

Ulrich Schollwöck

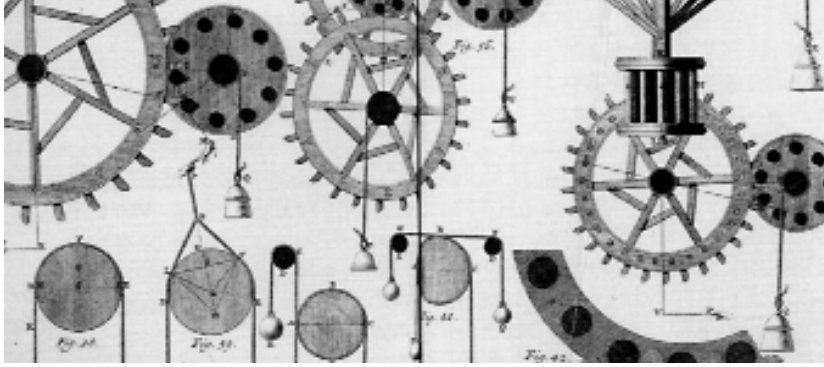
## Die Schönheit des Einfachen hinter der Komplexität

»Er [Benjamin Franklin] war in seiner Art, die Dinge zu sehen und zu präsentieren, ein großer, ein zu großer Vereinfacher.« Schwingt in diesen Worten von Sainte-Beuve, lange bevor bei Jacob Burckhardt aus dem »großen Vereinfacher« gar ein »terrible simplificateur« wurde, nicht etwas von der leichten Verachtung mit, die Geisteswissenschaftler gelegentlich beim Anblick eines Naturwissenschaftlers zu erfassen scheint? Eine Verachtung, die bei den so Betrachteten dann gerne zu Verstockung oder zu Übergriffen in fremde Reviere führt.

Man könnte aber auch von der Verzweiflung des Geisteswissenschaftlers sprechen – während er sich um subtilste Nuancierungen und Akzentuierungen bemüht, scheint unter den Naturwissenschaftlern der brachial-reduktionistische Ansatz von Physiklehrer Bömmel aus der *Feuerzangenbowle* durchaus hoch im Kurs zu stehen: »Aha, heute krieje mer de Dampfmaschin. Also, wat is en Dampfmaschin? Da stelle mer uns janz dumm. Und da sage mer so: En Dampfmaschin, dat is ene große schwarze Raum, der hat hinten un vorn e Loch.« Und das macht er mit unverschämtem Erfolg – auch wenn de Dampfmaschin im Museum verschwunden ist, wurde sie von tausend anderen Wundern abgelöst.

Nicht nur die Maschinen der Moderne (um die es hier nicht gehen soll), sondern auch die Erkenntnisse der Grundlagenforschung, etwa in der Quantenphysik, sind durchaus komplex, sicherlich kompliziert; ein Unterschied, dem ich noch nachgehen werde. Wieso aber kommen die Naturwissenschaftler mit ihrer beklagenswert unsubtilen Denkweise dann so weit?

In vielen Zweigen der Naturwissenschaft besteht das Dilemma, dass die Gesetze, nach denen die betrachteten Objekte funktionieren – zum Beispiel wie das Gehirn operiert –, in weiten Teilen unbekannt sind. Ganz anders ist die Situation in der theoretischen Festkörperphysik, die ich hier betrachten will. Sie bildet die konzeptionelle



Grundlage vieler technologischer Revolutionen des 20. Jahrhunderts, vor allem in der Informations- und Kommunikationstechnologie: vom Laptop über die Digitalkamera bis zum Mobiltelefon, die allesamt auf quantenmechanischen Effekten beruhen. Der Reiz der Festkörperphysik, also der Physik der uns umgebenden Objekte, besteht in dem, was man gerne über erfolgreiche Spiele zu sagen pflegt: »easy to learn, difficult to master«. Die Regeln des Schachspiels sind ebenso wohl bekannt wie einfach zu formulieren und von jedem binnen einer Stunde zu erlernen – und doch ist die Zahl denkbarer Partien unüberschaubar, und Meisterschaft in diesem Spiel ist bei Mensch wie Computer nur wenigen nach jahrelangem Training vorbehalten. Und um ein ganz ähnliches Spiel geht es mir hier.

In der Tat wissen wir seit den dreißiger Jahren, wie wir dem Prinzip nach jeden Körper in unserer Erfahrungswelt vollständig beschreiben können. In der Schrödinger-Gleichung bestimmt die gesamte in einem System vorhandene Energie die zeitliche Entwicklung der quantenmechanischen Wellenfunktion, die alle messbaren Eigenschaften des Systems beinhaltet:

$$H = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

Diese beiden Gleichungen wollen wir im Detail nicht verstehen; dennoch sind sie letztlich von bestechender Einfachheit und lassen nichts von Komplexität ahnen.

Der so genannte Hamiltonoperator  $H$  in der ersten Gleichung ist nichts anderes als die Summe der kinetischen Energien aller Atomkerne und Elektronen des Festkörpers (erste Summe) und der Summe der elektrostatischen Wechselwirkungsenergie zwischen allen Konstituenten (zweite Summe): Gleichnamige Ladungen stoßen sich ab, ungleichnamige Ladungen ziehen sich an. Wir haben es also mit wohlvertrauten Energien und Kräften zu tun. Die zweite, die Schrödinger-Gleichung, nehmen wir als gegeben hin: Warum die Welt auf quantenmechanischer Ebene durch eine »Wellenfunktion« beschrieben wird, die uns Auskunft darüber gibt, mit wel-

cher Wahrscheinlichkeit ein quantenmechanisches Ereignis stattfindet, verstehen wir nicht – aber dabei handelt es sich um eine höchst komplizierte, sicherlich aber nicht komplexe Frage. Sie stellt sich auch bei den einfachsten quantenmechanischen Systemen, die wir exakt lösen können und bei denen nicht auf einer neuen Abstraktionsebene neue Begrifflichkeiten entstehen. Nach fast 80 Jahren Schrödinger-Gleichung ist uns keine einzige Abweichung in der Natur bekannt. Wir dürfen sie mit gutem Recht ebenso absolut setzen wie die Regeln des Schachspiels.

Mit den beiden obigen Gleichungen sind nun grundsätzlich alle Probleme der Festkörperphysik gelöst. Sie enthalten die Leitfähigkeit, Zähigkeit, Farbe von Stoffen, aber eben auch das Innenleben von Laptop und Mobiltelefon. Dass es sich um ein »grundsätzlich« im juristischen Sinne handelt, zeigt sich im Kleingedruckten: Die Zahl der Unbekannten in diesem Gleichungssystem beläuft sich auf etwa 10 hoch 26 und mehr. Dies ist ungefähr die Zahl der Atome und Elektronen in einem Festkörper von etwa einem Kilogramm Masse. Auf ein paar Größenordnungen kommt es hier schon nicht mehr an. Per Hand ist hier nichts auszurichten, moderne Computer können derartige Gleichungen allenfalls für Tausende von Unbekannten lösen. Es handelt sich also um ein praktisch unlösbares Problem, dem man Kompliziertheit schlecht absprechen kann. Ein Grund zur Verzweiflung?

Im Gegenteil: Unter solchen Umständen der Natur Antworten abzuluxsen ist der intellektuelle Reiz der theoretischen Physik, noch mehr: Unser Problem – die Lösung der Schrödinger-Gleichung zu finden – ist glücklicherweise nicht nur kompliziert, sondern komplex. Der Unterschied, den ich hier machen möchte, beruht auf der besonderen Eigenschaft unseres Problems. Bei seiner Vereinfachung drängen sich ganz plötzlich neue Begrifflichkeiten auf, die sicher nicht den zugrunde liegenden Gleichungen immanent sind. Diese neuen Konzepte erweisen sich aber in der Regel als weit über das einzelne Problem hinaus, für das sie zunächst abgeleitet wurden, als nützlich, so dass man zumindest als Praktiker der Wissenschaft, wenn auch vielleicht nicht als Wissenschaftstheoretiker geneigt ist, ihnen eine Art objektiver Existenz zuzusprechen. Erst durch diese Komplexität (worunter ich die Emergenz neuer Begrifflichkeiten verstehe) wird die Natur uns zugänglich! Nur scheinbar eine paradoxe Situation.



Nehmen wir einmal an, ein so genannter Quantencomputer hätte unser Gleichungssystem in seiner Ausgangsform geknackt; diese Erwartung könnte man in der Tat an diese Maschinen richten, deren technologische Grundlagen heute vielfach erforscht werden, die allerdings in der Praxis noch Science Fiction sind. Was wäre durch die Kenntnis der exakten Wellenfunktion mit ihren 10 hoch 26 Variablen gewonnen? Ähnlich viel wie aus der Antwort auf die Frage nach dem Sinn des Lebens, die bekanntlich ›42‹ lautet. Während in letzterem Falle offensichtlich ein Übermaß an begrifflicher Kondensation stattgefunden hat, hätten wir es mit einem Zuviel an letztlich irrelevanter Information zu tun. Aus der Alltagserfahrung wissen wir, dass wir beim Einkauf einen Liter Milch nicht durch seine atomaren Eigenschaften charakterisieren, und aus der Physik lernen wir, dass uns durch

anzugeben; auch hier gibt es keine Zwangsläufigkeit. Solche vereinfachten Beschreibungen der Natur bezeichnet man dann als ›Modell‹. Die Entwicklung geeigneter mathematischer Verfahren zur Lösung dieser Modelle ist wiederum ein schöpferischer Akt, ebenso wie die Extraktion charakteristischer Begrifflichkeiten. Die Modelle sind also das Scharnier zwischen Modellentwicklung und -lösung, und nicht ohne Grund gruppieren sich große Teile der theoretischen Physik um derartige Modelle.

Diesen kreativen Akt will ich an einem äußerst vertrauten Phänomen der Natur erläutern, dem Magnetismus. Die geradezu magische Kraft, die Magneten auf Eisen oder andere Magnete ausüben, ist der Menschheit seit Jahrtausenden und jedem von uns aus der Schule vertraut. Überraschenderweise ist aber gerade dieses uralte Alltagsphänomen eines der großen Rätsel der Physik ge-

*Nach fast 80 Jahren Schrödinger-Gleichung ist uns keine einzige Abweichung in der Natur bekannt. Wir dürfen sie mit gutem Recht ebenso absolut setzen wie die Regeln des Schachspiels.*

zu genaues Hinsehen offensichtlich neue Konzepte entgegen. Hier sähe man in der Tat den Wald vor lauter Bäumen nicht, und die Komplexität des Problems erweist sich damit als Tor zu neuer Einfachheit.

Wie finden wir zu dieser Einfachheit? Aufgabe des theoretischen Physikers ist es, orientiert an dem zu beschreibenden Phänomen eine Vereinfachung der Ausgangsgleichungen anzugeben, die immer noch reich genug ist, dass das Wesentliche des Phänomens erhalten bleibt, die andererseits aber so einfach ist, dass die Vereinfachung gerade noch einer mathematischen oder numerischen Lösung zugänglich ist – und die Lösung in Konzepten formuliert werden kann, die dem Wesensgehalt des Problems gerecht werden. Man muss, um hier Erfolg zu haben, in der Tat ein Simplificateur terrible sein: Der Abgrund zwischen der intrinsischen Schwierigkeit der Lösung des physikalischen Problems, das durch unsere Gleichungen ausgedrückt wird, und unseren methodischen Möglichkeiten scheint oft unüberbrückbar.

Bei diesem Brückenschlag handelt es sich um einen mehrfachen kreativen Akt. In einem ersten Schritt gilt es, eine einfache Vorstellung von dem physikalischen Phänomen zu entwickeln, das man zu beschreiben versucht; ein induktiver Akt. In einem weiteren Schritt versucht man nun, ein entsprechend vereinfachtes Gleichungssystem

wesen, das auch heute noch ständig neue Fragen aufwirft. Diese Fragen tauchen stets dann auf, wenn man versucht, herauszufinden, wie dieses Phänomen auf atomarer Ebene zustande kommt. Im 19. Jahrhundert entwickelte sich, ausgehend von der Beobachtung, dass stromdurchflossene Drahtschleifen Magnetfelder erzeugen, die Vorstellung, dass mikroskopische Kreisströme winzige Magnetfelder erzeugen, die sich zu dem sehr fühlbaren Magnetfeld des Magneten bündeln. Diese Vorstellung wird noch heute gerne in Schulen und Anfängerkursen für Physik gelehrt; im atomaren Bild des 20. Jahrhunderts sind es die Elektronen, die um die Atomkerne kreisen und dabei solche Felder erzeugen. Effekte der Quantenphysik sind hierbei weder berücksichtigt noch benötigt; viele Eigenschaften des Magnetismus können tatsächlich in diesem Modell grob verstanden werden.

Auch hartgesottene Vereinfacher aus den Naturwissenschaften hätte aber nackte Verzweiflung ergreifen müssen, hätten sie gesehen, wie Niels Bohr in seiner Doktorarbeit 1912 in einem letztlich nur ein paar Zeilen umfassenden Beweis zweifelsfrei zeigen konnte, dass es prinzipiell keine klassische Erklärung des Magnetismus geben kann. Zu ihrem Glück blieb dieser Beweis fast 20 Jahre unbeachtet; und zum Zeitpunkt seiner Wiederentdeckung war die schreckliche Wahrheit bereits in



homöopathischen Dosen anderweitig erkannt und verdaut worden.

Der Magnetismus, ein reines Quantenphänomen auf makroskopischer Skala, erweist sich nun als ein besonders hartnäckiges Problem. Oftmals kann man in der Festkörperphysik argumentieren, die unglaublich große Zahl der Mitspieler führe dazu, dass jeder einzelne, also etwa ein einzelnes Elektron, alle anderen nur in einem entindividualisierten Mittel wahrnehme. Man kann sich dann ein Teilchen herausgreifen, das sich in einer Art Kräftefeld bewegt, das die Einflüsse aller anderen  $10 \text{ hoch } 26 \text{ minus } 1$  Teilchen im Mittel zusammenfasst. Dieses »effektive Einteilchenbild« erklärt viele Eigenschaften typischer Festkörper, zum Beispiel ihre Farbe und elektrischen Eigenschaften. Die magnetischen Eigenschaften gehören nicht dazu, sie stellen daher besonders hohe Anforderungen an die Modellierung: Die Individualität der einzelnen Mitspieler will berücksichtigt werden.

Versuchen wir nun, unser Arbeitsprogramm tatsächlich durchzuführen. Als rein quantenmechanische Eigenschaft verfügt ein Elektron über einen so genannten Spin. Das Wort suggeriert eine Rotation des Elektrons um eine Achse, genau wie bei einem Kreisel. In der Tat nimmt diese Eigenschaft zwei Werte an (namens Spin-up und Spin-down), die man in diesem Bild mit der Rotation eines Kreisels im oder gegen den Uhrzeigersinn assoziieren könnte. Das Elektron erzeugt bei dieser Eigenrotation ein kleines Magnetfeld, dessen Richtung durch die Rotationsrichtung festgelegt wird. Wie wird nun aus diesem kleinen Magnetfeld ein so starkes, wie es etwa ein Stabmagnet verursacht? Hier kommt uns eine andere Eigenschaft der Quantenmechanik zur Hilfe: Alle Elektronen sind als Teilchen gleich. Während wir uns in der klassischen Anschauung vorstellen könnten, die Elektronen durch Anhängen kleiner Etiketten voneinander zu unterscheiden, ist dies in der Realität nicht möglich. Die physikalisch messbaren Konsequenzen dürfen sich daher bei einem fiktiven Austausch zweier Elektronen nicht ändern. Da es bei allen messbaren Größen der Quantenmechanik immer nur auf das Quadrat der Wellenfunktion ankommt, kann man bei diesem Austausch das Vorzeichen der Wellenfunktion umdrehen oder gleichlassen; minus mal minus ergibt ja wieder plus. Die Natur realisiert in der Tat beide Optionen, für Elektronen immer die erste. Weitere Überlegungen zeigen dann, dass dies eine denkwürdige Konsequenz hat: Zwei Elektronen können sich bei gleichem Spin (ununterscheidbar und damit

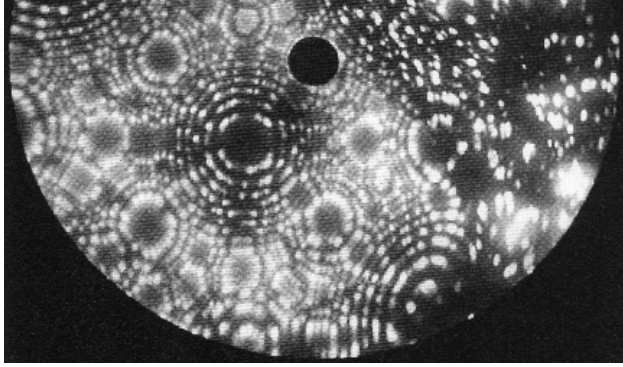
austauschbar) nicht so nahe kommen wie bei entgegengesetztem Spin. Elektronen, die sich nicht so nahe kommen, haben aber eine geringere elektrische Abstoßungsenergie. Diese Konfiguration ist damit energetisch bevorzugt. Elektronenspins werden sich also entgegengesetzt ausrichten; in bestimmten komplizierteren Situationen kann man mit ähnlichen Mechanismen herausfinden, dass sie sich bevorzugt gleich ausrichten.

Wir haben nun eine mögliche Grundlage eines Modells des Magnetismus gefunden: einen Mechanismus, der in der Lage ist zu erklären, warum sich die Magnetfelder einzelner Elektronen nicht zufällig ausrichten, und damit im Mittel null ergeben, sondern sich systematisch parallel oder antiparallel anordnen. Es ist ein Effekt, der eine fundamentale Eigenschaft von Elektronen (Spins) und ihrer quantenmechanischen Wellenfunktionen unter Austausch mit der altbekannten Abstoßung gleicher Ladungen verbindet – von mikroskopischen Kreisströmen ist keine Spur mehr zu finden. Um nun unser Modell zu formulieren, trennen wir uns von allen unnötigen Bestandteilen der Schrödinger-Gleichung.

Wir verzichten auf die Schwingungen der atomaren Gitter (Schall!); die elektrostatischen Wechselwirkungen; die Elektronen, die in den inneren Schalen um den Atomkern leben. Wir behalten nur diese Elektronen, die so weit vom Atomkern entfernt sind, dass sie den Spin von Elektronen anderer Atome überhaupt fühlen können – das ist pro Atom oft nur ein einziges Elektron! Und da die quantenmechanische »Kraft«, die die Ausrichtung der Spins zur Folge hat, von sehr kurzer Reichweite ist, betrachten wir nur die Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Elektronen, die bei benachbarten Atomkernen im Gitter sitzen:

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

Die Summe läuft hier über alle Paare benachbarter Elektronen im Gitter, das Vektorprodukt der Spins ( $S$ ) misst den Grad an (anti)paralleler Ausrichtung, und  $J$  gibt den Gewinn an Energie beim Wechsel zwischen den beiden extremen Ausrichtungen an; diese Größe hängt vom betrachteten Material ab. Dieses Modell bildet als so genanntes Heisenberg-Modell seit 75 Jahren die Grundlage der Erforschung des Magnetismus. Von den ursprünglichen Größen in der Schrödinger-Gleichung und



der Vielfalt der Phänomene ist fast nichts geblieben. Unser so beschriebener Festkörper leitet keinen Schall, hat keine Farbe, leitet keinen Strom, hat keine Zähigkeit – er hat nichts als Magnetismus. Dennoch: Auch dieses Modell ist trotz seiner Primitivität im Allgemeinen einer mathematisch exakten Lösung nicht zugänglich. Im Gegensatz zu den Ausgangsgleichungen hat man aber über die Jahrzehnte hinweg approximative Lösungen gefunden, die zweifelsfrei im Vergleich mit dem Experiment belegen, dass dieses Modell wesentliche Aspekte des Magnetismus mikro- wie makroskopisch erfasst. Konzeptionell hat sich der Blick von der vordergründig wirkenden elektrostatischen Abstoßung in der Ausgangsgleichung auf die Eigenschaften quantenmechanischer Systeme beim Austausch zweier Teilchen als Kern des Magnetismus verlagert – Eigenschaften, die auch unsere Lösung durch den Quantencomputer gehabt hätte, ohne dass wir ihre Bedeutung für das physikalische Phänomen in der Informationsflut hätten erkennen können.

Der Triumph der Modellbildungen in der theoretischen Physik ist aber stets nur ein vorläufiger. Neue Phänomene oder quantitative Diskrepanzen führen zu ganzen Familien immer komplexerer Modelle mit Vorläufigkeitscharakter. Trotz dieses Trends kommt es aber immer wieder zu einer Verselbständigung, geradezu Absolutsetzung von Modellen wie dem oben erläuterten Heisenberg-Modell. Unter der glatten Oberfläche des einfachen Modells entdeckt man unerwartete mathematische Strukturen und physikalische Eigenschaften von unerwartetem Reichtum und eigener Ästhetik. Da diese im Modell versteckten Strukturen nicht nur subjektive intellektuelle Freude auslösen, sondern oft – Jahre später – auch in der Natur beobachtet werden, ist es verständlich, dass man die Modelle auch weit über den Gültigkeitsbereich des ursprünglichen Modells hinaus untersucht, sich also zum Beispiel nicht mehr darum kümmert, ob die angenommene Wechselwirkung auf atomarer Ebene überhaupt realisierbar ist. Zunächst mag dies nur als Nachteil erscheinen: Der Zusammenhang mit der tatsächlichen physikalischen Realität geht verloren; Eigenschaften der Realität, die nicht durch die Modellbildung erfasst werden, sind aus dem Blickfeld entschwunden oder, was noch schlimmer ist, werden durch fehlerhafte Erweiterungen von Modellen hinzugenommen, während sie eigentlich durch die zugrunde liegenden Konzepte prinzipiell nicht erfasst werden, wie man dann oft erst viel später einsieht.

Andererseits stellt sich heraus, dass wesentliche Eigenschaften physikalischer Systeme konzeptionell durch die Betrachtung von Modellen in Parameterbereichen gewonnen werden können, die sicher in der Realität nicht zugänglich sind. So kann man zum Beispiel einen Großteil der vielfältigen Eigenschaften so genannter niedrigerdimensionaler Magneten (also magnetischer Ketten und Schichten) durch einen ›Quantenphasenübergang‹ bei Temperatur null erklären. Ein solcher Phasenübergang wird im Gegensatz zu den uns aus dem Alltag vertrauten wie Schmelzen von Eis zu Wasser nicht durch thermische Effekte getrieben, sondern ist rein quantenmechanischen Ursprungs. Da der absolute Temperaturnullpunkt prinzipiell in der Natur nicht erreicht werden kann, handelt es sich um ein rein theoretisches Konstrukt, das gezielt Gültigkeitsgrenzen der Physik überschreitet. Dennoch hat erst die Hinzunahme dieses archimedischen Punkts neue Ordnung und Einfachheit in unser Verständnis reeller Magneten gebracht, und an diesem Punkt steht die Karawane der Forschung heute. Wir haben dabei gute Hoffnung, noch viele Erkenntnisse im Wechselspiel von vorsichtiger Weiterentwicklung und kühner Überinterpretation von Modellen zu erhalten.

Von einfachen Grundprinzipien über komplexe Realisationen zu neuen einfachen Grundprinzipien: Hier liegt die große Faszination der theoretischen Physik; oder wie es der große amerikanische Jurist Oliver Wendell Holmes ausgedrückt hat: »Ich würde keinen Heller für die Einfachheit auf dieser Seite der Komplexität geben, aber ich würde mein Leben für die Einfachheit auf der anderen Seite der Komplexität geben.«