Protons auf. Nach allem, was wir heute wissen, hat das Elektron keine innere Struktur, ist also punktförmig. Der typische Abstand des Elektrons vom Proton beträgt etwa 10^{-10} Meter. Da der Atomkern um den Faktor 100.000 kleiner ist als der typische Atomradius, können wir für die Zwecke der Atomphysik den Atomkern als punktförmig betrachten und seine innere Struktur ignorieren. Aufgrund seiner Schwere wird der Atomkern durch die Bewegung des Elektrons nur sehr geringfügig beeinflusst, genausowenig, wie die Sonne durch die Bewegung der Planeten beeinflusst wird. Es ist eine recht gute Annäherung an die tatsächlichen Verhältnisse, wenn wir den Atomkern einfach als feststehendes Kraftzentrum auffassen, das heißt, wir ignorieren nicht nur die innere Struktur des Atomkerns, sondern auch seine Dynamik. Für die Fragestellungen der Atomphysik sind solche vereinfachten Modelle auch heute noch legitim und praktisch. Auf allen Ebenen der Naturbeschreibung gibt es solche approximierenden Annahmen. Sie tragen zur Vereinfachung bei und machen die mathematischen Modelle praktisch.

Soweit es die Beschreibung im vorherigen Absatz betrifft, stimmt das Atommodell von Rutherford und Bohr mit unseren heutigen Vorstellungen durchaus überein. Allerdings wurde hier bewusst die Formulierung, dass das Elektron den Atomkern umkreise, ersetzt durch die Behauptung, dass das Elektron sich in der Nähe des Atomkerns aufhalte. Diese sprachliche Vorsicht bei der Beschreibung des Bewegungszustandes kennzeichnet den Unterschied zwischen klassischen und quantenmechanischen Vorstellungen. Unser heutiges Bild vom Atom unterscheidet sich in der Beschreibung des elektronischen Zustandes vom Rutherford-Bohrschen Modell, das noch in der klassischen Physik verwurzelt ist.

Der physikalische Zustandsbegriff

Die später gezeigten Visualisierungen des Wasserstoffatoms sind Darstellungen möglicher Zustände des Elektrons. Wir müssen also klären, was wir unter dem Begriff „Zustand“ verstehen. Man kann sich dem physikalischen Zustandsbegriff von der informationstheoretischen Seite her nähern. Der Zustand ist dann einfach eine Sammlung von Information über das betreffende physikalische System. Diese Information wird unter anderem die Werte ausgewählter physikalischer Größen, wie zum Beispiel Energie oder Drehimpuls, beinhalten. Der Zustandsbegriff bezieht sich notwendigerweise auf einen

theoretischen Rahmen, eine physikalische Theorie. Erweiterungen der Theorie führen zu Erweiterungen des Zustandsbegriffs, wenn etwa neue physikalische Größen bekannt werden, wie zum Beispiel der Isospin in der Quantentheorie der Elementarteilchen.

Im allgemeinen ist der Zustand eine Funktion der Zeit. Diese Zeitabhängigkeit wird durch das dynamische Gesetz der betrachteten physikalischen Theorie beschrieben. Das dynamische Gesetz liefert aus der Angabe der Zustandsinformation zu einer Zeit die Zustandsinformation zu einer späteren Zeit. Die Zustandsinformation ist also vollständig in dem Sinne, dass sie ausreicht, die Zeitentwicklung des Systems festzulegen. (Größen, wie zum Beispiel Masse oder Ladung, die im Rahmen einer Theorie als unveränderlich angesehen werden, werden oft als Systemparameter und nicht als Zustandsinformationen betrachtet). Im Rahmen der klassischen Mechanik des Elektrons beinhaltet der Zustand sowohl die präzise Information über den momentanen Ort als auch die momentane Geschwindigkeit des Elektrons. Diese Information reicht aus, um Ort und Geschwindigkeit zu allen späteren Zeiten aus den Newtonschen Gleichungen, dem dynamischen Gesetz der klassischen Mechanik, zu bestimmen. Im Rahmen einer physikalischen Theorie beinhaltet der Zustand (neben den Systemparametern) die vollständige Information über das System, alles was in irgendeinem Sinn physikalisch wirksam ist und die spätere Geschichte des System beeinflussen kann, also alles, was zur physikalischen Realität des Systems gehört.

Wellenfunktionen

Die moderne Quantenmechanik (in der sogenannten Ortsdarstellung) beschreibt die Zustände eines einzelnen Elektrons durch eine Wellenfunktion. Die Wellenfunktion ersetzt heute die Darstellung eines um den Atomkern kreisenden Elektrons. Wellenfunktionen sind Lösungen der Schrödingergleichung, einer linearen partiellen Differentialgleichung, deren Verständnis hier nicht gefordert ist. Wir wollen uns aber mit der Interpretation der Wellenfunktion etwas genauer auseinandersetzen.

Im Gegensatz zur klassischen Mechanik beschreibt die Wellenfunktion den Ort eines Teilchens nicht exakt, sondern durch eine sogenannte Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Diese beschreibt die statistische Verteilung der Messresultate bei wiederholten Ortsmessungen an identisch präparierten Teilchen. Abbildung 2 zeigt eine Momentaufnahme einer solchen Wellenfunktion. Diese Wellenfunktion gehört zu einem Elektron, das sich in einem konstanten Kraftfeld ungefähr entlang einer klassischen Wurfparabel bewegt. In diesem Bild stellt die Helligkeit die Aufenthaltswahrscheinlichkeit dar. Wir sehen, dass sich das Elektron nur ungefähr in der Nähe der klassischen Bahn befindet. Es ist aber auch nicht beliebig weit von der klassischen Position entfernt, denn die schwarzen Bereiche im Bild entsprechen den Regionen mit nahezu verschwindender Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

Die Farben codieren die Information über den Bewegungszustand des Teilchens, hier zeigt sich die Wellennatur der Teilchenbewegung. Eine Welle wird durch eine über einen gewissen Raumbereich hinweg bestehende, näherungsweise periodische Struktur charakterisiert. Bei Wasserwellen ist diese Wellenstruktur durch den Wechsel zwischen Wellenberg und Wellental, bei Schallwellen durch den Wechsel zwischen Bereichen hohen Luftdrucks und Bereichen niedrigen Luftdrucks definiert. Die Wellennatur in Abbildung 2 zeigt sich im periodischen Wechsel der Farben. Das deutet an, dass die quantenmechanische Welle, die die Fortbewegung eines Teilchens durch den Raum beschreibt, von anderer Natur ist, als zum Beispiel eine Druck- oder Dichtewelle. Die Größe, die hier eine periodische Struktur

beschreibt, und durch eine Farbe gekennzeichnet ist, ist die sogenannte Phase der komplexwertigen Funktion.

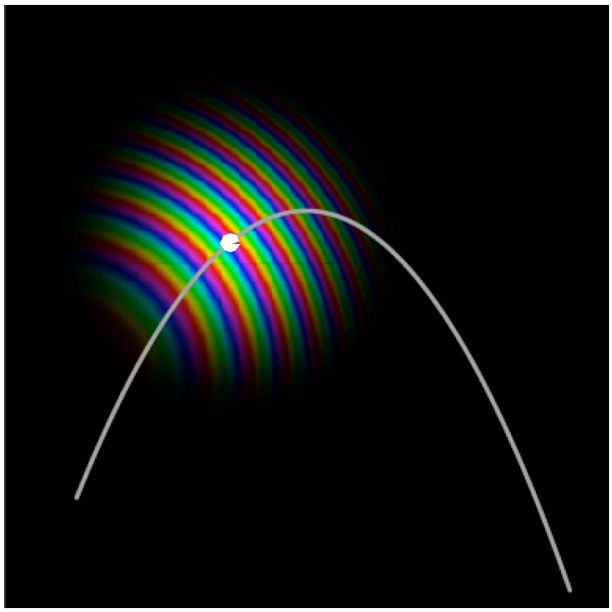

Abbildung 2: Wellenfunktion entlang einer klassischen Wurfparabel

Visualisierung komplexwertiger Wellenfunktionen

Eine komplexe Zahl besteht aus Realteil und Imaginärteil, $z = Re(z) + i\ Im(z)$, die man in einem zweidimensionalen Koordinatensystem auftragen kann. Die Menge der komplexen Zahlen bilden also eine Ebene, die komplexe Zahlenebene. Eine komplexwertige Funktion (wie die quantenmechanische Wellenfunktion) ist eine mathematische Vorschrift, die jedem Punkt des Raumes zu jeder Zeit eine komplexe Zahl zuordnet. Es handelt sich also mathematisch betrachtet um eine komplexe Zahl, die sich von Ort zu Ort ändert und noch von der Zeit abhängt. Um so eine Funktion zu visualisieren, ordnen wir jeder komplexen Zahl eine Farbe zu. Die entsprechende Einfärbung der komplexen Zahlenebene ist in Abbildung 3 gezeigt. Dabei wird dem Betrag der komplexen Zahl (dem Abstand vom Koordinatenursprung) eine gewisse Helligkeit zugeordnet. Dem komplexen Phasenwinkel wird, wie in der Abbildung 3 angedeutet, ein Farbton zugewiesen, indem der übliche Farbkreis direkt auf die Winkel von 0 bis 360 Grad abgebildet wird.

Abbildung 4 zeigt links einen Ausschnitt aus der komplexe Zahlenebene und rechts einen Teil des normalen Anschauungsraumes (zweidimensional dargestellt). Eine Wellenfunktion ist eine Zuordnungsvorschrift, die Raumpunkte auf komplexe Zahlen abbildet. Um eine Wellenfunktion visuell darzustellen, können wir nun jeden Punkt des Raumes entsprechend einfärben. Eine Serie von Bildern (Film) stellt dann einen Zeitablauf dar, siehe Abbildung 5. Zahlreiche Beispiele von solchen Filmen befinden sich in den Büchern [T1] und [T2] und auf der Homepage des Projektes „Visual Quantum Mechanics“ [U1].

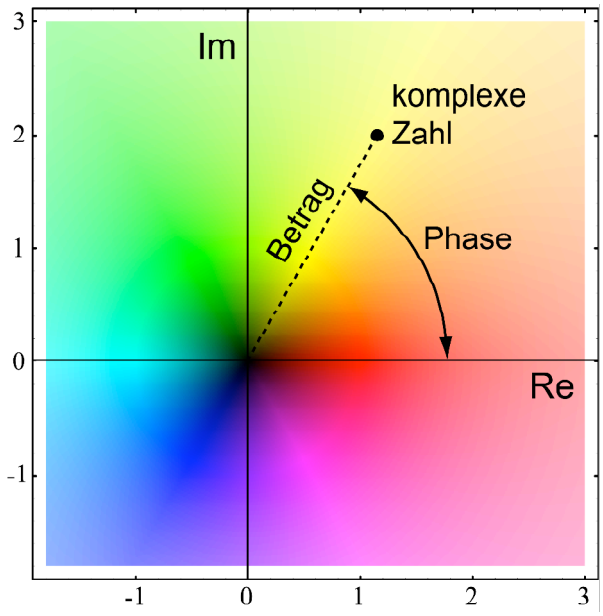

Abbildung 3: Ausschnitt der komplexen Zahlenebene. Der Betrag einer komplexen Zahl wird durch die Helligkeit, die Phase durch einen Farbton symbolisiert.

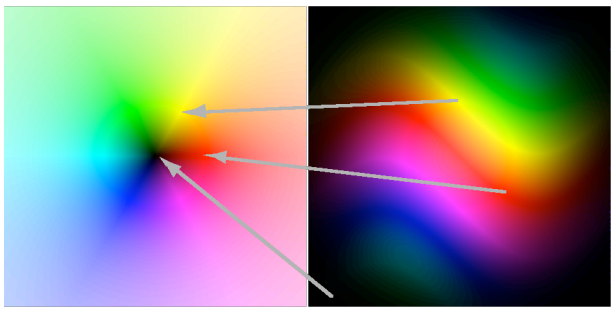
Abbildung 4: Visualisierung einer komplexwertigen Funktion

Es sei hier noch angemerkt, dass man mit Farben eigentlich eine dreidimensionale Information darstellen kann (mit den Dimensionen „rot“, „grün“, und „blau“, den additiven Grundfarben). Hier wird nur eine zweidimensionale Information benötigt. Wir verwenden daher nur die Farben auf der Oberfläche der Farbmannigfaltigkeit, wo die Farben die größte Sättigung haben und daher am besten unterscheidbar sind. Aufgrund der Unzulänglichkeiten unserer visuellen Wahrnehmung und aufgrund der Ungenauigkeiten der Farbdarstellung in den Wiedergabemedien eignet sich die Visualisierung mittels Farben jedoch nur für die qualitative Darstellung. Eine quantitativ genaue Ablesung der komplexen Zahlenwerte ist ohne Hilfsmittel nicht möglich.

Qualitativ lassen sich die Bilder von Wellenfunktionen aber leicht interpretieren. In Abbildung 2 ist zum Beispiel die lokale Wellenlänge am Abstand benachbarter roter Streifen ablesbar. Diese Wellenlänge ist mit der Geschwindigkeit des Elektrons verknüpft. Kurze Wellenlänge bedeutet hohe Geschwindigkeit, lange Wellenlänge eine langsame Geschwindigkeit. Die Bewegungsrichtung der Welle ist senkrecht auf die Wellenflächen (im zweidimensionalen Abbild sind die Wellenflächen die Linien gleicher Farbe) und erfolgt immer in der Richtung von Rot zu Gelb zu Grün, etc. (diese Reihenfolge der Farben in Bewegungsrichtung entspricht dem entgegengesetzten Uhrzeigersinn in Abbildung 3). Wir erkennen also in Abbildung 2, dass sich die Wellenfunktion noch auf dem aufsteigenden Ast der Wurfparabel befindet, sich somit nach rechts oben weiterbewegen wird. Weiters sehen wir, dass sich die raschen kurzwelligen Anteile vorne anhäufen, während die langsamen, langwelligen Teile hinten zurückbleiben. Die Krümmung der Farbstreifen deutet an, dass sich

die Wellenfunktion in Zukunft noch weiter verbreitern wird – ein generelles Phänomen, das mit der Unschärfe der Geschwindigkeit zu tun hat. In einer Welle von endlicher Ausdehnung ist nämlich die Wellenlänge aus mathematischen Gründen nicht genau definiert, somit ist die Geschwindigkeit nicht genau definiert, eine anfänglich gut lokalisierte Ortsverteilung wird sich also im Laufe der Zeit immer mehr verbreitern. Dies ist lediglich eine andere Formulierung der berühmten Heisenbergschen Unschärferelation.

Das Doppelspaltexperiment

Ein Charakteristikum einer Welle ist deren räumliche Ausdehnung. Eine Welle stellt keinen perfekt lokalisierten Vorgang dar, die Position einer Welle ist nur ungefähr bestimmbar. Genauso verhält es sich mit der Position des durch eine Welle dargestellten Elektrons. Die Intensität der Welle (das Quadrat des Betrages) ist direkt mit der Aufenthaltswahrscheinlichkeit verknüpft. In den Visualisierungen ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit durch die Farbhelligkeit gegeben. Bei wiederholten Ortsmessungen an identischen Systemen findet man das Elektron also häufig in hellen Regionen und so gut wie nie im schwarzen Bereich. Man beachte, dass das Elektron selbst immer punktförmig auftritt und bei Ortsmessungen mit seiner gesamten Masse an bestimmten Raumpunkten gefunden wird. Die Ausdehnung der Welle beschreibt also nicht eine Materieverteilung des Elektrons, sondern nur die Verteilung seiner möglichen Orte.

Das Auftauchen statistisch verteilter Messresultate betrachtet man normalerweise als eine Auswirkung von unpräzisen Messungen oder ungenauer Kenntnis des gemessenen Systems. Wir haben Grund, anzunehmen, dass das Auftreten von Wahrscheinlichkeiten in der Quantenphysik fundamentalere Ursachen hat. Die Frage ist: können wir annehmen, dass das Elektron „in Wirklichkeit“ sehr wohl an einem wohlbestimmten Ort ist und die statistische Verteilung der Messresultate für den Ort lediglich in Messungenauigkeiten begründet liegt, oder in Störungen, die die Messung selbst verursacht? Dass also dem präzisen Ort eine unabhängige Existenz zukommt, die von Theorie und Experiment einfach noch nicht erfasst werden kann? Es ist dies die Frage nach den Ortskoordinaten als „verborgene Variablen“ und gleichzeitig die Frage nach der Vollständigkeit der quantenmechanischen Zustandsbeschreibung durch Wellenfunktionen.

Um diese Frage zu diskutieren, wird oft das Doppelspaltexperiment herangezogen. Eine Visualisierung dieses Experiments findet sich in Abbildung 5. Hier wird jeweils ein Elektron auf eine Wand geschossen, die zwei kleine, engbeieinanderliegende durchlässige Stellen (Löcher oder Spalte) hat, ansonsten aber undurchdringlich ist. In größerer Entfernung hinter der Wand wird ein eventuell hindurchgetretenes Elektronen durch geeignete Verfahren registriert. Bei oftmaliger Wiederholung des Experiments kann also bestimmt werden, mit welcher Wahrscheinlichkeit sich ein Elektron in welche Richtung bewegt. Die anfängliche Ortsunschärfe der Elektronen ist dabei so groß, dass nicht vorhergesagt werden kann, durch welchen der beiden Spalte das Elektron treten wird, wenn es hinter die Wand gelangen sollte. Auch kann diese Information nicht rückwirkend aus dem Ort des Elektrons bei der schlußendlichen Registrierung bestimmt werden. Die mit der Fortbewegung der Elektronen verknüpfte Welle tritt also durch beide Spalte hindurch. Wie bei Wellenphänomenen üblich, führt das zur Interferenz der beiden aus den Spalten austretenden Teilwellen. Die Interferenz äußert sich hinter dem Schirm in den näherungsweise radial von den Spalten weglaufenden Auslöschungszonen, dunkle Bereiche innerhalb der Welle, die in der Abbildung 5 (untere Reihe) gut auszumachen sind. In diesen Richtungen wird man also nie ein Elektron finden.

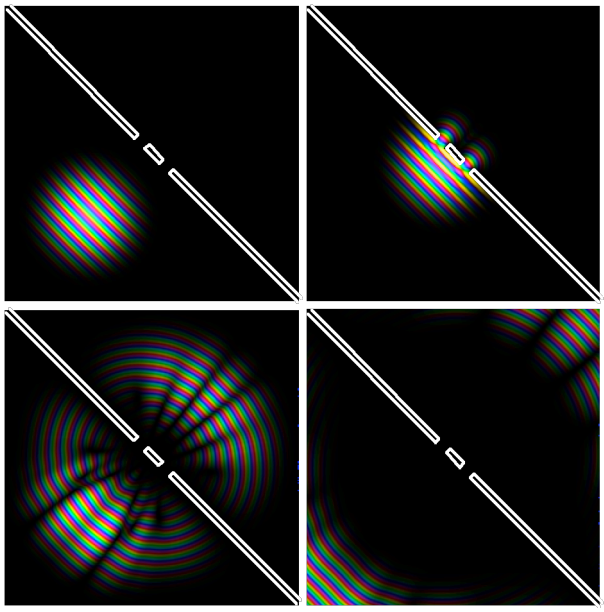

Abbildung 5. Wellenfunktion im Doppelspaltexperiment

Denken wir uns nun einen der beiden Spalte geschlossen, dann muss das Elektron natürlich durch den anderen gehen, wenn es hinter die Wand kommen will. Dort entsteht eine Welle mit kreisförmigen Wellenfronten, ohne Auslöschungen durch Interferenz. Wenn man also einen Spalt schließt, dann kann man plötzlich Elektronen in Gegenden finden, die zuvor durch Interferenz verboten waren. Diese Vorhersage ist scheinbar paradox, zumindest, wenn man versucht, den Vorgang in der Begriffswelt der normalen, klassischen Teilchenbewegung zu beschreiben: Verkleinern wir die Anzahl der Möglichkeiten, die das Elektron hat, um an einen bestimmten Punkt zu gelangen (durch Schließen eines Spaltes), so vergrößern wir die Aufenthaltswahrscheinlichkeit an diesem Punkt. Man findet dort das Teilchen häufiger, obwohl es weniger Möglichkeiten hat, dorthin zu gelangen.

Denken wir uns nun während des Experiments eine Ortsmessung durchgeführt, die entscheidet, ob und durch welchen Spalt das Elektron durch die Wand tritt. Diese Messung sollte in etwa zur Zeit des zweiten Bildes in Abbildung 5 erfolgen. Zum Beispiel könnten wir das Elektron dabei im oberen Spalt finden (die Wahrscheinlichkeit ist für beide Spalte gleich groß). Wir wissen dann, dass es durch den oberen Spalt hinter die Wand gelangen wird. Wenn wir den Ort aber auf diese Weise festlegen, ändern wir einen Teil der Information, die den momentanen Zustand des Elektrons darstellt. Die Wellenfunktion ändert sich also. Sie wird unmittelbar nach der Messung einer Welle entsprechen, die im oberen Spalt lokalisiert ist. Diese Welle breitet sich danach genauso aus, wie wenn der untere Spalt überhaupt geschlossen wäre. Durch Erzeugung dieser Information über den Ort zu einer gewissen Zeit verschwindet also der eigentliche Grund für die Interferenz zu einer späteren Zeit. Wenn zu einer gewissen Zeit die Information darüber existiert, durch welchen Spalt das Elektron tritt, finden wir zu einer späteren Zeit das Elektron möglicherweise in einem Gebiet, das ansonsten aufgrund der Interferenz strikt verboten gewesen wäre. Die Information darüber, durch welchen Spalt das Elektron tritt, wird physikalisch wirksam durch die Veränderung der Interferenzeffekte. Ob diese Information durch Messung generiert wird, oder auf sonstige Art in der Anordnung entsteht, ist dabei nicht so wichtig. Der physikalische Informationsbegriff darf nicht in einem subjektiven Sinn verstanden werden. Wenn quantenmechanisch mehrere Möglichkeiten existieren, darf man nicht annehmen, dass eine dieser Möglichkeiten tatsächlich existiert, denn sonst wäre die zukünftige Zeitevolution aufgrund der Änderung der Interferenzeffekte objektiv anders.

Wenn wir also den Zeitablauf in Abbildung 5 beobachten, muss uns klar sein, dass wir es hier mit einer mathematischen Beschreibung eines Vorgangs zu tun haben, den wir nicht beobachten können. Jede direkte Beobachtung zu einer Zwischenzeit würde den physikalisch wirksamen Informationsgehalt (und daher den Zustand) des Systems verändern, und damit das Ergebnis der Messung am Ende. In der Quantenmechanik wird diese Zeitevolution und Interferenz der Möglichkeiten mathematisch konsistent beschrieben. Die Quantenmechanik hat dabei seit etwa 80 Jahren alle experimentellen Tests bestanden. Zwar wissen wir heute, dass es auch logisch möglich ist, die Existenz verborgener Variablen anzunehmen, es hat sich aber gezeigt, dass man dann auch die Existenz merkwürdiger nichtlokaler und instantaner Fernwirkungen akzeptieren müsste. Daher akzeptieren die meisten Physiker heute die Einschränkungen, die die Quantenmechanik unserem Realitätsbegriff auferlegt. Ein Teilchen hat objektiv gesehen keinen präzisen Ort und keine genaue Geschwindigkeit. Die Unschärfen sind nicht subjektiv und beruhen nicht bloß auf unvermeidlichen Störungen aufgrund des Messprozesses. Vor einer Messung oder gar ohne Messung existiert einfach keine genauere Information über den exakten Ort und die exakte Geschwindigkeit. Die Beschreibung durch die Wellenfunktion ist eine vollständige Beschreibung des Zustandes.

Wir wollen hier die Diskussion nicht weiter treiben, als es zur Erzeugung einer gewissen Vorsicht bei der Interpretation der Abbildungen notwendig ist. Die Quantenmechanik des Messprozesses muss eigentlich zusammengesetzte Quantensysteme und Wechselwirkungen in Betracht ziehen, also wesentlich kompliziertere Phänomene, als die hier betrachteten. Ausserdem muss die Quantenmechanik klären, wieso wir trotz dieser totalen Unbestimmtheit auf mikroskopischer Ebene, unsere unmittelbare physikalische Umwelt als wohlbestimmt und deterministisch empfinden können. Hierzu gibt es wohl vielversprechende Ansätze, zum Beispiel die Dekohärenztheorie, aber wohl noch keine allgemein anerkannte und befriedigende Lösung.

Das neue Bild vom Atom

Das zeitliche Verhalten von Wellenfunktionen wird durch die Schrödingergleichung beschrieben. Wellenfunktionen können durch Kräfte abgelenkt werden. Ganz in der Nähe eines anziehenden Kraftzentrums, wie es ein Atomkern darstellt, können sich Wellenfunktionen zu sogenannten „stehenden Wellen“ arrangieren. Diese sind einfach Schwingungszustände mit räumlich feststehenden Schwingungsknoten, ähnlich wie wir es in einer Dimension von einer eingespannten, schwingenden Saite her kennen.

Die stehenden Wellen in der Nähe eines Atomkerns formen unser heutiges Bild vom Wasserstoffatom. Diese Zustände beschreiben eine zeitlich stationäre Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons. Die Visualisierung stellt uns hier vor ein neues technisches Problem, da wir nun eine dreidimensionale räumliche Struktur darstellen müssen.

In Abbildung 6 sehen wir so eine stehende Welle. Die Figur zeigt eine Isofläche der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Auf dieser Fläche hat der Betrag der Wellenfunktion einen konstanten Wert. Innerhalb des durch diese Fläche abgegrenzten Bereichs hält sich das Teilchen mit hoher Wahrscheinlichkeit auf, ausserhalb trifft man es nur selten an.
Die Maxima der Aufenthaltswahrscheinlichkeit sind ungefähr in der Mitte dieser Ringe, die Nullstellen, also die Zonen, wo sich das Elektron nie aufhält, befinden sich dazwischen. Die Zeitentwicklung einer solchen Wellenfunktion besteht nur in einer Phasenoszillation. Die Farben der Figur ändern sich periodisch, aber die räumliche Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit bleibt konstant. Wie oben ausgeführt, ist keiner der möglichen

Orte „realer“ als der andere. Alle von der Wellenfunktion zugelassenen Orte sind gleich wirklich oder unwirklich, manche Orte haben nur eine geringere Wahrscheinlichkeit.

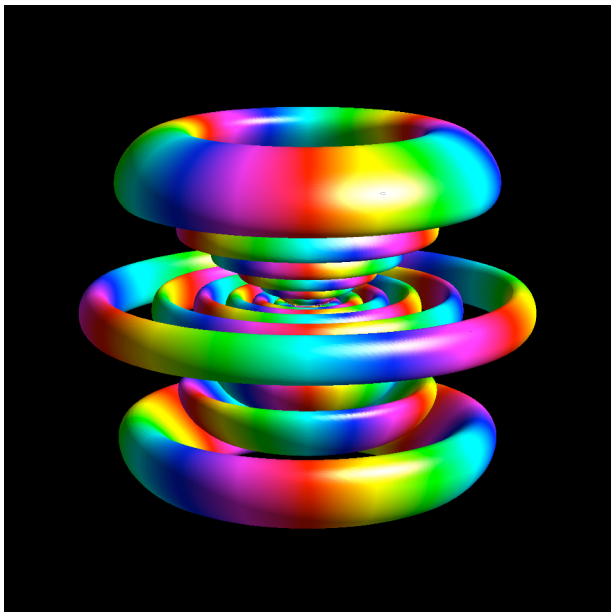

Abbildung 6. Stationärer Zustand eines Wasserstoffatoms

Durch die gegebene Wellenfunktion wird der Ort des Elektrons nur auf ungefähre Zonen eingeschränkt, andere physikalische Größen haben aber definitiv feststehende Werte. Für die hier dargestellte Wellenfunktion ist die Gesamtenergie bestimmt (Hauptquantenzahl), ebenso der Betrag des Gesamtdrehimpulses (Nebenquantenzahl), und der Drehimpuls um die vertikale Achse (magnetische Quantenzahl). Alle diese Größen können aus der Figur unmittelbar abgelesen werden. Energie und Gesamtdrehimpuls werden durch die Anzahl und Anordnung der sichtbaren Ringe bestimmt. Die Anzahl der Farben (wie oft „Rot“ auf jedem Ring vorkommt) bestimmt die magnetische Quantenzahl. In der Abbildung 6 ist die Hauptquantenzahl 11, die Nebenquantenzahl 5 und die magnetische Quantenzahl 3.

Wieder muss auf die Gefahren dieser Visualisierungen hingewiesen werden. Wasserstoffatome sind nicht wirklich bunt; die Farben symbolisieren lediglich eine mathematische Eigenschaft (die komplexe Phase) der Wellenfunktion. Die ganze Figur ist eigentlich nur eine Darstellung einer mathematischen Repräsentation der Wirklichkeit. Die Verbindung zwischen Realität und Abbild ist hier viel schwächer, als wir es von normaler Fotografie oder normaler Visualisierung gewöhnt sind. Man kann eben nicht sagen, dass Wasserstoffatome „so aussehen“.

Die Oberfläche zeigt zwar gut die räumliche Struktur der Ortsverteilung in diesem Zustand, vermittelt aber auch den falschen Eindruck einer Plastikfigur. Eine einzige Visualisierung eines dreidimensionalen Datenfeldes ist daher meist nicht genug. Um alle Gesichtspunkte darzustellen, muss man mehrere unterschiedliche Visualisierungsarten verwenden. In den folgenden Bildern sind zwei Darstellungsarten kombiniert, eine Schnittebene mit einer farbigen Dichtegrafik der Aufenthaltswahrscheinlichkeit und eine Isofläche wie im vorherigen Bild. Die Intensitätsverteilung in der Schnittebene zeigt, dass die Ortsverteilung unscharf ist und nach aussen hin abnimmt, aber im Inneren Nullstellengebilde hat.

Die folgenden Abbildungen 7 und 8 zeigen Zustände mit derselben Energie. Diese beiden Zustände unterscheiden die sich nur um die magnetische Quantenzahl. Die magnetische Quantenzahl ist hier als Anzahl der Farbwiederholungen entlang des Ringes sichtbar. Sie

beschreibt den Drehimpuls um die vertikale Achse. Im ersten Bild ist dieser Drehimpuls klein (magnetische Quantenzahl m=1), die Aufenthaltswahrscheinlichkeit konzentriert sich um die vertikale Achse, das Atom ist eher „stangenförmig“. Im zweiten Bild ist dieser Drehimpuls gross (magnetische Quantenzahl m=6), das Atom schaut dann auch wie eine Schwungscheibe aus. Eine Veränderung dieser magnetischen Quantenzahl ist nur in ganzzahligen Schritten möglich, da sich ein stationärer Zustand nur ergibt, wenn eine ganze Zahl von „roten Wellenbäuchen“ auf jedem Ring Platz hat (in einem gewissen Abstand vom Zentrum ist die Wellenlänge durch die Energie weitgehend festgelegt). Die Quantisierung physikalischer Größen wird hier als ein Phänomen erkannt, dass analog zur „Quantisierung“ der Schwingungszustände einer elastischen Saite ist.

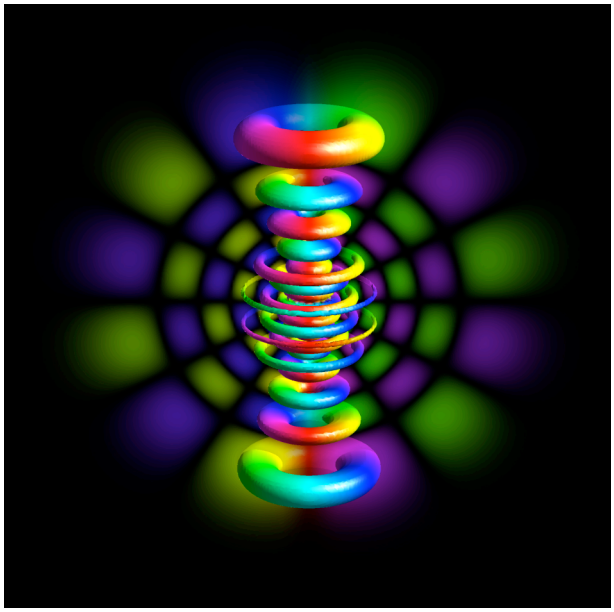
Abbildung 7: Zustand mit kleiner magnetischer Quantenzahl

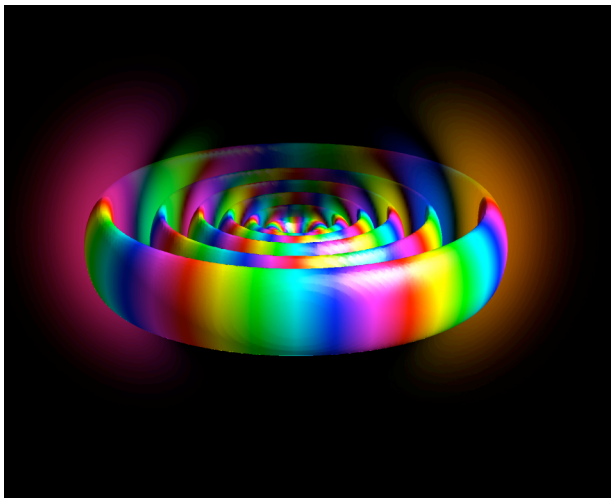
Abbildung 8: Zustand mit großer magnetischer Quantenzahl

Die Anzahl der unterschiedlichen Zustände, die das Elektron im Kraftfeld des Protons annehmen kann, ist unendlich groß. Die Systematik und Ordnung dieser Zustände spiegelt das Periodensystem der Elemente wieder, da diesselben Prinzipien für die Mechanik der Vielelektronenatome zur Anwendung kommen.

Einen zusätzlichen Nutzen bieten Animationen, durch die sich das Augenmerk natürlicherweise auf die Quantendynamik richtet. In der Physik des Wasserstoffatoms läßt

sich so zum Beispiel die Dynamik der Superpositionszustände sichtbar machen. In einem Superpositionszustand werden Wellenfunktionen mit unterschiedlichen Energien überlagert. Das resultiert in einem zeitabhängigen Zustand, in dem nun auch für den Wert der Energie mehrere Möglichkeiten bestehen (von denen eine bestimmte erst nach einer Messung realisiert wird). Abbildung 9 zeigt eine Momentanaufnahme eines solchen Superpositionszustandes. Einige animierte Darstellungen von Superpositionszuständen findet man im Internet auf der Homepage des Projekts „Visual Quantum Mechanics“ [U1].

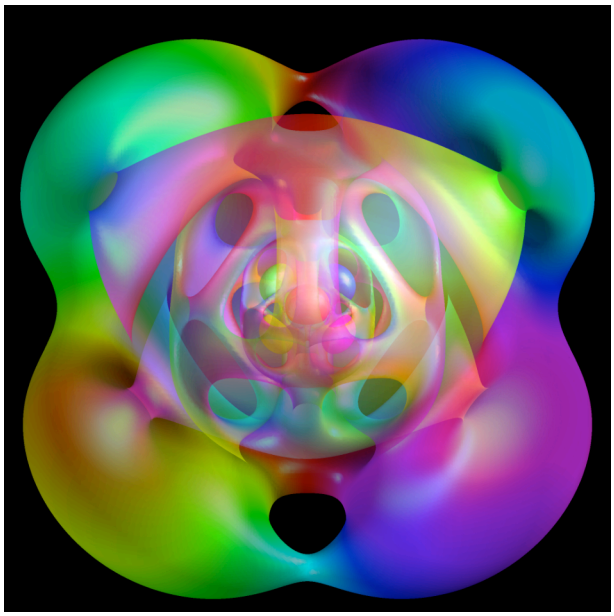

Abbildung 9: Superpositionszustand

Der Spin

Die bis jetzt päsentierte Theorie war in dem Sinne unvollständig, dass sie den Eigendrehimpuls der Elektronen, den Spin, vernachlässigte. Da sich der Spin vor allem in Gegenwart starker Magnetfelder äußert, ist diese Vereinfachung in vielen Fällen gerechtfertigt. Die Visualisierung von Wellenfunktionen mit Spin führt zu beträchtlichen Komplikationen. Eine spinorielle Wellenfunktion ordnet nämlich jedem Raum-Zeitpunkt nicht nur eine, sondern zwei komplexe Zahlen zu. Es ist schwierig, die gesamte mathematische Information, die in so einem Gebilde steckt, in einer einzigen Abbildung wiederzugeben. Ein möglicher Weg besteht darin, nur die für eine bestimmte Fragestellung relevante Information auf mathematische Weise aus der spinoriellen Wellenfunktion zu extrahieren und darzustellen.

Aus einer spinoriellen Wellenfunktion kann man zum Beispiel ein Spinvektorfeld extrahieren. Die lokale Spinrichtung ist eine Beobachtungsgröße, die gleichzeitig mit dem Ort messbar ist. Sie gibt, anschaulich gesprochen, für jeden Ort die Richtung der Drehachse für die Eigenrotation des Elektrons. Sollte das Elektron an einem bestimmten Ort gefunden werden, dann hat seine innere Drehachse die Richtung, die durch das Spinvektorfeld an diesem Ort definiert ist. Diese lokale Spinrichtung kann sich von Ort zu Ort ändern. Man kann sie mit den üblichen Methoden der Vektorfeldvisualisierung darstellen. Abbildung 10 zeigt eine Visualisierung, die eine Isofläche der Aufenthaltswahrscheinlichkeit mit einer Darstellung der Flußlinien des Spinvektorfeldes kombiniert.

Abbildung 10: Spinorielle Wellenfunktion des Wasserstoffs

Vom Nutzen der Visualisierungen

Strukturen, die an den numerischen Daten oder den mathematischen Formeln der Quantenmechanik nur schwer erkennbar sind, sind an den Visualisierungen leicht auszumachen. Neben dem allgemeinen Nutzen, den die Visualisierungen für die Auswertung von numerischen oder analytischen Ergebnissen haben, sei auf den speziellen Nutzen von Visualisierungen für den Unterricht hingewiesen.

Angehende Quantenmechaniker müssen natürlich lernen, mit Wellenfunktionen zu rechnen, sie müssen also die Schrödingergleichung in verschiedenen Situationen lösen können und verstehen lernen. Es ist für die Studierenden dabei aber äußerst schwierig, ein intuitives Gefühl für quantenmechanische Vorgänge zu entwickeln. In den klassischen Disziplinen der Physik ist das meist anders. Man kann auf ein gewisses anschauliches Vorwissen bauen. Wenn man einen Ball wirft, hat man es im Gefühl, wie weit er fliegen wird, wann er wieder auf dem Boden fällt und mit welcher Wucht er dort aufprallt. Wenn Sie also die Wurfbewegung in der klassischen Mechanik zu berechnen lernen, wissen Sie in etwa, was Sie von der Theorie zu erwarten haben. Ganz anders in der Quantenmechanik. Quantenmechanische Phänomene spielen in unserem Alltagsleben keine Rolle. Wir wissen daher überhaupt nicht, was wir zu erwarten haben. Die räumlichen und zeitlichen Maßstäbe, die energetischen Verhältnisse sind zu exotisch, die interpretatorischen Schwierigkeiten sind so groß, dass Studierende die Plausibilität seiner Rechenergebnisse nicht überprüfen können.

Durch Visualisierungen wird aber das Verhalten einer Wellenfunktion in unterschiedlichen Situationen intuitiv fassbar. Wenn man die Entwicklung der quantenmechanischen Theorie solcherart illustrieren und motivieren kann, wenn man zahlreiche quantenmechanische Vorgänge beobachten kann, entwickelt man ein Gefühl dafür, das man durch Studium der Formeln allein möglicherweise nie bekommt. Dazu kommt, dass man auch bei elementaren Quantensystemen, wie sie im Lehrbuch vorkommen, durch Visualisierungen interessanten Phänomenen auf die Spur kommen kann. Manchmal sind es ganz einfache Erscheinungen, an die man zuvor einfach nicht gedacht hatte. Wonach man in den Formeln zu suchen hat, weiß man erst, wenn man es gesehen hat. Dann erst hat man eine Chance, den richtigen Ansatz in der Rechnung zu machen. Dadurch kann man schließlich zu einer mathematisch-theoretischen

Analyse eines Phänomens kommen, das im unüberschaubaren Kosmos der mathematischen Formeln allzuleicht unentdeckt geblieben wäre.

Die visuelle Darstellung ermöglicht es aber auch, einen größeren Kreis von interessierten Laien mit der Quantenmechanik vertraut zu machen. Anhand von Filmen und Visualisierungen kann man über Quantenmechanik sprechen, ohne sich auf eine allzu mathematische Sprechweise zurückziehen zu müssen. Auf diese Weise mögen Bilder zur Popularisierung von Wissenschaft beitragen, eine Aufgabe, die heute in ihrer Bedeutung nicht unterschätzt werden darf. Die Ästhetik und der Aufmerksamkeitswert der vorgestellten Bilder vermag es gelegentlich, zu Grenzüberschreitungen anzuregen. Abbildung 11 zeigt ein Beispiel einer Arbeit der beiden Grazer Künstler Ingrid Moschik und Gerhard Kindlinger, die durch die Visualisierungen atomarer Wellenfunktionen zu einer Reihe von eigenen visuellen Experimenten angeregt wurden [U2].

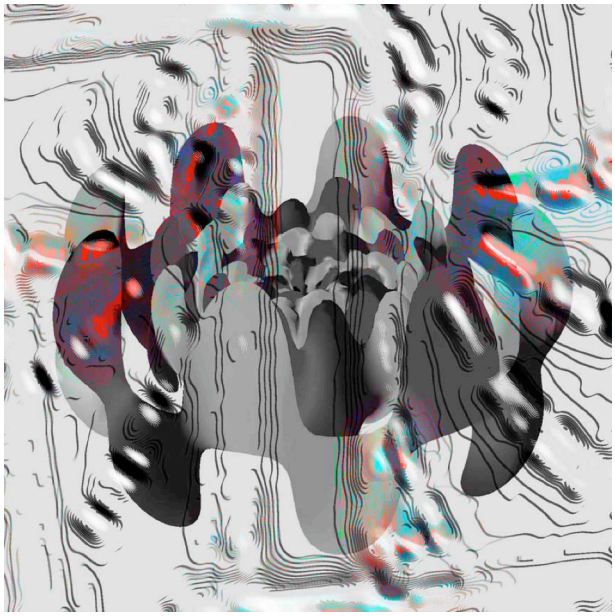

Abbildung 11: Beispiel aus der Reihe „GM Moschik.linger:datenstrukturen“

Literatur

[GZ] H. Genz, F. Kaiser und H.-M. Staudenmaier, Darstellung physikalischer Prozesse durch computererzeugte Filme, Physik in unserer Zeit 13(2), 34–47 (1982)

[BD] S. Brandt, H.D. Dahmen: The Picture Book of Quantum Mechanics, 3. Auflage, Springer, Berlin 2001, ISBN 0387951415

[He] W. M. Heckl, Sichtbar machen - Einblicke in die Nano-Welt, Beitrag in diesem Band

[CW] E.A. Cornell und C.E. Wieman, Die Bose-Einstein-Kondensation Spektrum der Wissenschaft 5/1998, p. 44

[T1] B. Thaller: Visual Quantum Mechanics, Springer, New York 2000, ISBN 0387989293

[T2] B. Thaller: Advanced Visual Quantum Mechanics, Springer, New York 2005, ISBN 0387207775

[U1] Homepage des Projekts „Visual Quantum Mechanics“: http://vqm.uni-graz.at/ (Januar 2005)

[U2] Siehe die Internet-Ausstellungen unter http://kultur.wkstmk.at/comart/Bernd-Thaller/V-Q-M.htm und http://kultur.wkstmk.at/comart/Bernd-Thaller/AVQM.htm (Januar 2005)