

Überlegungen zur Quantenmechanik für Elektrotechniker: von Kelvins Telegraphengleichung zur statischen Ladungsverteilung

Eine didaktische Reduktion auf bekannte mathematische Strukturen – als pragmatischer Ansatz ohne Mystik

Jürgen Michael Grimm

Westfälische Hochschule Zwickau, Fakultät Elektrotechnik, Zwickau

Abstract

Die Quantenmechanik wird oft als revolutionärer Bruch mit der klassischen Physik dargestellt – eine mysteriöse Theorie, die nur durch abstrakte Postulate und philosophische Interpretationen verständlich wird. Doch diese Darstellung übersieht, dass ihre mathematischen Grundlagen in der klassischen Elektrotechnik verankert sind. Ausgehend von der Telegraphengleichung, die Lord Kelvin bereits 1855 für transatlantische Kupferkabel formulierte, zeigen diese Überlegungen, wie die Quantenmechanik nicht als Bruch, sondern als logische Weiterentwicklung bekannter Konzepte verstanden werden kann.

Die Telegraphengleichung vereint in sich bereits alle Elemente der nichtrelativistischen Quantenmechanik: Im Grenzfall verlustfreier Leitungen wird sie zur Wellengleichung, bei starker Dämpfung zur Diffusionsgleichung und mit einer rein imaginären Dämpfungskonstante – einer Wick-Rotation – zur Schrödinger-Gleichung. Die zugrundeliegende mathematische Struktur dieser Gleichung, die universelle Theorie der Eigenfunktionen und Eigenwerte, wurde bereits von Sturm und Liouville im 19. Jahrhundert ausgearbeitet. Die dabei auftretenden speziellen Funktionen, wie Hermite-, Legendre- oder Laguerre-Polynome, waren lange vor der Quantenmechanik bekannt und wurden für klassische Anwendungen entwickelt.

Was die Schrödinger-Gleichung liefert, lässt sich statt als abstrakte Wahrscheinlichkeit pragmatisch als statische Ladungsverteilung interpretieren, hier also auf ihren didaktischen Kern reduziert, gleich ob für ein einzelnes Atom oder über das Bloch-Theorem, für ein periodisches Kristallgitter. Die vier scheinbar getrennten Begegnungen mit der Quantenmechanik im Elektrotechnik-Studium – Dotierung, Bipolartransistor, MOS-Transistor und Nanoelektronik – sind keine neuen Prinzipien, sondern Anwendungen derselben Ladungsverteilungs-Logik.

Die Quantenmechanik, die ein Elektrotechniker benötigt, ist somit keine neue Physik, sondern die konsequente Anwendung bekannter Mathematik auf atomare Dimensionen. Sie ist kein Mysterium, sondern angewandte Leitungstheorie.

Keywords: Telegraphengleichung; Schrödinger-Gleichung; Sturm-Liouville-Theorie; Bloch-Theorem; Bandstruktur; Analogiemodell; Quantenmechanik-Didaktik; Elektrotechnik-Ausbildung

1. Einleitung: Zwei Fragen, eine Antwort

Ganz am Anfang dieser Geschichte steht, noch vor Niels Bohr, der schwedische Spektroskopiker Johannes Rydberg, der 1888 rein empirisch die Formel $1/\lambda = R \cdot (1/n_1^2 - 1/n_2^2)$ fand, mit der sich die Wasserstoff-Spektrallinien exakt berechnen lassen – ohne die geringste theoretische Begründung. Bohr postulierte 1913 diskrete Elektronenbahnen mit ganzzahligem Drehimpuls und traf damit das gesamte Balmer-Spektrum, ließ aber offen und ehrlich eine Lücke stehen: Warum strahlt das kreisende Elektron, anders als jede klassische beschleunigte Ladung nach Maxwell, keine Energie ab? Genau diese offen ausgewiesene Lücke und nicht etwa ein grundlegender Irrtum Bohrs, war der Grund, warum die Quantenmechanik weiterentwickelt werden musste – was folgte, war die konsequente theoretische Vervollständigung seines Modells und damit die Einlösung dieses Versprechens, kein Bruch mit ihm.

Zwei Fragen, die Studierende in diesem Zusammenhang immer wieder stellen, tragen tatsächlich schon die ganze Antwort in sich. Die erste: Wenn die Schrödinger-Gleichung manchmal auch Wellengleichung genannt wird und die Elektrotechnik doch selbst Wellengleichungen behandelt – gibt es da eine Verbindung? Die

zweite, seltener offen ausgesprochen, aber ebenso hartnäckig: Was war eigentlich die ursprüngliche, die anfängliche Idee der Quantenmechanik und der Schrödinger-Gleichung im Besonderen?

$$i\hbar \cdot \partial\psi/\partial t = -(\hbar^2/2m) \cdot \partial^2\psi/\partial x^2 + V(x) \cdot \psi$$

Um diese Gleichung geht es im Folgenden und die ausgeführten Überlegungen sind der Versuch einer didaktisch motivierten Antwort auf jede dieser beiden Fragen. Die erste Antwort führt über die Telegraphengleichung, jene Gleichung, mit der die Nachrichtentechnik selbst begann und zeigt: Die Schrödinger-Gleichung ist kein isoliertes Postulat, sondern ein Mitglied genau derselben Familie von Wellengleichungen, die jeder Elektrotechniker längst kennt, mit einem Lösungsapparat, der bereits neunzig Jahre vor Schrödinger vollständig vorlag. Die zweite Antwort führt zurück zu dem, was Schrödinger 1926 vielleicht tatsächlich berechnen wollte: keine abstrakten Wahrscheinlichkeiten, sondern eine ganz konkrete, statische Ladungsverteilung für atomare Systeme. Dies als einfacher Ansatz, um eine didaktische saubere und plausible Antwort anbieten zu können.

2. Die Telegraphengleichung: Eine Leitung, die schon alles wusste

Im Jahr 1855 hatte William Thomson – der spätere Lord Kelvin – ein sehr konkretes, sehr teures Problem zu lösen. Ein transatlantisches Telegraphenkabel sollte verlegt werden und die Ingenieure wollten vorher wissen, wie schnell und wie verzerrt ein Signal am anderen Ende ankäme. Man fragte ihn, ob ein Punkt-Strich-Code nach viertausend Kilometern Kupferdraht noch lesbar sein würde. Das ist die Art von Frage, die Wissenschaftsgeschichte selten in Heldenposen darstellt, die aber, wie sich zeigen wird, zufällig dieselbe Mathematik enthält wie das Wasserstoffatom. Kelvins Antwort war die Telegraphengleichung [4], hergeleitet aus den vier verteilten Leitungsbelägen, die jeder Elektrotechniker im ersten oder zweiten Semester kennenlernt: Widerstand R (pro Länge), Induktivität L , Kapazität C und Leitwert G . Für die Spannung $u(x,t)$ entlang der Leitung gilt:

$$\partial^2 u / \partial x^2 = L \cdot C \cdot \partial^2 u / \partial t^2 + (R \cdot C + L \cdot G) \cdot \partial u / \partial t + R \cdot G \cdot u \quad (1)$$

Diese Gleichung sieht auf den ersten Blick wie eine ziemlich unspektakuläre Mischung aus ersten und zweiten Zeitableitungen aus – die Art von Formel, die man im Leitungstheorie-Skript abschreibt, in der Klausur reproduziert und danach erfolgreich vergisst. Genau das ist der Fehler, den diese Überlegungen zu korrigieren versucht, denn in dieser Gleichung verschmelzen, sauber versteckt, die zwei fundamentalen Säulen der klassischen Kontinuumsphysik: die reversible Wellenausbreitung (Elektrodynamik/ Mechanik) auf der einen Seite und die irreversible Diffusion (Thermodynamik/ Wärmelehre) auf der anderen Seite, die später getrennt zu Berühmtheit kommen sollten.

2.1 Erster Grenzfall: Die verlustfreie Leitung wird zur Wellengleichung

Setzt man $R = G = 0$ eine ideale, verlustfreie Leitung, wie sie in keinem realen Kupferkabel existiert, aber in jedem Lehrbuch als erster Schritt herhalten muss, verschwinden die beiden Dämpfungsterme vollständig und es bleibt:

$$\partial^2 u / \partial x^2 = L \cdot C \cdot \partial^2 u / \partial t^2 \quad (2)$$

Das ist, Term für Term, die klassische Wellengleichung, mit Ausbreitungsgeschwindigkeit $v = 1/\sqrt{L \cdot C}$. Auf dieser Leitung läuft ein Signal unverzerrt mit konstanter Geschwindigkeit – keine Dämpfung, keine Verschmierung, nur eine treue Kopie des gesendeten Pulses, die am anderen Ende exakt so ankommt, wie sie losgeschickt wurde, nur etwas später. Diese Gleichung ist in ihrer Struktur identisch mit der akustischen Wellengleichung, der elektromagnetischen Wellengleichung und wie sich gleich zeigen wird, mit der Helmholtz-Gleichung, nach einer kleinen Fourier-Transformation in der Zeit.

2.2 Zweiter Grenzfall: Die stark gedämpfte Leitung wird zur Diffusionsgleichung

Der interessantere und historisch genau der Fall, mit dem Kelvin tatsächlich zu kämpfen hatte ist der entgegengesetzte Grenzfall: eine Leitung, bei der die Dämpfungsterme die Trägheitsterme dominieren. Für ein sehr langes, sehr dünnes, sehr verlustreiches Unterseekabel ist der Term $L \cdot C \cdot \partial^2 u / \partial t^2$ gegenüber $R \cdot C \cdot \partial u / \partial t$ vernachlässigbar die Induktivität spielt praktisch keine Rolle, der Widerstand dominiert alles. Übrig bleibt:

$$\partial^2 u / \partial x^2 \approx R \cdot C \cdot \partial u / \partial t \quad (3)$$

Das ist, bis auf die Bezeichnung der Konstanten, exakt die Diffusionsgleichung $\partial^2 u / \partial x^2 \approx D \cdot \partial u / \partial t$ dieselbe Gleichung, die Fourier 1822 für die Wärmeleitung aufstellte, mit einer effektiven Diffusionskonstante $D = 1/(R \cdot C)$. Kelvin nannte dieses Ergebnis die 'Theorie des elektrischen Telegraphen' und es ist historisch bemerkenswert, dass er damit dieselbe Mathematik wiederentdeckte, die Fourier 33 Jahre zuvor für Öfen und Erdwärme hergeleitet hatte. Ein Telegraphensignal auf einem stark verlustbehafteten Kabel verhält sich wie ein Wärmepuls in einem Metallstab: Es verschmiert, verlangsamt sich, verliert mit der Distanz seine scharfen Kanten; das berühmte 'Verzerrungs'-Problem, das Heaviside 1880 durch Zugabe von Induktivität (die 'Heaviside-Bedingung') [5] löste. Die Pointe, die hier schon zu erahnen ist: Wellenausbreitung und Diffusion sind keine zwei verschiedenen physikalischen Welten, zwischen denen man sich entscheiden muss. Sie sind zwei Grenzfälle ein- und derselben Gleichung, je nachdem, ob Trägheit (L , die zweite Zeitableitung) oder Dämpfung (R , die erste Zeitableitung) das Geschehen dominiert. Eine Telegraphenleitung kennt diesen Unterschied nicht als Wesensfrage – sie kennt ihn nur als Verhältnis von Bauteilwerten.

2.3 Der allgemeine Fall: Eine komplexe Helmholtz-Gleichung

Was aber, wenn man keinen der beiden Extremfälle annimmt, sondern die volle Telegraphengleichung im Frequenzbereich betrachtet – also einen eingeschwungenen, harmonischen Zustand $u(x,t) = U(x) \cdot e^{-(i\omega t)}$ ansetzt, bei dem $U(x)$ die ortsabhängige Amplitude der Spannung ist und der gesamte Zeitverlauf im Faktor $e^{-(i\omega t)}$ mit der Kreisfrequenz ω steckt – wie es jeder Elektrotechniker bei jeder Wechselstromrechnung ohnehin tut? Einsetzen in die Telegraphengleichung und Ausführen der Zeitableitungen liefert, wobei jede Ableitung $\partial/\partial t$ einen Faktor $-i\omega$ und jede zweite Ableitung einen Faktor $-\omega^2$ beisteuert:

$$\partial^2 / \partial x^2 U(x) + k^2 U(x) = 0 \quad (4)$$

mit $k^2 = L \cdot C \cdot \omega^2 + i\omega(R \cdot C + L \cdot G) - R \cdot G$. Das ist – und hier schließt sich der erste große Kreis dieser Überlegungen – exakt die Helmholtz-Gleichung, derselbe Gleichungstyp, der in jedem Hohlraumresonator und jedem Wellenleiter auftaucht, nur mit einer Besonderheit: Die 'Wellenzahl' k^2 ist jetzt eine

komplexe Zahl. Ihr Realteil beschreibt, wie gewohnt, die Wellenausbreitung; ihr Imaginärteil – der Term $+i\omega(R \cdot C + L \cdot G)$ – beschreibt die Dämpfung, also den Energieverlust durch Ohmschen Widerstand und Querleitwert. Eine reale Telegraphenleitung mit Verlusten ist, im Frequenzbild, nichts anderes als eine Helmholtz-Gleichung, deren Wellenzahl ein wenig in die komplexe Ebene hinausgewandert ist. Diese komplexe Wellenzahl ist kein exotischer Spezialfall, den man getrost vergessen kann. Sie ist, wie sich in Kapitel 3 zeigen wird, exakt die mathematische Vorlage für das, was in der Quantenmechanik mit der Zeitabhängigkeit von Energiezuständen geschieht – nur dass dort die komplexe Größe nicht in der Wellenzahl, sondern direkt im Exponenten der Zeitabhängigkeit auftaucht. Kurz gesagt: Die Schrödinger-Gleichung ist eine Helmholtz-Gleichung mit imaginärer Dämpfung und Helmholtz-Gleichungen kennt jeder Elektrotechniker bereits aus der Wechselstromtechnik.

2.4 Ein Wort zu $\hbar$, bevor es weitergeht: kein Mysterium, ein Lineal

Jetzt, wo die Helmholtz-Gleichung als gemeinsamer Nenner von Hohlraumresonator, Wellenleiter und verlustbehafteter Telegraphenleitung auf dem Tisch liegt, lohnt sich eine kurze Bemerkung zu der Naturkonstanten, die im nächsten Abschnitt zum ersten Mal explizit auftaucht, aber selten erklärt wird, außer mit dem Verweis, sie sei eben 'fundamental'. Das Plancksche Wirkungsquantum $\hbar$ ist keine magische Schranke, an der die Logik aufhört und die Quantenwelt mit einem Vorhang beginnt. Die Größe $\hbar$ ist, nüchtern betrachtet, ein Skalierungsfaktor der Natur – ein Lineal, weiter nichts. Seine Aufgabe lässt sich explizit vorführen, statt nur behauptet zu werden. Ausgangspunkt ist dieselbe Helmholtz-Gleichung wie in Gleichung (4), hier für den ortsabhängigen Anteil $U(x)$ einer beliebigen Welle, $U''(x) + k^2 U(x) = 0$.

Louis de Broglie ordnete einem Teilchen mit dem Impuls p im Jahr 1924 die Wellenzahl $k = p/\hbar$ zu. Dies ist äquivalent zu seiner eigentlichen Wellenlänge $\lambda = h/p$, wobei h das ursprüngliche Plancksche Wirkungsquantum und $\hbar = h/(2\pi)$ seine reduzierte, in der Quantenmechanik gebräuchlichere Form ist. Die Energie des Teilchens wird über die Beziehung $E_{\text{kin}} = \hbar^2 k^2 / 2m$ direkt mit seiner Wellennatur verknüpft. Da im Potenzial $V(x)$ die klassische Energieerhaltung $E = E_{\text{kin}} + V(x)$ gilt, lässt sich das Quadrat der Wellenzahl ausdrücken als:

$$k^2 = p^2/\hbar^2 = (2m/\hbar^2) \cdot [E - V(x)] \quad (5)$$

Setzt man diesen Ausdruck in die klassische Helmholtz-Gleichung ein und ersetzt die Wellenamplitude U durch die Wellenfunktion ψ , gelangt man direkt zur zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung. Dies markiert einen ersten, eigenständigen Herleitungsweg zu genau jener Gleichung, die in Abschnitt 2.5 über die Telegraphenleitung gewonnen wird:

$$\partial^2 \psi / \partial x^2 + (2m/\hbar^2) \cdot [E - V(x)] \cdot \psi(x) = 0 \quad (6)$$

Damit bestimmt $\hbar$, bei welcher Wellenzahl k eine gegebene Energie E in ein gegebenes Potential V tatsächlich 'passt' und $\hbar$ sorgt dafür, dass die zugehörige Länge $1/k$ in die Größenordnung hineinpasst, die ein Atom tatsächlich hat: etwa 10^{-10} Meter. Setzt man die Wasserstoff-Bindungsenergie von 13,6 eV als kinetische Energie an, beträgt die eigentliche de-Broglie-Wellenlänge $\lambda = h/p = 2\pi\lambda$ des Elektrons rund 0,33 nm, was physikalisch dem Umfang seiner Bahn entspricht. Die Division dieses Wertes durch 2π führt zum Radius der Bahn und ergibt für die reduzierte de-Broglie-Wellenlänge $\lambda = h/p = 2\pi\lambda$ fast genau 0,05 nm – exakt den Wert des klassischen Bohr-Radius. Das ist kein Zufall, sondern Konstruktion: $\hbar$ ist exakt so bemessen, dass die Wellen eines Elektrons im Wasserstoffatom weder lächerlich viel größer noch lächerlich viel kleiner sind als das Atom selbst. Ein Elektrotechniker würde sagen: $\hbar$ ist der Normierungsfaktor, der die Helmholtz-Gleichung von der Welt der Hohlraumresonatoren (Zentimeter, Meter) in die Welt der Atome (Ängström und nm) umskaliert – exakt so, wie ein Maßstab auf einer technischen Zeichnung dafür sorgt, dass ein Brückenpfeiler auf dem Papier ein paar Zentimeter misst, statt zwanzig Meter. Die Brücke wird dadurch nicht geheimnisvoller. Sie wird nur kleiner gezeichnet.

An genau dieser Stelle lohnt ein Blick auf ein historisches Missverständnis, das die Debatte bis heute prägt. Schrödinger selbst sah in seiner Wellenfunktion ψ zunächst kein abstraktes mathematisches Konstrukt, sondern eine ganz reale, im Raum kontinuierlich verschmierte Ladungswolke. Multipliziert man $|\psi(x)|^2$ mit der Elementarladung e , erhält man eine statische Ladungsdichte. Für Schrödinger war dies der physikalische Befreiungsschlag: Eine solche kontinuierliche Wolke beschleunigt nicht wie eine punktförmige Ladung und strahlt folglich auch nach den Gesetzen der klassischen Maxwell-Elektrodynamik keine Energie ab. Das Bohrsche Strahlungsproblem war gelöst. Zwar zeigte Max Born wenig später, dass diese fundamentale Wellenfunktion bei Stoßprozessen als bloße Aufenthaltswahrscheinlichkeit interpretiert werden muss, doch für die hier betrachteten stationären Zustände im Atom – und später im Festkörper – führen beide Sichtweisen mathematisch zum exakt selben Ergebnis. Für den Halbleiterphysiker, der später die Poisson-Gleichung für Inversionsschichten im MOS-Transistor löst, verhält sich das Elektron im Quantentopf exakt so, wie Schrödinger es sich ursprünglich erhofft hatte: als eine kontinuierlich verteilte, berechenbare Ladungsdichte.

2.5 Von der Telegraphenleitung zu Schrödinger

Die Schrödinger-Gleichung lässt sich mit der Telegraphengleichung als Ausgangspunkt nicht mehr als fremdes, postuliertes Objekt einführen, sondern als ein ganz bestimmter, sehr spezieller Grenzfall derselben Familie. Hierzu nimmt man die allgemeine Telegraphengleichung und wirft die zweite Zeitableitung – $L \cdot C \cdot \partial^2 u / \partial t^2$ – komplett über Bord. Dies ist physikalisch zwingend, da das nicht-relativistische Elektron der

klassischen Energie-Impuls-Beziehung E proportional p^2 gehorcht, was in der Wellenmechanik bekanntlich zu einer Feldgleichung mit nur einer ersten Zeitableitung führt. Man behält folglich lediglich diese erste Zeitableitung bei, konvertiert sie jedoch von einer reell gedämpften in eine rein imaginäre Form. Zum RG-Term aus Gleichung (4): Für die hier betrachtete gleichförmige Leitung ist $R \cdot G$ eine ortsunabhängige Konstante sie kann höchstens die gesamte Energie einheitlich verschieben, nicht aber die ortsabhängige potenzielle Energie $V(x)$ erzeugen, die für ein Teilchen in einem Potential gebraucht wird. Für die folgende Herleitung wird daher $R \cdot G = 0$ gesetzt; das Potential $V(x)$ wird im nächsten Schritt stattdessen separat und explizit ergänzt – physikalisch entspräche das einer Leitung, deren Parameter R und G selbst ortsabhängig würden, $R(x)$ und $G(x)$, statt konstant zu bleiben und statt $R \cdot C \cdot \partial u / \partial t$ bei der Telegraphenleitung.

$$\partial^2 \psi / \partial x^2 = -(2mi/\hbar) \cdot \partial \psi / \partial t \quad (7)$$

Hier bezeichnet $\psi = \psi(x)$ die gesuchte Wellenfunktion (das quantenmechanische Gegenstück zur Leitungsspannung $u(x,t)$ von vorhin), m die Masse des betrachteten Teilchens, beim Elektron also die Elektronenmasse, während $\hbar$, wie in Abschnitt 2.4 erläutert, der Skalierungsfaktor ist, der dafür sorgt, dass die resultierenden Wellenlängen in atomare Dimensionen passen. Multipliziert man mit $-\hbar^2/(2m)$ und ergänzt einen Potentialterm $V(x)$ – die Energie, die das Teilchen am Ort x durch äußere Kräfte besitzt, ergibt sich, ausgeschrieben, exakt die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$i\hbar \cdot \partial \psi / \partial t = -(\hbar^2/2m) \cdot \partial^2 \psi / \partial x^2 + V(x) \cdot \psi \quad (8)$$

Das ist dieselbe Gleichung wie eben, nur mit Potentialterm und in der Reihenfolge sortiert, in der sie in jedem Lehrbuch steht keine neue Herleitung, nur die fertige Form, an der man die Telegraphenleitung wiedererkennt, wenn man weiß, wo man hinschauen muss. Die Analogie ist nicht nur formal elegant. Sie ist diagnostisch wertvoll: Eine Telegraphenleitung mit reeller Dämpfungskonstante $R \cdot C$ verliert Energie, ihr Signal klingt ab, die Amplitude schrumpft mit der Zeit. Ersetzt man diese reelle Dämpfungskonstante durch eine rein imaginäre Größe, bekommt man keine Dämpfung mehr man bekommt eine Phase, die sich dreht, ohne dass die Amplitude jemals kleiner wird. Genau das ist der Unterschied zwischen einem dissipativen System (Energie geht verloren, wie Wärme in einem Widerstand) und einem konservativen, unitären System, in dem Energie exakt erhalten bleibt, lediglich die komplexe Phase „tanzt“. Die Schrödinger-Gleichung beschreibt in dieser Lesart buchstäblich eine Telegraphenleitung, deren Dämpfungswiderstand rein imaginär ist – eine Leitung, die niemals Energie verliert, sondern ausschließlich ihre Phase verändert. Elektrotechniker, die mit komplexen Impedanzen arbeiten, kennen dieses Verhalten bereits aus jeder verlustfreien Reaktanz: ein idealer Kondensator oder eine ideale Spule dissipiert ebenfalls keine Wirkleistung, sondern verschiebt nur die Phase zwischen Strom und Spannung.

Die Quantenmechanik, in dieser Lesart, ist Wechselstromtechnik mit einer einzigen, aber folgenreichen Einschränkung: Es gibt überhaupt keinen Wirkanteil. Dieser mathematische Kniff, eine reelle Dämpfungskonstante durch eine rein imaginäre zu ersetzen und damit aus einer dissipativen Gleichung eine oszillierende zu machen, hat später sogar einen eigenen Namen und ein eigenes Geburtsjahr bekommen: Gian Carlo Wick zeigte 1954 [13], dass sich die Zeitvariable t einer beliebigen Differentialgleichung formal durch eine imaginäre Größe – in der Notation üblicherweise $t \rightarrow -i\tau$ – ersetzen lässt, und dass diese sogenannte Wick-Rotation eine Diffusionsgleichung exakt in eine Wellengleichung mit oszillierender, statt abklingender Zeitabhängigkeit überführt.

Eine Frage drängt sich an dieser Stelle förmlich auf und sie verdient eine ehrliche Antwort, keine Ausweichbewegung: Warum darf man die Zeit t einfach durch eine imaginäre Größe ersetzen; ist das nicht bloße Mathematik-Zauberei? Die Antwort ist unspektakulär: Eine Differentialgleichung ist ein formales Objekt, das nicht „weiß“, ob sein Parameter reell oder komplex ist; solange die Substitution konsequent überall durchgeführt wird, bleibt die Gleichung exakt gültig, nur die Interpretation der Lösung ändert sich – von abklingend zu oszillierend. Dieselbe Technik, analytische Fortsetzung genannt, wird routinemäßig in der gesamten mathematischen Physik verwendet, etwa um reelle Integrale über komplexe Konturen zu lösen oder um in der statistischen Mechanik reelle Zeitentwicklung mit euklidischer Pfadintegralrechnung zu verbinden. Es ist kein Kunstgriff, der eigens für die Quantenmechanik erfunden wurde – es ist ein Standardwerkzeug, dass sich die Quantenmechanik lediglich ausgeliehen hat.

Was in diesem Kapitel an der Telegraphenleitung gezeigt wurde – reelle Dämpfung wird zu rein imaginärer Phasendrehung, Energieverlust wird zu Energieerhaltung – ist exakt diese Wick-Rotation, nur 28 Jahre vor ihrer formalen Benennung bereits in der Schrödinger-Gleichung versteckt, ohne dass irgend jemand 1926 den Begriff dazu gehabt hätte. Auch dieser letzte, scheinbar besonders mystische Schritt – von der reellen Telegraphenleitung zur komplexen Quantenwelle – ist also keine Erfindung der Quantenmechanik, sondern eine allgemeine mathematische Technik, die in der Wahrscheinlichkeitstheorie, der statistischen Mechanik und der Quantenfeldtheorie an ganz unterschiedlichen Stellen wieder auftaucht, immer mit derselben Wirkung: Sie verwandelt ein Problem, in dem etwas zerfällt, in ein Problem, in dem etwas schwingt.

Ein Hinweis zur Redlichkeit sei hier ausdrücklich nachgetragen: Der in diesem Kapitel beschrittene Weg über die Telegraphengleichung ist ein heuristischer, didaktisch motivierter Zugang zur Schrödinger-Gleichung, keine Rekonstruktion von Schrödingers tatsächlichem Denkweg. Diesen liefert, quellennah anhand von Schrödingers eigenen Notizbüchern, die historisch saubere Untersuchung von Joas und Lehner [15]:

Schrödingers wirklicher Ausgangspunkt war die optisch-mechanische Analogie, die W. R. Hamilton bereits in den 1830er-Jahren zwischen Fermats Prinzip der Strahlenoptik und dem Prinzip der kleinsten Wirkung in der klassischen Mechanik hergestellt hatte; ein Weg über Hamilton-Jacobi-Theorie und geometrische Optik, nicht über eine gedämpfte Leitung.

Und wie ist diese Schrödinger-Gleichung nun eigentlich zu interpretieren? Bevor die Katze (in diesem einen Fall ist die Redewendung tatsächlich passender, als man zunächst denkt, denn die berühmteste aller Katzen wartet bereits im zweiten Paper dieser Reihe [3]) aus dem Sack gelassen wird, lohnt sich ein Blick auf die ursprüngliche Absicht, mit der Schrödinger 1926 [7] überhaupt an die Sache ging.

Tab. 1: Von der Wellengleichung zu Schrödinger – eine Gleichung, sechs Gesichter. Ausgangspunkt ist die allgemeine Wellengleichung (d'Alembert, 1747); Kelvins Telegraphengleichung (1855) und Maxwells elektromagnetische Wellengleichung (1865) sind beides physikalische Spezialfälle davon. Die Diffusionsgleichung ist ein reeller, die Helmholtz-Gleichung (1860) ein allgemein komplexer Grenzfall der Telegraphengleichung; die Schrödinger-Gleichung ist deren Spezialfall mit rein imaginärer Dämpfung.

Gleichung	Form	Ursprung
Wellengleichung	$\partial^2 y / \partial x^2 = (1/v^2) \cdot \partial^2 y / \partial t^2$	d'Alembert, 1747 (schwingende Saite); allgemeinste Form, v = Ausbreitungsgeschwindigkeit
Telegraphengleichung	$\partial^2 u / \partial x^2 = L \cdot C \cdot \partial^2 u / \partial t^2 + (R \cdot C + L \cdot G) \cdot \partial u / \partial t + R \cdot G \cdot u$	Lord Kelvin, 1855 zehn Jahre vor Maxwells eigener Formulierung,
→ Grenzfall: Diffusionsgleichung	$\partial^2 u / \partial x^2 \approx R \cdot C \cdot \partial u / \partial t$ (starke Dämpfung)	Kelvins ursprüngliche Kabeltheorie; Wärmeleitung, Ladungsträgerdiffusion
→ Allgemeiner Fall: Helmholtz-Gleichung	$\partial^2 U(x) / \partial x^2 + k^2 U(x) = 0$, k^2 - komplex	Helmholtz, 1860 (Schallausbreitung in Röhren); Frequenzbereichs-Form der Telegraphengleichung,
Maxwell- Wellengleichung	$\nabla^2 E = (1/c^2) \cdot \partial^2 E / \partial t^2$	Maxwell, 1865; elektromagnetische Wellen im Vakuum, Spezialfall der Wellengleichung mit $v=c$
Schrödinger (zeitabh.)	$i\hbar \partial \Psi / \partial t = -(\hbar^2 / 2m) \partial^2 \Psi / \partial x^2 + V \Psi$	Grenzfall der Telegraphengleichung mit rein imaginärer erster Zeitableitung, keine zweite

Tab. 2: Die schwingende Saite als klassischer Ausgangspunkt und vier kanonische Quantenpotentiale – alle fünf gelöst mit demselben Sturm-Liouville-Apparat, mit dem jeweiligen Differentialgleichungstyp, den vollständigen Lösungsfunktionen und ihren Analogien. Die erste Zeile ist mathematisch identisch mit der zweiten (dem unendlichen Kasten) – nur $y(x)$ statt $\psi(x)$, ω^2/v^2 statt $2mE/\hbar^2$. Für eine visuell aufbereitete Übersicht der Standardthemen der Quantenmechanik siehe auch [14]. Alle Eigenfunktionen sind auf $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$ normalisiert und für den harmonischen Oszillator: $N_n = (m\omega/\pi\hbar)^{1/4} / \sqrt{2^n n!}$. Die letzte Zeile – das periodische Potential – ist, über das oben hergeleitete Bloch-Theorem, der direkte Weg zur Bandstruktur.

Potential	Schrödinger-Gl.	Lösung ψ	Eigenwerte E_n	Analogien
Schwingende Saite (klassisch, zum Vergleich)	$y'' + k^2 y = 0$, $k^2 = \omega^2/v^2$, $y(0) = y(L) = 0$ lineare DGL 2. Ordnung, konstante Koeffizienten	$\sqrt{2/L} \cdot \sin(n\pi x/L)$	$\omega_n = n\pi v/L$ (Resonanzfrequenzen)	Transmission Line (kurzgeschlossen)
Unendlicher Kasten	$\psi'' + k^2 \psi = 0$, $k^2 = 2mE/\hbar^2$, $\psi(0) = \psi(L) = 0$ lineare DGL 2. Ordnung, konstante Koeffizienten	$\sqrt{2/L} \cdot \sin(n\pi x/L)$	$E_n = \hbar^2 \pi^2 n^2 / (2mL^2)$	Rechteck- Hohlraumresonator
Harmonischer Oszillator	$\psi'' + (2m/\hbar^2)(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2)\psi = 0$ Hermiteische DGL	$N_n H_n(\sqrt{m\omega/\hbar} x) \cdot e^{-(m\omega x^2/2\hbar)}$ (Hermite-Polynome H_n)	$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$	LC-Schwingkreis
Coulomb (H-Atom)	Separation in Kugelkoordin. → Radial- + Winkelteil Winkelteil: Legendre-DGL. Radialteil: Laguerre-DGL	$R_{nl}(r) \cdot Y_l^m(\theta, \varphi)$; R_{nl} : zugeordnete Laguerre-Pol., Y_l^m : Kugelflächenfkt.	$-me^4/(32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2) = -13,6 \text{ eV}/n^2$	Resonator kugelsymmetrisch
Periodisch (Kronig-Penney)	stückweise konstant, an Kanten stetig verklebt Bloch: $\psi(x+a) = e^{i(ka)}\psi(x)$	$u_k(x) \cdot e^{i(kx)}$, u_k gitterperiodisch (Bloch-Funktion)	keine Niveaus mehr – Bänder $E(k)$ + Bandlücken	Periodische LC- Filterkette

Eine didaktische Sicht dazu: Vermutlich wollte er kein neues Universum begründen, sondern ganz bescheiden nur Bohrs Atom-modell mit seinen offen ausgewiesenen Lücken plausibilisieren: „Warum strahlt das Elektron auf der erlaubten Bahn nicht ab?“ und durch eine bessere, in sich geschlossene Theorie ersetzen.

Was dabei herauskam, war zunächst etwas verblüffend Schlichtes: keine neuen Teilchen, keine neuen Kräfte, sondern Zustände für die Elektronen. Vereinfacht gesagt, Ladungsverteilungen, die genau dort saßen, wo Bohrs Bahnen sie vermuten ließen, nur jetzt ohne die ad-hoc-Annahme, ohne das Strahlungsproblem, ohne die Bahn als klassisches Bild. Genau mit dieser bescheidenen Lieferung, nämlich berechenbare, stabile Ladungsverteilungen statt Planetenbahnen begann der Erfolgskurs der Quantenmechanik. Und genau diese Ladungsverteilungen sind es, die später, in Kapitel 4 und 5, zu Bandstruktur und Halbleiterphysik weiterwachsen. Die Schrödinger-Gleichung dient damit, am Anfang dieser Kette, einem auf den ersten Blick unspektakulären, auf den zweiten Blick aber folgenreichen Zweck, nämlich der Berechnung von statischen Ladungsverteilungen. Kein Bewusstsein, kein Beobachter, keine parallele Welt. Nur eine Ladungsdichte, aber eine, aus der buchstäblich die gesamte moderne Physik und Halbleiterelektronik folgt.

3. Was die Schrödinger-Gleichung eigentlich berechnet: Eine statische Ladungsverteilung

Mit der Telegraphengleichung als Pate ist die Schrödinger-Gleichung jetzt kein Orakel mehr, sondern ein Familienmitglied mit einer sehr speziellen, sehr eigenartigen Verlustlosigkeit. Aber genau diese Verlustlosigkeit – die rein imaginäre 'Dämpfung' – hat eine Konsequenz, die in den meisten einführenden Darstellungen entweder verschwiegen oder so knapp abgehandelt wird, dass man sie leicht für eine triviale Randbemerkung halten könnte. Sie ist es nicht. Sie ist der Grund, warum man überhaupt von 'statischen Atomen' sprechen kann.

Die vollständige, zeitabhängige Lösung der Schrödinger-Gleichung für einen Energie-Eigenzustand hat die separierte Form, in der $\Psi(x,t)$ die vollständige, orts- und zeitabhängige Wellenfunktion bezeichnet und $\psi(x)$ – kleines Psi, ohne Zeitargument – den rein ortsabhängigen Anteil, der übrig bleibt, sobald man den Zeitfaktor t abspalte:

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot e^{(-iEt/\hbar)} \quad (9)$$

Man betrachte diese Formel einen Moment mit dem Argwohn, den sie verdient. Da steht eine Funktion, die sich mit der Zeit ändert – der Exponentialfaktor $e^{(-iEt/\hbar)}$ dreht sich, wie ein Uhrzeiger auf dem komplexen Zifferblatt, unaufhörlich weiter, mit einer Kreisfrequenz $E/\hbar$. Wäre Ψ selbst die physikalisch beobachtbare Größe, müsste jedes Atom der Welt ununterbrochen vor sich hin oszillieren, sichtbar, messbar, mit einer Frequenz, die seiner Energie entspricht. Das tut es nicht. Ein Wasserstoffatom im Grundzustand sieht heute genauso aus wie vor einer Mikrosekunde und wird in einer Million Jahren immer

noch genauso aussehen. Wo ist der Uhrzeiger hin? Die Antwort liegt nicht in einer neuen Physik, sondern in einer einzigen, vollständig ausgeschriebenen Zeile Algebra, die zu schreiben sich lohnt, weil sie so selten geschrieben wird. Was man tatsächlich misst, ist nie Ψ , sondern die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi|^2$ – also Ψ multipliziert mit seinem eigenen komplex Konjugierten Ψ^* . Man führe diese Multiplikation explizit, Schritt für Schritt durch. Zu beachten ist dabei, dass die komplexe Konjugation das Vorzeichen im Exponenten umkehrt:

$$\Psi^*(x,t) = \psi^*(x) \cdot e^{(+iEt/\hbar)} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t) &= \psi^*(x) \cdot e^{(+iEt/\hbar)} \cdot \psi(x) \cdot e^{(-iEt/\hbar)} \\ &= \psi^*(x) \cdot \psi(x) \cdot e^{(+iEt/\hbar)} \cdot e^{(-iEt/\hbar)} \\ &= \psi^*(x) \cdot \psi(x) \cdot e^{(i(E-E)t/\hbar)} = \psi^*(x) \cdot \psi(x) \cdot e^0 \\ &= |\psi(x)|^2 \end{aligned}$$

Der Uhrzeiger dreht sich tatsächlich, unaufhörlich, mit voller Kreisfrequenz $E/\hbar$ – aber er dreht sich exakt gegen seinen eigenen Schatten, den er beim komplexen Konjugieren wirft, und beide heben sich im Produkt vollständig auf. Das ist keine Näherung, keine Idealisierung, kein Grenzfall für große Quantenzahlen – es ist eine exakte algebraische Identität, die für jeden einzelnen Energie-Eigenzustand ausnahmslos gilt. Die Zeitabhängigkeit verschwindet nicht, weil das Elektron aufhört, etwas zu tun. Sie verschwindet, weil die einzige Größe, die überhaupt gemessen werden kann – das Betragsquadrat – durch die Struktur der komplexen Multiplikation dazu gezwungen ist, zeitunabhängig zu sein, sobald nur ein einziger Energiewert E im Spiel ist. Man kann diesen Mechanismus auch andersherum formulieren und diese Formulierung trifft den Kern noch direkter: Die komplexe Konjugation friert das System mathematisch ein. Solange sich ein Teilchen in einem einzigen, festen Energie-Eigenzustand aufhält, sorgt die Bildung von $\Psi^*\Psi$ dafür, dass die Ladungswolke wie festzementiert im Raum steht – ‚bewegungslos‘, ‚unveränderlich‘, ‚fotografisch starr‘, obwohl die zugrundeliegende Wellenfunktion selbst, unbeobachtet, mit voller Quantengeschwindigkeit rotiert. Erst wenn man, wie im folgenden Abschnitt gezeigt, zwei verschiedene Zustände mischt, tragen die beiden Phasenfaktoren unterschiedliche Energien E_1 und E_2 – und dann löschen sie sich bei der Bildung von $\Psi^*\Psi$ nicht mehr vollständig aus. Es bleibt ein schwingender Restterm mit der Differenzfrequenz $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$ übrig. Erst in diesem Moment bricht die Statik auf, die Ladung fängt real an zu fließen, und Maxwell übernimmt das Kommando. Die gesamte mystische Aura der 'stehenden Materiewelle' beruht, wenn man es bis zu Ende durchrechnet, auf nichts Geheimnisvollerem als der Beobachtung, dass eine Zahl minus sich selbst null ergibt. Damit ist die eigentliche Rechenaufgabe der nichtrelativistischen Quantenmechanik, für die allermeisten in der Elektrotechnik relevanten Fälle, explizit benannt: Man löse die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung – die nach Abspaltung des Zeitfaktors übrig bleibt und, wie in Kapitel 2 gezeigt, eine gewöhnliche Helmholtz-Gleichung mit ortsabhängiger Wellenzahl ist – nach $\psi(x)$, und $|\psi(x)|^2$ ist, bis auf einen einzigen, festen Umrech-

nungsfaktor, die statische Ladungsverteilung, die man für Bandstrukturrechnungen, Bauelementesimulation und so gut wie jede praktische Anwendung benötigt: Die eigentliche Ladungsdichte ist $\rho(x) = -e \cdot |\psi(x)|^2$, mit e als Elementarladung. Für die hier betrachteten Systeme – skalare Wellenfunktion, keine Spin-Effekte – ist dieser Zusammenhang immer derselbe, feste Faktor; im Folgenden wird deshalb, der Kürze halber, $|\psi(x)|^2$ selbst als ‚Ladungsverteilung‘ bezeichnet, wo genau genommen $-e \cdot |\psi(x)|^2$ gemeint ist. Diese Konvention ist konsistent mit der klassischen Elektrodynamik aus dem ersten Paper dieser Reihe [1] und für alle Anwendungen der Halbleiterphysik in diesem Paper ausreichend. Die komplexe Phase, über die populärwissenschaftliche Darstellungen so gerne raunen, hat an dieser Stelle bereits ihre Schuldigkeit getan und sich sauber und vollständig selbst aufgehoben, bevor irgend jemand auch nur die Möglichkeit hatte, sie geheimnisvoll zu finden. Reduziert man die Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation für den Aufenthaltsbereich des Elektrons auf ihren didaktischen Kern, führt schon die $|\psi|^2$ -Konstruktion selbst unmittelbar zu einer statischen Ladungsverteilungen. Man könnte auch sagen: Das Elektron ist zu Hause in seiner Ladungsverteilung nicht an einem Punkt, sondern über die Zimmer der Wohnung verteilt, mal wahrscheinlicher im einen, mal im anderen.

Interessant – und hier lohnt ein kurzer Seitenblick auf die offenen Systeme – wird es erst, wenn ein Zustand nicht einen, sondern zwei oder mehr Energiewerte gleichzeitig enthält, eine Superposition $\Psi = c_1 \psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar}$. Bildet man dafür $|\Psi|^2$, tauchen Kreuzterme auf, die einen Faktor $e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar}$ tragen – und dieser Faktor verschwindet nicht, weil $E_1 - E_2$ ungleich null ist. Genau dieser nicht verschwindende Kreuzterm ist es, der eine Ladungsverteilung tatsächlich zeitlich oszillieren lässt, mit der Differenzfrequenz $(E_1 - E_2)/\hbar$, und genau eine solche oszillierende Ladungsverteilung ist es, die nach den Maxwell-Gleichungen abstrahlen muss [1]. Ein einzelner Energie-Eigenzustand ist optisch stumm; erst der Übergang von einem Energiezustand in einen anderen gibt der Materie eine Stimme.

4. Die Eigenwert-Maschinerie: Sturm-Liouville, keine Mystik

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung – $\nabla^2 \psi + (2m/\hbar^2)[E - V(x)]\psi = 0$, eine Helmholtz-Gleichung mit ortsabhängiger Wellenzahl, wie in Kapitel 2 gezeigt – gehört, für jedes in der einführenden Quantenmechanik betrachtete Potential $V(x)$, zur Sturm-Liouville-Klasse von Eigenwertproblemen [9]: lineare gewöhnliche Differentialgleichungen zweiter Ordnung, deren Lösungstheorie Charles-François Sturm und Joseph Liouville 1836 in voller Allgemeinheit ausarbeiteten, neunzig Jahre vor Schrödinger, für ganz klassische Probleme – schwingende Saiten, Wärmeleitung in unregelmäßigen Formen, die Eigenschwingungen gespannter Membranen [2]. Sturm und Liouville garantieren, für die gesamte Klasse solcher Probleme und unabhängig vom konkreten Potential, drei Ergebnisse, die in Quantenmechanik-Veranstaltungen routinemäßig so präsentiert werden, als wären sie

überraschende Eigenschaften der Quantenwelt: wie eine diskrete, abzählbare Folge von Eigenwerten; die dazu gehörigen orthogonalen Eigenfunktionen bilden dann auch noch eine vollständige Basis. Aber nichts davon ist quantenmechanisch. Denn auch eine Trommelmembran hat diskrete Eigenfrequenzen, orthogonale Modenformen und eine vollständige Basis für beliebige Membranauslenkungen, aus exakt demselben mathematischen Grund, aus dem ein Elektron in einem Coulomb-Potential diskrete Energieniveaus hat. Sturm und Liouville wussten nichts von Atomen. Sie hätten sich vermutlich königlich amüsiert, zu erfahren, dass ihre Theorie neunzig Jahre später als 'Quantenrevolution' verkauft werden sollte.

4.1 Die kanonische Form, kurz aufgefrischt

Da die Sturm-Liouville-Theorie bei den meisten Lesern vermutlich seit dem zweiten oder dritten Semester unbenutzt im Keller des mathematischen Gedächtnisses steht, lohnt sich eine knappe Auffrischung, bevor Tabelle 2 (s. o.) ohne weitere Umschweife darauf aufbaut. Sturm und Liouville betrachteten 1836 die allgemeine Differentialgleichung

$$-d/dx[p(x) \cdot dy/dx] + q(x) \cdot y = \lambda \cdot w(x) \cdot y \quad (11)$$

und zeigten, dass sich praktisch jede lineare Eigenwertgleichung zweiter Ordnung für eine gesuchte Eigenfunktion $y(x)$ – sofern man die drei Funktionen $p(x)$, $q(x)$ und $w(x)$ passend wählt – in genau diese Form bringen lässt. Für die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung mit Potential $V(x)$ ergibt sich, nach Multiplikation mit $-2m/\hbar^2$, die Identifikation $p(x) = 1$, $q(x) = 2mV(x)/\hbar^2$, $w(x) = 1$, $y(x) = \psi(x)$ und $\lambda = 2mE/\hbar^2$ – die Energie E ist, in dieser Sprache, schlicht der Sturm-Liouville-Eigenwert λ , umgerechnet in physikalische Einheiten. Es lohnt sich, an dieser Stelle einen Moment zu verweilen, denn der eben vollzogene Schritt wirkt im Nachhinein wie eine triviale Umbenennung von Variablen, war es zum Zeitpunkt seiner ersten Durchführung aber ganz und gar nicht. Niemand hat der Schrödinger-Gleichung auf den ersten Blick angesehen, dass $p(x) = 1$ und $q(x) = 2mV(x)/\hbar^2$ zu setzen ist. Der Weg dorthin ist kein Beweis im deduktiven Sinne, sondern ein Koeffizientenvergleich: Man schreibt die allgemeine Sturm-Liouville-Form hin, schreibt die Schrödinger-Gleichung in einer passend umgestellten Version daneben, und vergleicht Term für Term, bis jede Seite zur anderen passt – notfalls durch Multiplikation mit einer geeigneten Konstante, notfalls durch Umsortieren, notfalls durch mehrere Anläufe mit unterschiedlichen Vorzeichen, bis es klickt. Das ist genau die Arbeitsweise, mit der Sturm und Liouville selbst im neunzehnten Jahrhundert an ihre eigene allgemeine Theorie herangegangen waren: nicht indem sie von einer einzigen, eleganten Formel aus alle Spezialfälle ableiteten, sondern indem sie so lange an konkreten Differentialgleichungen – schwingende Saiten, Wärmeleitung, Membranen – herumprobierten und verglichen, bis sich die gemeinsame Struktur von selbst zeigte. Genau dieses geduldige, oft mühsame Identifizieren von Koeffizienten, das Erkennen einer bereits bekannten Form in einer scheinbar neuen Gleichung, ist eine eigenständige, leicht unterschätzte

intellektuelle Leistung – nicht weniger bedeutsam als das Aufstellen der Ausgangsgleichung selbst, nur stiller, weil sie sich am Ende wie selbstverständlich liest, sobald man die fertige Identifikation einmal vor sich hat. Für diese allgemeine Form bewiesen Sturm und Liouville drei Eigenschaften, die für jedes brauchbare Potential gelten und die man sich, einmal hingeschrieben, nie wieder als quantenmechanisches Wunder verkaufen lassen muss:

Erstens, die Orthogonalitäts-Garantie: Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten stehen automatisch senkrecht aufeinander, im Sinne des gewichteten Integrals $\int y_n^*(x) \cdot y_m(x) \cdot w(x) dx = 0$ für $n \neq m$. Für den unendlichen Kasten aus Tabelle 2 etwa heißt das schlicht $\int_0^L \sin(n\pi x/L) \cdot \sin(m\pi x/L) dx = 0$ für $n \neq m$ – eine Tatsache, die jeder, der je eine Fourier-Reihe berechnet hat, im Grunde schon kannte, ohne sie 'Sturm-Liouville-Orthogonalität' zu nennen.

Zweitens, das Vollständigkeits-Versprechen: Jede hinreichend wohlverhaltene Funktion $f(x)$ lässt sich, ausnahmslos, als Reihe der Eigenfunktionen schreiben, $f(x) = \sum a_n \cdot y_n(x)$. Für ein Kasten-Potenzial bedeutet das, dass sich jede beliebige Anfangsverteilung als Summe von $\sin(n\pi x/L)$ -Termen aufbauen lässt – exakt das Bauprinzip jeder Fourier-Synthese, nur unter neuem Namen ins Atom verpflanzt.

Drittens, die Eigenwert-Ordnung: Die Eigenwerte kommen, ohne Ausnahme, in einer geordneten, nach oben unbeschränkten Folge $\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3 < \dots$ – für den Kasten also $E_1 < E_2 < E_3 < \dots$, mit E_n proportional zu n^2 . Diese drei Eigenschaften gelten für die schwingende Saite, für die Wärmeleitung in einem unregelmäßig geformten Metallstück und für das Wasserstoffatom, aus genau demselben Beweis, geführt 1836, ohne dass ein einziges Atom dabei Pate stehen musste.

Ein Unterschied zwischen erster und zweiter Zeile der Tabelle 2 verdient ausdrücklich Beachtung, gerade weil er sonst leicht übersehen wird: Die Ortsfunktionen $\sin(n\pi x/L)$ sind bei Saite und Kasten-Potenzial identisch, ihre Eigenwerte skalieren aber unterschiedlich mit n . Bei der Saite gilt $\omega_n = n\pi v/L$ – linear in n , weshalb die Obertöne einer Gitarrensaite gleichmäßig über ganzzahlige Vielfache des Grundtons verteilt liegen. Beim Kasten gilt $E_n = \hbar^2 \pi^2 n^2 / (2mL^2)$ – quadratisch in n , weshalb die Energieniveaus eines Quantentopfs mit wachsendem n immer weiter auseinanderücken. Der Grund liegt nicht in der Randwertaufgabe, die für beide identisch ist, sondern in der Dispersionsrelation der zugrunde liegenden Gleichung: Die reelle (in der Zeit zweiter Ordnung) Wellengleichung der Saite liefert $\omega \propto k$, linear; die komplexe (in der Zeit erster Ordnung) Schrödinger-Gleichung liefert $E \propto k^2$, quadratisch – exakt der Unterschied zwischen reeller und imaginärer Dämpfungskonstante aus Abschnitt 2.5. Die Coulomb-Zeile häuft Buchstabenkollisionen, die einem elektrotechnisch geprägten Auge leicht zum Verhängnis werden: Das e in $-m_e e^4 / (32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2)$ ist die Elementarladung, nicht die Eulersche Zahl e , die im übrigen Paper als Exponentialbasis auftritt (etwa in $e^{(-i\omega t)}$); ϵ_0 ist die elektrische Feldkonstante (Vaku-

umpermittivität); und m_e ist hier die Elektronenmasse – dasselbe Symbol, das in der benachbarten Zelle als magnetische Quantenzahl in Y_l^m wiederkehrt, dort aber eine ganz andere Größe bezeichnet. Auch n , l und m selbst sind an dieser Stelle keine beliebigen Laufindizes, sondern tragen eigene Namen: n die Hauptquantenzahl (bestimmt die Energie), l die Drehimpulsquantenzahl (bestimmt die Form des Orbitals) und m die magnetische Quantenzahl (bestimmt dessen Ausrichtung im Raum) – dieselbe Doppelbelegung des Buchstabens m wie eben schon bei der Elektronenmasse, nur diesmal beabsichtigt und in der Notation der Atomphysik so üblich.

4.2 Hermite, Legendre, Laguerre: Drei Mathematiker, die nie ein Atom sahen

Bevor es weiter zu Bloch und der Bandstruktur geht, verdient die zweite und dritte Spalte von Tabelle 2 – die Lösungsfunktionen ψ selbst – einen Moment der Anerkennung, der ihnen in den meisten Vorlesungen verweigert wird. Dort tauchen Hermite-Polynome, Kugelflächenfunktionen und Laguerre-Polynome meist kommentarlos auf, als wären es einfach die Namen, die zufällig auf den richtigen Knöpfen des Taschenrechners stehen. Das wird der eigentlichen Leistung, die hinter diesen Namen steckt, nicht annähernd gerecht. Die drei Funktionenfamilien aus Tabelle 2 wurden allesamt für fachfremde Zwecke entwickelt, lange bevor jemand von Atomen sprach. Charles Hermite (1864 [10]) fand seine Polynome im Zusammenhang mit der Gauß-Verteilung der Wahrscheinlichkeitstheorie. Sechzig Jahre später bilden exakt dieselben Polynome, multipliziert mit einer Gauß-Glocke, die vollständige Lösung des harmonischen Oszillators. Adrien-Marie Legendre und Pierre-Simon Laplace (1782 [11]/1785) wollten das Gravitationspotential eines nicht perfekt kugelförmigen Himmelskörpers beschreiben – dieselbe Mathematik beschreibt heute unverändert den Drehimpuls des Elektrons im Wasserstoffatom. Edmond Laguerre (1879 [12]) veröffentlichte seine Polynome im Rahmen reiner Kettenbruch-Analyse; sie bilden heute den radialen Anteil jeder Wasserstoff-Wellenfunktion. Das ist kein Zufall: Wer die Eigenwertstruktur eines Problems vollständig genug löst, löst automatisch jedes andere Problem, das auf dieselbe Differentialgleichung führt – auch eines, das zur Zeit der Lösung noch nicht als Frage existierte. Schrödinger musste 1926 keine dieser Funktionen neu erfinden; er musste nur in einer mathematischen Bibliothek nachschlagen, die seit Jahrzehnten auf ihn gewartet hatte. Genau dieser Umstand – dass die tragende Mathematik bereits 1836 vollständig vorlag und Hermite wie Laguerre nicht die geringste Ahnung von Atomen hatten, als sie ihre Polynome veröffentlichten – untergräbt die gängige Vorstellung, die Quantenmechanik sei eine Revolution gewesen: Revolutionen brauchen neue Werkzeuge; hier wurden neunzig Jahre alte benutzt.

5. Von Coulomb zu Bloch: Der Weg zur Bandstruktur

Man beginne, wie es sich für dieses Kapitel gehört, nicht bei der Physik, sondern beim Ingenieur: Ein einzelner LC-Schwingkreis hat eine einzige Resonanzfrequenz ω_0

$= 1/\sqrt{LC}$ – nichts Neues, das kennt jeder aus den ersten Semestern. Koppelt man zwei identische Schwingkreise, etwa über eine Gegeninduktivität, spaltet sich diese eine Resonanz in zwei auf, eine symmetrische und eine antisymmetrische Schwingungsform, dicht ober- und unterhalb von ω_0 . Drei gekoppelte Schwingkreise ergeben drei Resonanzen, vier ergeben vier, und N identische, gekoppelte Schwingkreise ergeben allgemein N eng benachbarte Resonanzen – ein Durchlassband, wie es jeder kennt, der schon ein Filter aus mehreren gekoppelten Kreisen entworfen hat [8]. Lässt man N gegen unendlich gehen und ordnet die Kreise periodisch an, verschmelzen die N diskreten Resonanzen zu einem kontinuierlichen Frequenzband.

Und in der Sprache der Physik heißt das: Ein einzelnes Atom hat diskrete Energieniveaus. Nähern sich zwei Atome so weit an, dass ihre Elektronenwellenfunktionen überlappen, spaltet sich dieses eine Niveau auf – in einen bindenden und einen antibindenden Zustand, exakt dieselbe symmetrisch/antisymmetrische Aufspaltung wie bei den zwei Schwingkreisen. Bei N Atomen entstehen N eng benachbarte Niveaus, und in einem realen Kristall mit $N \approx 10^{23}$ Atomen verschmelzen diese zu dem, was Physiker ein Energieband nennen. Auch hier greift wieder Sturm-Liouville – aber dafür braucht es, anders als bei $N=2$ oder $N=3$, wo sich das gekoppelte System noch von Hand diagonalisieren lässt, ein Werkzeug, das mit der Periodizität selbst arbeitet, statt N Gleichungen einzeln zu lösen. Ein Kristall aber ist kein einzelnes Atom, sondern eine periodische Anordnung sehr vieler Atome: Das Potential $V(x)$, dass ein einzelnes Elektron erfährt, wiederholt sich mit dem Gitterabstand a , $V(x+a) = V(x)$. Genau dieses Werkzeug lieferte Felix Bloch 1928 [6] mit seinem Bloch-Theorem. Eine Schrödinger-Gleichung mit periodischem Potential hat Lösungen einer eingeschränkten Form:

$$\psi_k(x) = e^{i(k \cdot x)} \cdot u_k(x), \text{ wobei } u_k(x+a) = u_k(x) \quad (12)$$

Angenommen wird dabei nur die Periodizität des Potentials selbst – eine geometrische Tatsache über das Gitter, keine quantenmechanische Zusatzannahme. Die Wellenform folgt daraus zwingend: Der Translationsoperator T_a der eine Funktion nach rechts verschiebt, also $[T_a \psi](x) = \psi(x-a)$ lässt sich explizit als $T_a = e^{-(i \cdot a \cdot \hat{p}/\hbar)}$ schreiben. Ein Verschiebungsschritt im Raum wird in der Quantenmechanik durch einen mathematischen Befehl beschrieben, dessen Herzstück der Impuls ist. Dies offenbart eine fundamentale Naturwahrheit: Impuls ist der Motor jeder räumlichen Bewegung. In einem Kristallgitter wiederholt sich die Umgebung nach exakt einem Atomabstand. Beide Operationen harmonisieren perfekt und vertauschen sich. Da ein reines Verschieben eine Welle weder verzerrt noch staucht, bleibt ihre grundlegende Form beim Sprung von Atom zu Atom immer erhalten. Es verschiebt sich lediglich ihre Phase um einen festen, energieerhaltenden Faktor. Diese Symmetrie erzwingt die Bloch-Form: Das Elektron bewegt sich wie eine freie Welle durch den Kristall, moduliert von einer Funktion, die im exakten Rhythmus der Atome mitschwingt. Das ist nach wie vor dasselbe Eigenwertproblem wie das isolierte Atom – linear, zweiter Ordnung, Sturm-Liouville in seiner

Struktur –, aber die periodische statt isolierte Randbedingung zwingt die Eigenwerte, sich nicht zu einer diskreten Leiter, sondern zu kontinuierlichen Bändern erlaubter Energie $E(k)$ zu ordnen, getrennt durch Lücken verbotener Energie. Für einen einzelnen Bloch-Zustand gilt exakt dasselbe Argument wie in Kapitel 3: Es sind stationäre Zustände mit Energie $E(k)$, also hebt sich die Zeitabhängigkeit beim Bilden von $|\Psi|^2$ exakt weg:

$$|\psi_k(x)|^2 = |u_k(x)|^2 \quad (13)$$

eine zeitlich statische, gitterperiodische Ladungsverteilung. Der Ebene-Wellen-Anteil (der „läuft“) verschwindet beim Betragsquadrat komplett, übrig bleibt nur die periodische Modulation $u_k(x)$ – genau dasselbe Prinzip wie beim Wasserstoffatom, nur jetzt periodisch statt kugelsymmetrisch – so der übliche vereinfachte didaktische Ansatz. Für einen realen Kristall summiert man über alle besetzten Zustände bis zur Fermi-Kante

$$\rho(x) = -e \cdot \sum_{\text{besetzt}} |\psi_k(x)|^2 \quad (14)$$

und das ist exakt das, was moderne Bandstrukturrechnungen (DFT, VASP, Quantum Espresso und ähnliche Programme) am Ende ausspucken: eine Karte der Ladungsdichten im Kristall.

6. Schlussfolgerung

Die Begegnungen der Elektrotechnik mit der Quantenmechanik lassen sich nun im Licht dieses Fundaments neu lesen. Sie werden so betrachtet – mit quasi derselben zugrunde liegenden Mathematik als Basis – zu einem wenig überraschenden Aufeinandertreffen statt zu einem neuen Rätsel. Die Quantenmechanik, die ein Ingenieur tatsächlich braucht, ist von Anfang bis Ende aus einer Mathematik aufgebaut, die die Studierenden ohne ihr Wissen schon in den Anfangssemestern gelernt hatten – verpackt zum Beispiel in der formalen Beschreibung eines Telegraphenkabels, das eigentlich niemand für die Wiege der Quantenmechanik gehalten hätte. Nichts davon erforderte weitere Gleichungen, ein neues Postulat oder einen Verweis auf irgendetwas außerhalb der Mathematik, welches nicht bereits aus der Leitungstheorie oder dem Filterentwurf vertraut ist. Zumindest gilt dies aus dieser Betrachtungsperspektive: als Ausbildungsebene für die Ingenieurinnen und Ingenieure oder als didaktischer Standpunkt.

Wenn man nach all diesen Brücken und Analogien fragen müsste, worin der eigentliche, bleibende Erfolg dieser Theorie für quantenmechanische Systeme liegt, wäre die ehrliche Antwort nüchterner, als jede populärwissenschaftliche Darstellung es gerne hätte: Der Erfolg der nichtrelativistischen Quantenmechanik liegt nicht in mystischen Aussagen über Beobachter, Bewusstsein oder parallele Welten, sondern schlicht darin, dass sie – zum ersten Mal in der Geschichte der Physik – ein zuverlässiges Rezept lieferte, um die statische Ladungsverteilung $\rho(x) = -e \cdot |\psi(x)|^2$, von Atomen, Molekülen oder Festkörpern tatsächlich auszurechnen, um damit experimentelle Ergebnisse zu erklären oder auszuwerten. Das Wasserstoffspektrum, die Form des Periodensystems, die Bandlücke von Silizium, die spezifische Helligkeit einer LED – jede dieser Größen ist am Ende der Rechnung nichts anderes als eine ausgerechnete

Ladungsverteilung oder ein daraus folgender Energieunterschied. Damit fand die nichtrelativistische Quantenmechanik von Anfang an einen erfolgreichen Weg: Sie erfasste zuerst die Welt der Atome, dann die der Festkörper als Beschreibungsmodell korrekt und ist heute, gemessen an der schieren Breite ihrer Anwendungen von der Chemie bis zur Materialwissenschaft, vermutlich das wichtigste einzelne Werkzeug der gesamten Physik.

Der eigentliche Kern dieser Schlussfolgerung liegt nun darin, dass die Schrödinger-Gleichung eine Familienzugehörigkeit mit langem Stammbaum hat: Wellengleichung, Diffusionsgleichung, Helmholtz-Gleichung und sie selbst als deren Spezialfall mit rein imaginärer Dämpfung. Diese Gleichungen sind allesamt Mitglieder derselben Sturm-Liouville-Klasse, deren allgemeiner Lösungsweg – das sei hier nochmals betont – bereits 1836 vollständig vorlag, neunzig Jahre bevor irgend jemand ein Elektron beschreiben wollte.

Auf wenige Wörter verdichtet, ließen sich die hier diskutierten Überlegungen so zusammenfassen: Man nehme eine Wellengleichung, löse sie mit harmonischen Funktionen, multipliziere mit dem konjugiert Komplexen und erhalte eine Ladungsverteilung. Eine solche Kurzform ist vielleicht als Eselsbrücke brauchbar, verdient aber eine Präzisierung, die den eigentlichen Witz der vorangegangenen Kapitel erst sichtbar macht. Präziser: Man nehme eine Wellengleichung mit harmonischem Zeitanteil und potenzialabhängigem Ortsanteil, multipliziere das Gesamtsystem mit seinem konjugiert Komplexen – wodurch sich der oszillierende Zeitanteil exakt weghebt – und erhalte die bereits mehrfach genannte statische Ladungsverteilung. Mehr ist es nicht, und mehr musste es zunächst nie sein. Dieser Mechanismus begründet die zeitliche Statik und liefert $\Psi(r,t)^*\Psi(r,t) = |\psi(r)|^2$ – unabhängig vom Potenzial.

Der Ortsanteil dagegen ist nur in den einfachsten Fällen – der schwingenden Saite und dem unendlichen Potenzialtopf – harmonisch im engen Sinn. Sonst zeigt er sein wahres quantenmechanisches Gesicht: als Hermite-Polynom mit Gauß-Glocke, als Legendre- oder Laguerre-Polynom oder als Bloch-Funktion. Das ist der eigentliche Inhalt von Kapitel 4: Nicht überall dieselbe Ortsfunktion, sondern überall dieselbe Sturm-Liouville-Struktur, die je nach Potenzial unterschiedliche, exakt lösbare Eigenfunktionen liefert.

Von hier aus ließe sich guten Gewissens mit den eigentlichen Rechnungen zur Quantenmechanik beginnen – mit jedem einzelnen Schritt im Detail vorgeführt, so wie es jede vollständige Quantenmechanik-Vorlesung ohnehin tut. Der Unterschied wäre nur einer: Die Studierenden wüssten von Anfang an, wohin die Reise geht.

Diese Quantenmechanik, ganz ungeschminkt betrachtet (ohne den Vorhang aus Beobachter-Paradoxien, ohne die Bequemlichkeit, sie für unverständlich zu erklären), ist eine mathematische Schönheit, die von Anfang an genau diese Schnörkellosigkeit verdient hätte. Kelvins Kabel, Sturm und Liouville, Hermite, Legendre, Laguerre, Bloch – jedes für sich ein eigenständiges Stück Mathematik oder Ingenieurwissen und doch fügt sich alles nahtlos ineinander, ohne dass irgendwo ein Wunder die Lücken kitten müsste. Nimmt man den Vorhang weg, wird das eigentliche Bild sichtbar: eine

durchgehende, gespannte Linie unpräntöser Eigenwertmathematik, an deren Ende, fast nebenbei, die Bandstruktur steht, mit der jeder Transistor der Welt täglich erklärt werden kann. Das Bild war immer schon da. Es musste nur einmal klar gezeichnet werden.

Danksagung und Erklärung

Der Autor dankt U. Rogsch, W.D. Brewer und S. Kindt für wertvolle Diskussionen und kritische Anmerkungen sowie dem Fachbereich Elektrotechnik der Westsächsischen Hochschule Zwickau (WHZ) für die institutionelle Unterstützung. Dank gilt ferner den KI-Assistenten Claude (Anthropic), Le Chat (Mistral) und Google Gemini, die als interaktive Recherche- und Strukturierungswerkzeuge eingesetzt wurden. Der Einsatz von KI-Assistenten ist damit transparent ausgewiesen. Die intellektuelle Verantwortung für Inhalt und Interpretation liegt ausschließlich beim Autor. Der Autor erklärt, dass keine finanziellen oder persönlichen Interessenkonflikte bestehen, und bestätigt, dass diese Arbeit eigenständig verfasst wurde, alle verwendeten Quellen korrekt zitiert sind und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet wurden.

Literatur

- [1] J.M. Grimm, „Der Welle-Teilchen-Dualismus als didaktisches Artefakt“, WHZ (2026). DOI: 10.34806/2026-quant-01
- [2] C. Sturm, J. Liouville, „Mémoire sur les équations différentielles linéaires“, *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, Vol. 1, 373–444 (1836)
- [3] J.M. Grimm, „Quantenmessung als kontinuierlicher Prozess“, WHZ (2026). DOI: 10.34806/2026-quant-02.
- [4] W. Thomson (Lord Kelvin), „On the Theory of the Electric Telegraph“, *Proceedings of the Royal Society* 7, 382–399 (1855)
- [5] O. Heaviside, *Electrical Papers*, Vol. 1–2, Macmillan (1892)
- [6] F. Bloch, „Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern“, *Zeitschrift für Physik* 52, 555–600 (1928)
- [7] E. Schrödinger, „Quantisierung als Eigenwertproblem“, *Annalen der Physik* 79, 361–376 (1926).
- [8] J.R. Hook, H.E. Hall, *Solid State Physics*, 2. Aufl., Wiley (1991)
- [9] R.L. Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*, 4. Aufl., Addison-Wesley (2003)
- [10] C. Hermite, „Sur un nouveau développement en série des fonctions“, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences* 58, 93–100, 266–273 (1864)
- [11] A.-M. Legendre, „Recherches sur l'attraction des sphéroïdes homogènes“, *Mémoires de Mathématiques et de Physique, présentés à l'Académie Royale des Sciences* 10, 411–434 (1782)
- [12] E. Laguerre, „Sur l'intégrale“, *Bulletin de la Société Mathématique de France* 7, 72–81 (1879)
- [13] G.C. Wick, „Properties of Bethe-Salpeter Wave Functions“, *Physical Review* 96, 1124–1134 (1954)
- [14] M. Wick, *Quantenmechanik in Concept-Maps*, Springer Spektrum, Berlin (2019). ISBN 978-3-662-59423-0
- [15] C. Joas, C. Lehner, „The classical roots of wave mechanics: Schrödinger's transformations of the optical-mechanical analogy“, *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 40(4), 338–351 (2009)