Quantenphysik

Quantenphysik

Eine Einführung anhand elementarer Experimente

Zweite, neu bearbeitete Auflage Mit 180 Abbildungen 85 Aufgaben mit Lösungen und einer CD-ROM



Professor Dr. Hans Jörg Leisi

Institut für Teilchenphysik ETH Zürich Schafmattstraße 20 8093 Zürich, Schweiz e-mail: leisi@phys.ethz.ch

Zu diesem Buch ist für Dozenten auf Wunsch ein Lösungsheft mit ausgewählten Lösungen erhältlich. Schriftliche Anfragen richten Sie bitte an:

Springer-Verlag Programmplanung Physik I Tiergartenstr. 17 69121 Heidelberg

Bibliografische Information der Deutschen Bibliothek.

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über http://dnb.ddb.de> abrufbar.

ISBN-10 3-540-27072-8 2. Aufl. Springer Berlin Heidelberg New York ISBN-13 978-3-540-27072-0 2. Aufl. Springer Berlin Heidelberg New York

ISBN 3-540-01219-2 1. Aufl. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdrucks, des Vortrags, der Entnahme von Abbildungen und Tabellen, der Funksendung, der Mikroverfilmung oder der Vervielfältigung auf anderen Wegen und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen, bleiben, auch bei nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten. Eine Vervielfältigung dieses Werkes oder von Teilen dieses Werkes ist auch im Einzelfall nur in den Grenzen der gesetzlichen Bestimmungen des Urheberrechtsgesetzes der Bundesrepublik Deutschland vom 9. September 1965 in der jeweils geltenden Fassung zulässig. Sie ist grundsätzlich vergütungspflichtig. Zuwiderhandlungen unterliegen den Strafbestimmungen des Urheberrechtsgesetzes.

Springer ist ein Unternehmen von Springer Science+Business Media

springer.de

© Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2004, 2006 Printed in Germany

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Satz und Herstellung: LE-TEXJelonek, Schmidt und Vöckler GbR, Leipzig Einbandgestaltung: Erich Kirchner, Heidelberg

Gedruckt auf säurefreiem Papier 54/3141/YL - 5 4 3 2 1 0

Zum hundertsten Geburtstag meiner Eltern und der Quantenphysik

"Wer immer strebend sich bemüht, – der wird zur Wahrheit hin geführt!"

Vorwort zur zweiten Auflage

"Das Streben nach der Wahrheit ist köstlicher als deren gesicherter Besitz."

G. E. Lessing

Die Schlusssätze von Einsteins letzter autobiografischer Skizze handeln von der Quantentheorie. Darin zitiert er die "tröstlichen" Worte von Lessing.

Vielleicht hat das manifestierte Interesse an meiner Einführung in die Quantenphysik auch etwas zu tun mit dem "köstlichen Streben nach der Wahrheit". Der Weg hin zur Wahrheit besteht hier darin, die Begriffe und Gesetze der Quantenphysik – im ständigen Kontakt mit dem Experiment – schrittweise zu erarbeiten und immer wieder zu überprüfen.

Für die Neuauflage wurde dieser Weg nochmals verinnerlicht und der gesamte Text überarbeitet. Daraus resultierten sowohl zusätzliche Hinweise auf neue Entwicklungen in einzelnen Gebieten (Stichworte: Nanotechnologie, Suprafluidität im Bose-Einstein-Kondensat) als auch verschiedene didaktische Verbesserungen in der Präsentation des Stoffes.

Anregungen und Hinweise dazu verdanke ich weitgehend meinen Freunden und Kollegen, Andreas Badertscher, Ralph Eichler, Tilman Esslinger, Pieter Goudsmit und Markus Simonius. Bei der Überarbeitung der Abbildungen habe ich die kompetente Unterstützung durch Paul Herrmann, Frau Isabelle Wiederkehr und Elmar Heeb erfahren. All diesen Personen, einschließlich der Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des Springer-Verlages, gebührt mein herzlicher Dank.

Oberehrendingen, im April 2005

Hans Jörg Leisi

Vorwort zur ersten Auflage

"Bildung ist keine Scheune, die man füllt, sondern ein Feuer, das man nährt."

Unbekannter griechischer Autor

Die *Quantenphysik* war das zentrale Thema der Naturwissenschaften im zwanzigsten Jahrhundert. Sie hat das Geschehen in der Physik zunächst revolutioniert und dann weitgehend geprägt, mit wichtigen Ausstrahlungen in die Nachbarwissenschaften. Die letzten Jahrzehnte haben eine nie dagewesene Breitenentwicklung der Physik gebracht. Die Stichworte dazu sind: Quantenoptik, Astro- und Teilchenphysik, Festkörper- und Materialforschung.

Trotz dieser Entwicklung möchte niemand das Studium der Physik verlängern, im Gegenteil: der Ruf nach Straffung ist unüberhörbar. Wie begegnen wir im Physikunterricht diesem Dilemma? Angesichts der Breitenentwicklung fühlt sich der Dozent verpflichtet, den Unterrichtsstoff (speziell in der Quantenphysik) auf aktuelle Teilgebiete auszuweiten. Dies bedingt notwendigerweise eine immer straffere Behandlung der Grundlagen, mit der Konsequenz, dass die formalen mathematischen Begriffe früh im Kurs eingeführt werden müssen. Wenn man bedenkt, dass es 30 Jahre intensivster Anstrengungen der fähigsten Physiker der damaligen Zeit bedurfte, um die schwierigen Prinzipien der Quantenphysik zu erarbeiten, ist klar, dass ein solches Vorgehen auf Kosten des physikalischen Verständnisses gehen muss. Das Ergebnis ist die zunehmende Vermittlung von Stoff und Wissen – auf Kosten der grundlegenden Zusammenhänge.

Im vorliegenden Lehrgang wird ein *neuer Weg* der Einführung in die Quantenphysik beschritten. Wir verlassen den traditionellen Pfad, der sich immer noch weitgehend an der geschichtlichen Entwicklung der Quantentheorie orientiert (Wellen-Teilchen-Dualismus, Schrödinger-Gleichung etc.) und wählen folgendes Vorgehen. Ausgangspunkt sind *fundamentale Experimente* (teils neueren Datums) aus verschiedenen Gebieten der Quantenphysik (vorzugsweise Demonstrationsexperimente). Die experimentellen Resultate dienen dazu, die grundlegenden Begriffe und Gesetze der Quantenphysik *heuristisch* zu gewinnen: die Heisenbergschen Ungleichungen, Wahrscheinlichkeit und Quantenamplitude, das Superpositionsprinzip, Orthogonalität und Vollständigkeit etc. Die Wellenfunktion der Schrödinger-Gleichung erscheint dann als spezielle Quantenamplitude. Die formalen mathematischen Begriffe der Quantentheorie, wie der Zustandsvektor im Hilbert-Raum und die Operatoren der Quantenmechanik, werden erst am Ende der Vorlesung (in den Anhängen C und E) eingeführt. Unser Konzept löst also einerseits die

X Vorwort zur ersten Auflage

erwähnten Probleme und gibt andererseits einen umfassenden Einblick in die Quantenphänomene – bereits in einer Einführungsvorlesung.

Wir fassen den hier beschrittenen Weg zusammen:

- Die ungewohnten neuen Begriffe der Quantenphysik werden, in engster Verbindung mit den Phänomenen und ohne gedankliche Sprünge, *schrittweise* eingeführt.
- Der Breitenentwicklung wird dadurch Rechnung getragen, dass wir uns nicht auf die Wellenmechanik beschränken, sondern von Anfang an konkrete Themen aus *allen* Wissensgebieten behandeln. Auf diese Weise wird dem Leser schon von Anfang an der universelle Charakter der Quantenphysik vor Augen geführt.
- Die Symbiose zwischen Experiment und Theorie wird gleich zu Beginn angelegt: Es ist eine fundamentale Eigenschaft der Quantenphysik, dass die beiden Bereiche (Theorie und Experiment) untrennbar sind.
- Wir werden einer großen Zahl von Quantenphänomenen begegnen: Hohlraumstrahlung, Photoeffekt, Wasserstoffatom, Resonanzfluoreszenz, Röntgen- und Elektronenbeugung an Kristallen, Compton-Effekt, Drehimpulseigenschaften, Mössbauer-Effekt, Delta-Resonanz, Zeeman-Aufspaltung, Stern-Gerlach-Experiment, Interferenzphänomene, Müon-Spin-Rotation, Tunneleffekt, harmonischer Oszillator, Strahlungsprozesse, Austauschkraft, Atombau und Schalenmodell der Kerne, Metall-Halbleiter-Isolator, Laser, Bose-Einstein-Kondensat im Gas, Suprafluidität und Supraleitung, einschließlich einer phänomenologischen Behandlung der Umwandlung von Quantonen anhand des Standardmodells der Teilchenphysik.

Der vorliegende Lehrgang soll eine "elementare" Einführung in die Quantenphysik sein, im wahren Sinn des Wortes: grundlegend–naturhaft–einfach. Die *Albert Einstein* zugeschriebene Maxime, "man soll alles so einfach wie möglich erklären – aber nicht einfacher", war dabei wegweisend.

Die Gesamtstruktur des Buches ist zweiteilig. Im ersten Teil (Kap. 1 bis 4^1) werden die quantenphysikalischen Grundbegriffe und Gesetze anhand von Schlüsseleperimenten erarbeitet. Diese Experimente sind auf der beiliegenden CD-ROM "Experimente als Schlüssel zur Quantenphysik" aufgezeichnet², erklärt und kommentiert. Im zweiten Teil (Kap. 5 bis 8) werden die Gesetze weiter entwickelt und die daraus folgenden Quantenphänomene in allen Bereichen der Physik hergeleitet. Die Eigenschaften einer Vielzahl von einfachen Systemen werden explizit berechnet.

Jedes Kapitel enthält ausgewählte Übungsaufgaben, deren Lösungen am Ende des Buches zusammengestellt sind.

¹ Die Kapitel 2, 3 und 4 sind inspiriert von *J.-M. Lévy-Leblond* und *F. Balibar*, Quantics – Rudiments of Quantum Physics, North-Holland (1990).

² Grundsätzlich gilt: Ein aufgezeichnetes Demonstrationsexperiment ersetzt niemals die Vorführung des Experiments in der Vorlesung!

Der Lehrgang ist entstanden aus der Einführungsvorlesung zur Quantenphysik, wie sie an der ETH Zürich für die Studierenden der Physik im 4. Semester gehalten wird. Diese Veranstaltung stützt sich auf die vorangehende Einführung in die klassische Physik: Mechanik, Elektromagnetismus und Wärme.

Zum Verständnis des Lehrgangs sind folgende mathematischen Kenntnisse erforderlich: komplexe Zahlen, Differential- und Integralrechnung, Vektoranalysis und einfache Differentialgleichungen.

Wegen der konsequent niedrig gehaltenen mathematischen Vorkenntnisse eignet sich der Lehrgang auch als Einführung in die Quantenphysik für Studierende der Naturwissenschaften (Nicht-Physiker) und des Ingenieurwesens. Das Buch ist ebenfalls geschrieben für Dozierende der Physik an Fachhochschulen und am Gymnasium. Es eignet sich zudem zum Selbststudium, etwa für naturwissenschaftlich interessierte Leserinnen und Leser, die die erwähnten mathematischen Vorkenntnisse mitbringen.

Das Lehrbuch ist modular aufgebaut und erlaubt deshalb große Variationsmöglichkeiten in der Gestaltung einer Vorlesung. In der einfachsten Variante kann man den ersten Teil weglassen und die Schrödinger-Wellengleichung an den Anfang stellen. Man behandelt dann ausgewählte Beispiele aus Kap. 5 und eventuell aus den folgenden Kapiteln. Bis hin zu einer vollständigen Behandlung des Stoffes sind unzählige Varianten möglich. Der gesamte Umfang des Buches übersteigt allerdings den Stoff für eine einsemestrige Vorlesung (der Rest ist als anregende Ergänzung zur Vorlesung gedacht).

Meine Freunde, Kollegen und Mitarbeiter, Andreas Badertscher, Walter Beer, Willy Baumgartner, Pieter Goudsmit, Paul Herrmann, Valerie Markushin, Charles Perdrisat, Geoffrey Sewell und Markus Simonius, haben zu Konzept und Inhalt des Lehrgangs auf mehrfache Weise beigetragen: durch zahlreiche Diskussionen zu Themen der Quantenphysik, durch Kritik und Anregungen zu Teilen oder zum Ganzen des gelesenen Manuskripts sowie durch Beiträge zu den Übungsaufgaben (Pieter Goudsmit und Andreas Badertscher). Informationen und konstruktive Kritik meiner Kollegen, Jörg Bilgram, Tilman Esslinger, Ulrich Feller, Klaus Hepp, Beat Jeckelmann, Walter Kündig, Harry Nussbaumer, Heinrich Rohrer und Markus Sigrist, ihr Fachgebiet betreffend, sind in den Text eingeflossen.

Meinem Kollegen Ralph Eichler verdanke ich die Initiative zur Realisierung des Projekts der CD-ROM, welches durch die ETH Zürich unterstützt wurde. Die MitarbeiterInnen sind im Impressum der (beiliegenden) CD-ROM aufgeführt.

Valeri Markushin und Rosa Bächli waren immer hilfsbereit, wenn IÅTEX-Probleme komplizierterer Art auftauchten.

Kollege Martin Landolt sorgte für eine unkomplizierte Art der Zusammenarbeit mit den Diensten des Departements Physik. XII Vorwort zur ersten Auflage

Frau Isabelle Wiederkehr hat kompetent und sorgfältig alle Abbildungen des Buches gemacht. Sie wurde von Frau Hanni Hediger, Paul Herrmann und Othmar Fluck unterstützt.

An dieser Stelle sind auch die Anregungen und klaren Zielvorgaben des Physik-Editors des Verlags, Dr. Christian Caron, sowie die angenehme Zusammenarbeit zu erwähnen.

Allen genannten Personen möchte ich für ihren Beitrag zum neuen Lehrmittel herzlich danken.

Oberehrendingen, im Januar 2003

Hans Jörg Leisi

Inhaltsverzeichnis

1	Die	frühen	Entdeckungen	1
	1.1	Versage	en der klassischen Physik – Ausblick	1
	1.2	Das Pla	ancksche Strahlungsgesetz (1900)	3
	1.3	Der Ph	otoeffekt (Einstein 1905)	8
	1.4	Das Bo	hrsche Atommodell (1913)	12
	1.5	Die ħ-F	Regel	21
2	Das	Quant	on und die Heisenbergschen Ungleichungen	27
	2.1	Zwei Ez	xperimente: ein neues Prinzip	28
		2.1.1	Beugung von Licht am Spalt	28
		2.1.2	Streuung von α -Teilchen an Atomkernen	31
		2.1.3	Der Quantonbegriff	35
	2.2	Die Tei	lchen-Wellen-Symmetrierelationen	36
		2.2.1	Die Planck-Einstein-Beziehung	36
		2.2.2	Die De-Broglie-Beziehung	39
		2.2.3	Die Quantisierung des Drehimpulses	55
	2.3	Die Hei	senbergschen Ungleichungen	60
		2.3.1	Die klassischen spektralen Ungleichungen	60
		2.3.2	Energie und Zeit	63
		2.3.3	Impuls und Ort	80
		2.3.4	Drehimpuls und Winkel	85
	2.4	Das Ste	ern-Gerlach-Experiment (1922)	97
	2.5	Die Eig	genschaften des Quantons (Zusammenfassung) 1	.01
3	Wal	hrschein	nlichkeit und Quantenamplitude1	11
	3.1	Polarisa	ationsexperimente mit Licht (klassisch) 1	11
		3.1.1	Lineare Polarisation 1	11
		3.1.2	Zirkulare Polarisation 1	14
	3.2	Projekt	ionswahrscheinlichkeit und die Messung	
		physika	lischer Größen 1	17
		3.2.1	Polarisation zur Basis (x,y) 1	17
		3.2.2	Die z-Komponente des Drehimpulses 1	25
		3.2.3	Polarisation zur Basis (R,L)	.27
		3.2.4	Polarisation und Drehimpuls des Photons 1	.30
		3.2.5	Zusammenfassung 1	.33

XIV Inhaltsverzeichnis

	3.3	Die Q	uantenamplitude und ihre Gesetze	. 135
		3.3.1	Das Quanteninterferenzexperiment	. 135
		3.3.2	Zirkulare Polarisation und inverse Projektionen	. 142
		3.3.3	Reiner Zustand und Gemisch	. 148
		3.3.4	Quanton mit Spin 1/2	. 149
4	Das	Quan	ton in Raum und Zeit	. 155
	4.1	Die Ze	eitabhängigkeit der Quantenamplitude	. 155
		4.1.1	Eigenzustände der Energie	. 156
		4.1.2	Das μ SR(Müon-Spin-Rotation)-Experiment	. 157
		4.1.3	Allgemeine Zeitabhängigkeit	. 171
	4.2	Weller	ufunktion im Orts- und Impulsraum	. 171
		4.2.1	Ortsamplitude und Wahrscheinlichkeitsdichte	. 171
		4.2.2	Impulsamplitude	. 178
		4.2.3	Größen mit kontinuierlichen Eigenwertspektren	. 182
		4.2.4	Wellenfunktionen in drei Dimensionen	. 183
	4.3	Spinor	ren	. 185
5	Die	Sahnä	dinger Wellengleichung	101
0	5 1	Dio Sc	hrödinger Cleichung des freien Quantons	102
	0.1	511	Des Quanton im unendlich tiefen Kestennotentiel	103
		5.1.1 5.1.2	Die Parität	201
		5.1.2 5.1.3	Die allgemeinste Bewegung des freien Quantons	201
	52	Die Sc	brödinger-Gleichung mit Potential	202
	0.2	521	Die Kontinuitätsgleichung	207
		5.2.1	Stetigkeitsbedingungen	209
		5.2.2	Streuung an der Potentialstufe	210
		5.2.4	Der Tunneleffekt	. 216
		5.2.5	Der harmonische Oszillator	. 226
		5.2.6	Der doppelte Potentialtopf	. 233
		5.2.7	Das Wasserstoffatom	. 246
C	1.1.1	4		0.01
0	Elek		agnetische Prozesse	. 201
	0.1	KIASSI	Sche Theorie	. 202
		0.1.1	Desenante Emission	. 202
	6 9	0.1.2	Resonanzhuoreszenzstreuung	. 200
	0.2	CO 1	Elektrigehe Dipelstrehlung	. 271
		0.2.1	Der Leger	. 211
		0.2.2	Der Laser	. 280
7	Syst	eme i	dentischer Quantonen	. 291
	7.1	Das Z	wei-Quanton-System	. 292
		7.1.1	Ortsraum	. 292
		7.1.2	Spinraum	. 297
		7.1.3	Ort und Spin	. 302

		7.1.4 Wasserstoffatom
		7.1.5 Positronium
		7.1.6 Das Heliumatom
	7.2	Bosonen und Fermionen
	7.3	Das Pauli-Prinzip
		7.3.1 Atombau
		7.3.2 Metalle-Halbleiter-Isolatoren
		7.3.3 Atomkerne (Schalenmodell)
	7.4	Bosonische Systeme
		7.4.1 Das Bose-Einstein-Kondensat im Gas
		7.4.2 Suprafluidität und Supraleitung
8	Mat	cerie, Antimaterie und Strahlung 359
	8.1	Dirac's Entdeckung 360
	8.2	Die Struktur der Materie 362
	8.3	Materie und Strahlung 365
		8.3.1 Die vier fundamentalen Kräfte 365
		8.3.2 Die Vektorbosonen 366
		8.3.3 Die elementaren Prozesse
		8.3.4 Elektromagnetische Prozesse
		8.3.5 Die Pion-Nukleon-Streuung
		8.3.6 Elektroschwache Prozesse und Zerfälle
		8.3.7 Offene Fragen der Teilchenphysik 376
Lös	unge	en der Aufgaben 379
\mathbf{A}	Stat	istische Fehler
в	Die	Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms 401
C	Dor	Zustandsvoktor 411
U	Der	
D	Schi	rödinger-Gleichung des Zwei-Quanton-Systems 413
\mathbf{E}	Die	Operatoren der Quantenmechanik 419
\mathbf{F}	Einl	heiten und physikalische Konstanten
	F.1	Das SI-System
	F.2	Physikalische Konstanten 429
	F.3	Umrechnungsfaktoren 430
Sac	hver	zeichnis

1 Die frühen Entdeckungen

Inhalt: Wir erinnern an Situationen, in welchen die Aussagen der klassischen Physik versagen, und schließen daraus, dass die klassische Physik im *atomaren* Bereich zusammenbricht. Dann wenden wir uns den ersten Entdeckungen der Quantenphysik zu. Diese resultieren aus den Behandlungen der Hohlraumstrahlung durch *Max Planck*, des Photoeffekts (Quantisierung der Lichtenergie) durch *Albert Einstein* und des Wasserstoffatoms durch *Niels Bohr*. Zur Erklärung der spektralen Energiedichte des Strahlungsfeldes postuliert *Planck* die Quantisierung der Energie des harmonischen Oszillators. Zur Erklärung u.a. des Photoeffekts postuliert *Einstein* die Quantisierung der Energie des elektromagnetischen Feldes. Die Frequenzen der Spektrallinien des Wasserstoffatoms folgen aus dem Postulat der Quantisierung des Drehimpulses des Elektrons. Die Quanten der entsprechenden physikalischen Größen sind alle durch eine universelle, neue Naturkonstante, die Plancksche Konstante h, festgelegt. Die Plancksche Konstante bestimmt den Gültigkeitsbereich der klassischen Physik (klassischer Grenzfall). — Dies ist das einzige Kapitel des Buches, das sich direkt an den historischen Abläufen orientiert.

1.1 Versagen der klassischen Physik – Ausblick

In der Behandlung der klassischen Physik¹ sind wir in einigen Bereichen auf Situationen gestoßen, für welche die klassischen Vorstellungen vollständig versagen. Wir erinnern im Folgenden an einige dieser Situationen.

• Leitfähigkeit von Metallen

Die elektrische Leitung in Metallen erfolgt durch freie Elektronen, die in einem äußeren **E**-Feld angetrieben (beschleunigt) werden. Die Elektronen streuen inelastisch an den positiven Ionen des (ortsfesten) Metallgitters. Um die gemessenen Leitfähigkeiten der Metalle erklären zu können, muss man annehmen, dass die mittlere freie Weglänge der Elektronen viel größer ist als der Abstand der sich praktisch berührenden Ionen im Metall [KP-2-10.2]: Die Wirkungsquerschnitte für die Streuung Elektron–Ion sind also klassisch viel zu groß.

¹ H.J. Leisi, Klassische Physik, Band 2: Elektromagnetismus und Wärme, Birkhäuser Verlag (1998); Verweise darauf werden wie folgt zitiert [KP-2-Abschnittnummer].

2 1 Die frühen Entdeckungen

• Spezifische Wärmen

Die spezifischen Wärmen von Gasen und einfachen Festkörpern sind klassisch durch die Äquipartition der Energie bestimmt [KP-2-14.3]. Daraus resultieren spezifische Wärmen, die temperaturunabhängig sind; ihre Werte sind durch die Zahl der Freiheitsgrade der Moleküle oder Atome festgelegt. Experimentell beobachtet man aber starke Temperaturabhängigkeiten der spezifischen Wärmen, die wir als "Einfrieren von Freiheitsgraden" bei tiefen Temperaturen beschreiben können [vgl. KP-2-14.5] – aber klassisch nicht verstehen.

• Hall-Effekt

Das Vorzeichen der Hall-Spannung erlaubt es, das Vorzeichen der freien Ladungsträger, die im elektrischen Leiter für den Strom verantwortlich sind, zu bestimmen [KP-2-10.8]. Auf diese Weise findet man, dass in Metallen die negativ geladenen Elektronen für die Stromleitung verantwortlich sind. Dabei gibt es aber zwei Ausnahmen: Aluminium und Indium; in diesen Metallen scheinen positive Ladungsträger die Stromleitung zu bewirken. Dies ist ein quantenmechanisches Phänomen – positive, freie Ladungsträger gibt es in keinem Metall.

• Ferromagnetismus

Eine fundamentale Eigenschaft der Ferromagnetika ist die spontane Magnetisierung, d.h. die Bildung von sog. Weißschen Bezirken, in welchen sich die magnetischen Momente der Atomgruppen vollständig ausrichten, auch in Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes [KP-2-11.3.7]. Die spontane Magnetisierung kann man klassisch nicht verstehen.

Wir stellen uns die Frage: Haben alle diese scheinbar völlig unabhängigen Phänomene irgendeine Gemeinsamkeit, die darauf hinweisen könnte, in welchem Bereich die klassische Physik zu erneuern oder zu verbessern ist? Es gibt eine Gemeinsamkeit: Alle Phänomene betreffen *atomare* Prozesse. Wir schließen daraus:

Die klassische Physik bricht innerhalb des atomaren Bereichs zusammen².

Dies bedeutet, dass der Ansatzpunkt für die neue Physik im atomaren und subatomaren Bereich zu suchen ist. Es bedeutet aber keineswegs, dass die Quantenphänomene auf diesen Bereich beschränkt sind. Wie wir später sehen werden, liefert die Quantenphysik die Erklärung für eine ganze Reihe von makroskopischen Eigenschaften und Erscheinungen: Stabilität der Materie, Supraleitung, Suprafluidität, Energieerzeugung in den Sternen etc.

Die Entdeckung des Strahlungsgesetzes und insbesondere dessen Erklärung durch *Max Planck* (Abschn. 1.2) kann man – vereinfacht gesagt – als die "*Entdeckung*" der Quantenphysik bezeichnen. Genauer genommen war

 $^{^2}$ Diese Einsicht wurde erst nach längerer Zeit gewonnen, nachdem mehrere Versuche, die Phänomene mit unterschiedlichen klassischen Modellen zu erklären, gescheitert waren.

dieses Ereignis eigentlich erst "der Beginn der Geburtsphase" der Quantenphysik, die dann ihrerseits fast 30 Jahre gedauert hat. Die Geburtsphase ist im Wesentlichen zum Abschluss gekommen durch die ersten Arbeiten von W. Heisenberg zur Matrizenmechanik (1925), von E. Schrödinger zur Wellenmechanik (1926) und von P.A.M. Dirac zur Quantenelektrodynamik (1927)³. Grundlegende Probleme zur Quantentheorie werden heute noch untersucht.

Die nächsten drei Abschnitte richten sich vorwiegend an historisch Interessierte; sie stehen unter dem Motto: *Wie entsteht neue Physik?*

1.2 Das Plancksche Strahlungsgesetz (1900)

Wir betrachten einen Körper im thermischen Gleichgewicht mit der Strahlung (Abb. 1.1). Wir stellen uns die Atome als harmonische Oszillatoren vor (klassisches Modell); die Atomhülle schwingt beispielsweise als Ganzes relativ zum viel schwereren Atomkern [siehe KP-2-12.4]. Zwischen dem materiellen System der Oszillatoren und dem elektromagnetischen Strahlungsfeld wird Energie ausgetauscht. Für das abgeschlossene Gesamtsystem (kein Energie-austausch gegen außen) stellt sich nach genügend langer Zeit ein thermodynamischer Gleichgewichtszustand ein, der durch eine Temperatur T charakterisiert ist.



Abb. 1.1. Körper im thermischen Gleichgewicht mit der Strahlung

 $^{^3}$ Für Einzelheiten zur geschichtlichen Entwicklung der Quantenphysik verweisen wir auf

M. Jammer, The Conceptual Development of Quantum Mechanics, The History of Modern Physics, 1800-1950, Volume 12, American Institute of Physics (1989);

A. Pais, "Raffiniert ist der Herrgott…" Albert Einstein – Eine wissenschaftliche Biographie, Vieweg (1986).

Wir fragen nach der mittleren spektralen Energiedichte $\rho(\nu, T)$ des Strahlungsfeldes (Energie pro Volumeneinheit und Frequenzeinheit). Die Funktion $\rho(\nu, T)$ wird als *Strahlungsgesetz* bezeichnet; sie bestimmt die Strahlungsemission eines schwarzen Körpers und kann durch Messung der Hohlraumstrahlung (im Prinzip) experimentell bestimmt werden. Die spektrale Energiedichte ist eine universelle Funktion von ν und T, d.h. unabhängig von den Eigenschaften des Körpers. (Dies folgt aus dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik.)

In einer ersten Phase hat *Max Planck* das Strahlungsgesetz (siehe Gleichung 1.1) entdeckt. Entscheidend für diese Phase waren die experimentellen Fortschritte in der Erzeugung und Messung elektromagnetischer Strahlung im Infrarotbereich, die hauptsächlich durch die beiden experimentellen Gruppen von O. Lummer und E. Pringsheim sowie H. Rubens und F. Kurlbaum erzielt wurden. (Beide Gruppen wirkten an der Physikalisch-Technischen Reichsanstalt Berlin, dem Ort wo Planck damals Professor war.) Am Sonntag, den 7. Oktober 1900 (nachmittags) besuchte Rubens mit Gattin die Familie Planck. Bei der Gelegenheit erwähnte Rubens ihr jüngstes experimentelles Resultat, nämlich den Befund, dass die spektrale Energiedichte bei kleinen Frequenzen proportional zu T sei. Planck machte sich unverzüglich an die Arbeit und fand noch am gleichen Abend, dass die Messresultate von Rubens und Mitarbeiter durch die Formel

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$
(1.1)

beschrieben werden⁴. Darin ist h ein Parameter, c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum und k die Boltzmannsche Konstante. (Das Hochfrequenzverhalten der Energiedichte war damals bekannt.)

Hätte sich *Planck* am Abend des 7. Oktobers zur Ruhe gesetzt, er wäre als Entdecker des nach ihm benannten Strahlungsgesetzes in die Geschichte eingegangen. Er machte aber weiter, denn er wollte das Gesetz *verstehen* – und dadurch wurde er zum Entdecker der Quantenphysik!

In einer zweiten Phase, die bis zum 14. Dezember 1900 dauerte, hat *Planck* das Strahlungsgesetz (1.1) *erklärt*. Wir wollen diese interessante Phase, die in drei Schritten erfolgte, hier kurz skizzieren.

1. Elektromagnetischer Schritt:

Planck berechnet zuerst die Energie eines schwach gedämpften, eindimensionalen harmonischen Oszillators der Eigenfrequenz ν im harmonischen elektromagnetischen Feld. Er ersetzt dann das harmonische Feld durch eine inkohärente, isotrope Überlagerung von harmonischen Feldern variabler Frequenz und berechnet die Gleichgewichtsenergie U des Oszillators, wobei die Felder entsprechend der spek-

 $^{^4}$ Dies ist durch eine Postkarte an Rubens dokumentiert, die Planck noch am gleichen Abend abschickte.

tralen Energiedichte ρ gewichtet werden. Als Resultat findet er die Beziehung⁵

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} U(\nu, T) \quad , \tag{1.2}$$

wobei U die mittlere Energie des Oszillators ist und ν seine Eigenfrequenz. (Das Resultat (1.2) hatte *Planck* kurz vor dem 7. Oktober erhalten.)

An dieser Stelle würde man klassisch folgendermaßen argumentieren: Wir erinnern uns an die Äquipartitionssätze der Energie [KP-2-14.3]. Für den eindimensionalen harmonischen Oszillator ist die mittlere Energie

$$U = kT \quad . \tag{1.3}$$

Würden wir aber (1.3) in (1.2) einsetzen und die spektrale Dichte über alle Frequenzen integrieren, dann wäre die Energiedichte des Strahlungsfeldes Unendlich – was nicht sein darf ("Ultraviolett-Katastrophe").

Durch Kombination von (1.2) mit (1.1) findet *Planck* den völlig anderen Ausdruck

$$U(\nu, T) = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$
(1.4)

für die mittlere Energie des Oszillators. Was bedeutet (1.4)?

2. Thermodynamischer Schritt:

Ausgehend von (1.4) berechnet *Planck* die *Entropie S des Oszillators*. Die Entropieänderung ist

$$dS = dU/T \quad , \tag{1.5}$$

wobei dU die Energieänderung des Oszillators bezeichnet. Da (1.4) eine Relation zwischen U und T darstellt (für feste Eigenfrequenz ν), können wir T = T(U) aus (1.4) ausrechnen und in (1.5) einsetzen. Man findet

$$1/T(U) = \frac{k}{h\nu} \ln\left(\frac{h\nu + U}{U}\right),\tag{1.6}$$

sodass mit (1.5)

$$dS = \frac{k}{h\nu} \left[\ln(h\nu + U) - \ln U \right] dU \quad . \tag{1.7}$$

Wir integrieren (1.7) bezüglich U und erhalten

$$S = \frac{k}{h\nu} \left[(h\nu + U) \ln(h\nu + U) - (h\nu + U) - U \ln U + U \right]$$

= $k \left[\left(1 + \frac{U}{h\nu} \right) \ln(h\nu + U) - 1 - \frac{U}{h\nu} \ln U \right].$ (1.8)

Bis auf eine unbestimmte additive Konstante können wir nach (1.8) die Entropie des Oszillators schreiben als

$$S = k \left[\left(1 + \frac{U}{h\nu} \right) \ln \left(1 + \frac{U}{h\nu} \right) - \frac{U}{h\nu} \ln \left(\frac{U}{h\nu} \right) \right].$$
(1.9)

Die Entropie muss also diese Form haben.

⁵ Herleitung in *M. Jammer (Fußnote 3)*, Appendix A.

6 1 Die frühen Entdeckungen

3. Statistischer Schritt:

Nun versucht *Planck*, mit Hilfe von geeigneten Postulaten die Entropie (1.9) herzuleiten. Er betrachtet $N \ (\gg 1)$ lineare harmonische Oszillatoren der (festen) Eigenfrequenz ν im thermischen Gleichgewicht mit dem Strahlungsfeld und berechnet die Entropie S_N mit Hilfe des Boltzmannschen Prinzips [KP-2-16.5]

$$S_N = k \ln W_N \quad , \tag{1.10}$$

wobe
i W_{N} die thermodynamische Wahrscheinlichkeit ist. Dazu braucht er die folgenden beiden Postulate:

• Das Quantenpostulat

$$U_N = P\varepsilon \tag{1.11}$$

 $(P \text{ ganze Zahl} \gg 1)$ besagt, dass die innere Energie U_N des Systems der Oszillatoren in Energieportionen ε auftritt.

• Das statistische Postulat gibt eine Vorschrift zur Berechnung von W_N in (1.10) und besagt, dass W_N die Zahl der Möglichkeiten ist, P ununterscheidbare Energiebeträge auf N unterscheidbare Oszillatoren zu verteilen⁶. Dies bedeutet, dass W_N durch den allgemeinen Ausdruck

$$W_N = \frac{(N-1+P)!}{P!(N-1)!}$$
(1.12)

gegeben ist. Für N = 2 und P = 3 beispielsweise folgt aus (1.12) $W_2 = 4$. Die 4 Möglichkeiten, die Energie $U = 3\varepsilon$ auf die beiden Oszillatoren 1 und 2 zu verteilen, sind in Abb. 1.2 dargestellt.



Abb. 1.2. Statistisches Postulat mit zwei Oszillatoren (1,2) und drei Energiebeträgen: thermodynamische Wahrscheinlichkeit $W_2 = 4$

Zur Berechnung der Entropie (1.10) nutzen wir aus, dass N und P große Zahlen sind. Dies erlaubt es, die Fakultäten in (1.12) mit Hilfe der Stirlingschen Formel

$$n! \cong (2\pi n)^{1/2} n^n e^{-n} \quad (n \gg 1)$$
(1.13)

analytisch auszudrücken. Aus (1.12) folgt

$$\ln W_N = \ln (N - 1 + P)! - \ln P! - \ln (N - 1)! \tag{1.14}$$

⁶ Mit diesem Postulat nimmt *Planck* die Bose-Einstein-Statistik um ein Vierteljahrhundert vorweg.

Wir verwenden (1.13) und erhalten

$$\ln W_N = \ln \sqrt{2\pi (N - 1 + P)} + \ln (N - 1 + P)^{N - 1 + P} - (N - 1 + P) - \ln \sqrt{2\pi P} - \ln P^P + P - \ln \sqrt{2\pi (N - 1)} - \ln (N - 1)^{N - 1} + N - 1 = \ln \sqrt{2\pi (N - 1 + P)} - \ln \sqrt{2\pi P} - \ln \sqrt{2\pi (N - 1)} + (N - 1 + P) \ln (N - 1 + P) - P \ln P - (N - 1) \ln (N - 1).$$
(1.15)

Mit $U_N = NU$ und (1.11) folgt

$$P = N \frac{U}{\varepsilon} \quad . \tag{1.16}$$

Wegen $N, P \gg 1$ können wir die Eins in (1.15) überall weglassen. Wir setzen (1.16) in (1.15) ein und erhalten

$$\ln W_N = \frac{1}{2} \left[\ln(2\pi N) + \ln\left(1 - \frac{U}{\varepsilon}\right) - \ln(2\pi N) - \ln\frac{U}{\varepsilon} - \ln(2\pi N) \right] + N \left[\left(1 + \frac{U}{\varepsilon}\right) \ln\left(1 + \frac{U}{\varepsilon}\right) + \left(1 + \frac{U}{\varepsilon}\right) \ln N - \frac{U}{\varepsilon} \ln\frac{U}{\varepsilon} - \frac{U}{\varepsilon} \ln N - \ln N \right] = \frac{1}{2} \left[\ln\left(1 - \frac{U}{\varepsilon}\right) - \ln\frac{U}{\varepsilon} - \ln(2\pi N) \right] + N \left[\left(1 + \frac{U}{\varepsilon}\right) \ln\left(1 + \frac{U}{\varepsilon}\right) - \frac{U}{\varepsilon} \ln\frac{U}{\varepsilon} \right].$$
(1.17)

Die erste Zeile in (1.17) ist für $N \gg 1$ vernachlässigbar gegenüber der zweiten Zeile. Damit folgt aus (1.17) mit (1.10) und $S_N = NS$

$$S = k \left[\left(1 + \frac{U}{\varepsilon} \right) \ln \left(1 + \frac{U}{\varepsilon} \right) - \frac{U}{\varepsilon} \ln \left(\frac{U}{\varepsilon} \right) \right].$$
(1.18)

Die Entropiefunktion (1.18) ist *identisch* mit der Funktion (1.9), falls wir die Energieportion ε identifizieren mit

$$\varepsilon = h\nu \quad , \tag{1.19}$$

wobe
ihder Parameter des Strahlungsgesetzes ist (Plancksche Konstante) und
 ν die (klassische) Eigenfrequenz des Oszillators.

Auf diese Weise hat *Planck* gezeigt, dass die beiden Postulate in der Lage sind, die Form (1.4) der mittleren Energie des Oszillators – und damit das Strahlungsgesetz (1.1) – zu erklären. Die Relation (1.19) bedeutet die *Quantisierung der Energie* des materiellen harmonischen Oszillators; dies war der Anfang der Quantenphysik.

Aus der Sicht der damaligen Physik waren die Schritte 1 und 2 unanfechtbar; der 3. Schritt dagegen war ein "Kraftakt" ohnegleichen. *Planck* äußerte sich selbst dazu (1931) und bezeichnete sein Tun als

"...Akt der Verzweiflung..., dass ich unter allen Umständen, koste es was es wolle, ein positives Resultat herbeiführen müsste."

8 1 Die frühen Entdeckungen

In Wirklichkeit waren es *zwei* Akte der Verzweiflung, das Quantenpostulat *und* das statistische Postulat; beide Elemente waren etwas völlig Neues. Wir zitieren dazu A. Pais (1985):

"Daher bestand die einzige Rechtfertigung für die beiden Verzweiflungsschritte darin, dass sie ihm das gewünschte Resultat lieferten. Seine Beweisführung war verrückt, doch hatte diese Verrücktheit jene göttliche Qualität, die nur die größten Persönlichkeiten in Zeiten des Übergangs der Wissenschaft geben können. Dadurch wurde *Planck*, der von Natur aus konservativ eingestellt war, in die Rolle eines Revolutionärs wider Willen gedrängt. Tief im Denken und den Vorurteilen des 19. Jahrhunderts verwurzelt, vollführte er den ersten gedanklichen Bruch, der die Physik des 20. Jahrhunderts so völlig anders erscheinen lässt als jene der vergangenen Zeit. Obwohl es seit dem Dezember 1900 andere wichtige Neuheiten in der Physik gegeben hat, hat die Welt einen Kopf wie *Planck* nie mehr hervorgebracht."

1.3 Der Photoeffekt (Einstein 1905)

Wir führen den Photoeffekt zunächst im Experiment vor (siehe Abb. 1.3).

Demonstrationsexperiment 1⁷: Eine Quecksilberdampflampe erzeugt Spektrallinien $\nu = 5.18 \times 10^{14}$ Hz (gelb), $\nu = 5.48 \times 10^{14}$ Hz (grün), $\nu = 6.10 \times 10^{14}$ Hz (blau) und $\nu = 6.88 \times 10^{14}$ Hz (violett). Mittels Prismenspektrograph wird eine einzelne Spektrallinie ausgefiltert und auf eine Metallplatte geschickt, die sich in einem evakuierten Gefäß befindet. Die Metallplatte (Kathode) ist mit einer zweiten Metallplatte (Kollektor) durch ein digitales Voltmeter (im Prinzip ein Elektrometer) verbunden (Abb. 1.3).

Bei der Einstrahlung von monochromatischem Licht steigt die Spannung am Voltmeter kontinuierlich an und erreicht schließlich einen stabilen Grenzwert $V_{max}(\nu)$. Wir stellen die Behauptung auf, dass

$$E(\nu) = e \cdot V_{max}(\nu) \tag{1.20}$$

die maximale kinetische Energie der durch die Strahlung aus der Kathode "herausgeschlagenen" *Photoelektronen* ist (e Elementarladung).

Begründung: Die Photoelektronen verlassen die bestrahlte Kathode (diese lädt sich positiv auf) und werden auf dem Kollektor aufgefangen. Zwischen den beiden Metallplatten bildet sich ein die Elektronen bremsendes **E**-Feld aus, das anwächst – so lange, bis die potentielle Energiedifferenz zwischen den Platten gleich der maximalen anfänglichen kinetischen Energie des Photoelektrons ist. Der Ausdruck (1.20) entspricht also der größtmöglichen kinetischen Energie des Photoelektrons an der Kathode.

⁷ Die Nummern der Demonstrationsexperimente bezeichnen die entsprechenden Experimente der CD-ROM.



Abb. 1.3. Kathode und Kollektorplatte zur Messung des Photoeffekts

Wir tragen die vier nacheinander gemessenen Werte $E(\nu)$ (in der Energieeinheit eV) in Abb. 1.4 als Funktion der Frequenz ν auf und finden einen *linearen* Zusammenhang

$$E(\nu) = h\nu - P \tag{1.21}$$

In (1.21) ist h die Steigung der Geraden und P der Achsenabschnitt. Die Relation (1.21) ist unabhängig von der Intensität des eingestrahlten Lichts. Wiederholen wir nämlich das Demonstrationsexperiment mit reduzierter Intensität der Spektrallinien, dann steigt die Spannung am Voltmeter zwar langsamer an, aber der Endwert $V_{max}(\nu)$ ist derselbe. Man kann weiterhin experimentell zeigen, dass die Steigung der Kurve in Abb. 1.4 unabhängig vom Kathodenmaterial ist; unterschiedliches Kathodenmaterial resultiert in einer Parallelverschiebung der Kurve.

Albert Einstein hat 1905 in seiner "März-Arbeit" mit dem Titel "Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt"⁸ insbesondere monochromatische Strahlung kleiner Dichte betrachtet. Er berechnet die Entropie der Strahlung im thermischen Gleichgewicht. Daraus bestimmt er die Entropieänderung, die einer Volumenänderung des Hohlraums entspricht und vergleicht das Resultat mit der Entropieänderung eines idealen Gases, falls dieses dasselbe Volumen ausfüllen würde. Die

⁸ A. Einstein, Annalen der Physik **17** (1905) 132.



Abb. 1.4. Maximale Energie des Photoelektrons als Funktion der Frequenz ν des Lichts

beiden Entropieausdrücke haben *identische mathematische Struktur*⁹. Daraus gewinnt *Einstein* seine

Lichtquantenhypothese: "Monochromatische Strahlung von geringer Dichte (innerhalb des Gültigkeitsbereiches der Wienschen Strahlungsformel) verhält sich in wärmetheoretischer Beziehung so, wie wenn sie aus voneinander unabhängigen Energiequanten der Größe $h\nu$ bestünde."

Einstein relativiert damit die allgemeine Gültigkeit der Maxwellschen Elektrodynamik, die auf einer Beschreibung der Felder durch *kontinuierliche* Funktionen beruht und bereits damals eine überwältigende Bestätigung durch ihre Erklärung unterschiedlichster Phänomene gefunden hatte. Dazu äußert er sich selbst in der Einleitung der zitierten Arbeit folgendermaßen:

"Die mit kontinuierlichen Raumfunktionen operierende Undulationstheorie des Lichtes hat sich zur Darstellung der rein optischen Phänomene vortrefflich bewährt und wird wohl nie durch eine andere Theorie ersetzt werden. Es ist jedoch im Auge zu behalten, dass sich die optischen Betrachtungen auf *zeitliche Mittelwerte*, nicht aber auf Momentanwerte beziehen, und es ist trotz der vollständigen Bestätigung

⁹ Für Einzelheiten der "März-Arbeit" verweisen wir auf die klare Diskussion in A. Pais (Fußnote 3), S. 368 ff.

der Theorie der Beugung, Reflexion, Brechung, Dispersion etc. durch das Experiment wohl denkbar, dass die mit kontinuierlichen Raumfunktionen operierende Theorie des Lichtes zu Widersprüchen mit der Erfahrung führt, wenn man sie auf die Erscheinungen der *Lichterzeugung* und *Lichtverwandlung* anwendet."

Nach der Formulierung der Lichtquantenhypothese fährt Einstein fort:

"Wenn sich nun monochromatische Strahlung (von hinreichend kleiner Dichte) bezüglich der Abhängigkeit der Entropie vom Volumen wie ein diskontinuierliches Medium verhält, welches aus Energiequanten von der Größe $h\nu$ besteht, so liegt es nahe, zu untersuchen, ob auch die Gesetze zur Erzeugung und Verwandlung des Lichts so beschaffen sind, wie wenn das Licht aus derartigen Energiequanten bestünde."

Diese Aussage wird oft als *heuristisches Prinzip* bezeichnet. Die Energiequanten $h\nu$ nennen wir heute allgemein *Photonen*.

Einstein zieht dann das heuristische Prinzip insbesondere zur **Erklärung** des Photoeffekts heran und schlägt als einfaches Bild vor:

Ein Lichtquant gibt seine gesamte Energie an ein Elektron ab, und der Energieübertrag durch ein Lichtquant ist vom Vorhandensein anderer Lichtquanten unabhängig¹⁰.

Falls ein solches Elektron – wir kehren zurück zum Demonstrationsexperiment der Abb. 1.3 – auf seinem Weg zur Kathodenoberfläche keine Energie verliert, ist seine Energie außerhalb der Oberfläche gegeben durch

$$h\nu - P$$

,

wobei P die Austrittsarbeit darstellt; in diesem Fall ist die kinetische Energie des Elektrons gegeben durch (1.21). Damit ist auch erklärt, dass die maximale kinetische Energie des Elektrons unabhängig von der Intensität der Spektrallinie ist und ebenso die Abhängigkeit vom Kathodenmaterial.

Die präzisen Experimente von R.A. Millikan (1916) führten schließlich zur exakten Bestätigung der Einsteinschen Relation (1.21) – obschon der Experimentator selbst lange Zeit an der Richtigkeit der Relation zweifelte!

Aus den Daten des Demonstrationsexperiments der Abb. 1.3 können wir eine **Bestimmung der Planckschen Konstante** h vornehmen. Aus der Steigung der Kurve in Abb. 1.4 folgt mit (1.21)

$$h = \frac{\Delta E}{\Delta \nu} = \frac{e \cdot \Delta V_{max}}{\Delta \nu} = \frac{1.60 \times 10^{-19} \times 0.87}{2.18 \times 10^{14}} = 6.4 \times 10^{-34} \,\mathrm{J\,s.}$$
(1.22)

¹⁰ Die Impulserhaltung ist dadurch gewährleistet, dass der Impuls des Photons vom Atom oder Festkörper aufgenommen wird.

12 1 Die frühen Entdeckungen

(Literaturwert: $h = 6.63 \times 10^{-34} \,\mathrm{J\,s}$)

Der Wert von h ist identisch mit demjenigen des Strahlungsgesetzes! Im Folgenden bezeichnen wir sowohl h als auch

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} = 1.054 \ 571 \ 596(82) \times 10^{-34} \,\mathrm{J\,s}$$
 (1.23)

als *Plancksche Konstante*. Entsprechend schreiben wir die quantisierte Energie des Oszillators (1.19) oder des Photons in (1.21) in der Regel als

$$E = \hbar \omega \quad . \tag{1.24}$$

1.4 Das Bohrsche Atommodell (1913)

Hinsichtlich des Verhaltens der Atome gibt es eine Reihe von Merkwürdigkeiten.

- Die meisten Atome (von Be bis Hg) sind fast gleich groß; die Atomradien unterscheiden sich vom mittleren Radius $1.17 \text{ Å} (1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m})$ um höchstens ca. 30 % (siehe Tabelle 1.1).
- Die Atome fester Kernladung (eZ) sind alle exakt gleich groß!

_					
Be	1.06	Р	1.10	Br	1.11
В	0.88	\mathbf{S}	1.04	Ag	1.52
\mathbf{C}	0.77	Cl	0.99	Cd	1.48
Ν	0.70	$\mathbf{C}\mathbf{u}$	1.35	In	1.44
Ο	0.66	Zn	1.31	Sn	1.40
F	0.64	Ga	1.26	\mathbf{Sb}	1.36
Mg	1.40	Ge	1.22	Te	1.32
Al	1.26	As	1.18	J	1.28
Si	1.17	Se	1.14	Hg	1.48

Tabelle 1.1. Atomradien in Ångstrøm-Einheiten¹¹

Klassisch sind diese Eigenschaften nicht verständlich. Die Streuexperimente mit α -Teilchen von *Ernest Rutherford* und seinen Mitarbeitern (1906–1913) hatten gezeigt, dass die Materie hauptsächlich aus "Zwischenraum" besteht; die Masse beispielsweise ist zur Hauptsache auf die Atomkerne konzentriert, die einen winzigen Teil des Atomvolumens einnehmen. Der Protonenradius des Wasserstoffatoms beispielsweise beträgt $\approx 0.8 \times 10^{-15}$ m (= 0.8 fm), bei einem Atomradius von etwa 10^{-10} m. In einem klassischen *Planetenbahnmodell* würde das negativ geladene Elektron das positive (ruhende) Proton umkreisen (siehe Abb. 1.5). (Das Proton ist 1836 mal schwerer als das Elektron.)

¹¹ C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, John Wiley & Sons (1971), p. 129.

Weil das Elektron *beschleunigt* ist, strahlt es elektromagnetische Wellen aus [siehe z.B. KP-2-12]. Dadurch verliert das Atom Energie, die es dem umlaufenden Elektron entziehen muss – bis dieses schließlich ins Proton hineinfällt (Abb. 1.5). Dies müsste nach der klassischen Theorie in einer Zeit von etwa 10^{-10} s geschehen! Nach den Gesetzen der klassischen Physik sind also die Atome nicht stabil; wir verstehen die Stabilität der Atome, wie sie etwa in der Tabelle 1.1 zum Ausdruck kommt, nicht.



Abb. 1.5. Klassisches Planetenbahnmodell des Wasserstoffatoms

Ein weiteres unverstandenes Phänomen waren die Spektrallinien der Atome eines Gases. Werden Atome angeregt, z.B. durch Stöße mit beschleunigten Elektronen, dann emittieren sie eine Reihe von "scharfen" Spektrallinien, d.h. (nahezu monochromatische) elektromagnetische Strahlung ganz bestimmter Frequenzen. Abb. 1.6 beispielsweise zeigt die mit einem Spektrographen gemessenen Wellenlängen der Spektrallinien von Quecksilberdampf. Nach den Gesetzen der klassischen Elektrodynamik ist die Beziehung zwischen Wellenlänge λ und Frequenz ν gegeben durch

$$\underline{\lambda \cdot \nu = c} \quad , \tag{1.25}$$

wobe
i $c=2.997~924~58\times 10^8\,{\rm ms}^{-1}$ die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum ist. Die Frequenzspektren sind im Allgemeinen sehr komplex und vollkommen verschieden für verschiedene Atome.

Das einfachste Spektrum, nämlich dasjenige des *Wasserstoffatoms*, ist in Abb. 1.7 dargestellt (wiederum geordnet nach abnehmenden Wellenlängen). Für die vier damals bekannten, im sichtbaren Bereich emittierten Wasserstoff-



Abb. 1.6. Wellenlängen der Spektrallinien von Quecksilberdampf (in Ångstrøm-Einheiten) [H.G. Kuhn, Atomic Spectra, Longmans (1969), plate 7]



Abb. 1.7. Spektrallinien von Wasserstoff (nach abnehmenden Wellenlängen geordnet) [*H.G. Kuhn*, Atomic Spectra, Longmans (1969), plate 1]

linien hat Johann Jakob Balmer (Lehrer aus Basel) 1885 folgende empirische Formel für die Wellenlängen (in Å) gefunden:

$$\lambda_n = 3645.6 \frac{n^2}{n^2 - 4}$$
 , $n = 3, 4, 5, 6.$ (1.26)

Es ist nützlich (für späteren Gebrauch), die Relation (1.26) in den Frequenzen der Spektrallinien auszudrücken:

$$\nu_n = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) , \quad n = 3, 4, 5, \dots$$
(1.27)

wobei R eine Konstante ist. (Wir haben (1.25) verwendet.) Die Balmer-Formel (1.27) beschreibt das Wasserstoffspektrum auch im Ultraviolettbereich (n = 7, 8, ...).

Niels Bohr gelang es (1913), einen großen Teil der Probleme im Verhalten der Atome durch sein Atommodell zu klären.

Als Ausgangspunkt betrachtet er ein klassisches Elektron auf einer Kreisbahn (Radius r), in dessen Zentrum das massive (raumfeste) Proton sitzt (Abb. 1.8). Das Elektron erfährt die Coulomb-Kraft $\mathbf{F}_{\mathbf{C}}$ [KP-2-9.1]. Die Newtonsche Bewegungsgleichung in radialer Richtung liefert die Beziehung¹²

$$\frac{mv^2}{r} = F_C = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \quad . \tag{1.28}$$

Wir multiplizieren (1.28) mit r und erhalten

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = mv^2 = -U \quad , \tag{1.29}$$

denn die potentielle (elektrostatische) Energie U des Elektrons an der Stelle

¹² H.J. Leisi, Klassische Physik, Band 1: Mechanik, Birkhäuser Verlag (1996), Abschn. 1.1; Referenz [KP-1-1.1].



Abb. 1.8. Bohrsches Atommodell für Wasserstoff

r ist

$$U(r) = \int_{r}^{\infty} F_{C}(r') dr' = \frac{e^{2}}{4\pi\varepsilon_{0}} \int_{r}^{\infty} \frac{dr'}{r'^{2}} = -\frac{e^{2}}{4\pi\varepsilon_{0}} \frac{1}{r} \quad .$$
(1.30)

Mit (1.29) folgt für die *totale* Energie E des Elektrons (kinetische plus potentielle Energie)

$$E = \frac{m}{2}v^2 + U = -\frac{m}{2}v^2 \quad . \tag{1.31}$$

Nun wollen wir den Bahnradius r und die Energie E durch den Drehimpuls

$$|\mathbf{L}| = L = mvr \tag{1.32}$$

des Elektrons bezüglich der Position des Protons ausdrücken. Wir multiplizieren Gleichung (1.28) mit mr^3 und lösen nach r auf:

$$r = \frac{4\pi\varepsilon_0}{me^2}L^2 \quad . \tag{1.33}$$

Aus (1.31) folgt mit (1.32) und (1.33)

$$E = -\frac{L^2}{2mr^2} = -\frac{m}{2} \frac{e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2} \frac{1}{L^2} \quad . \tag{1.34}$$

Die Ausdrücke (1.33) und (1.34) zeigen, dass ein fester Wert des Drehimpulses sowohl Bahnradius als auch Energie des Elektrons festlegt. Wir führen nun als *Hypothese* (hier verlassen wir die klassische Physik) die **Quantisierung des Drehimpulses** des Elektrons¹³ ein:

$$L_n = n \cdot \hbar \quad , \tag{1.35}$$

wobei n = 1, 2, 3, ... eine positive ganze Zahl sein soll; n heisst Hauptquantenzahl. Aus (1.34) folgt mit (1.35), dass die totale Energie E quanti-

¹³ N. Bohr hat in seiner historischen Arbeit von 1913 einen anderen Weg gewählt; wir verweisen diesbezüglich auf die Darstellung im Buch von M. Jammer (Fuβnote 3).

16 1 Die frühen Entdeckungen

siert ist:

$$E = E_n = -\frac{m}{2} \frac{e^2}{(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad . \tag{1.36}$$

Für jeden Energiezustand E_n hat auch der Bahnradius (nach (1.33)) einen festen Wert

$$r = r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2m}\hbar^2 n^2 \quad . \tag{1.37}$$

Es ist hier zweckmäßig, eine neue, dimensionslose Größe einzuführen, die proportional zur Stärke der Coulomb-Kraft ist und die physikalischen Konstanten \hbar und c enthält. Sowohl $e^2/(4\pi\varepsilon_0)$ als auch $\hbar c$ haben die Dimension "Energie×Länge". Die dimensionslose Größe – genannt *Feinstrukturkonstante* – ist also

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \cdot \hbar c} \cong \frac{1}{137} \quad . \tag{1.38}$$

Die dimensionslose Feinstrukturkonstante α charakterisiert die Stärke der elektromagnetischen Wechselwirkung; sie ist *unabhängig vom Maßsystem* und eignet sich zur Darstellung aller elektromagnetischen, atomaren Resultate.

Die Energie (1.36) des Wasserstoffatoms lässt sich mit (1.38) schreiben als

$$E_n = -R_\infty \frac{1}{n^2} \quad , \tag{1.39}$$

wobei

$$R_{\infty} = \frac{1}{2}mc^2 \cdot \alpha^2 = 13.61 \text{eV}$$
(1.40)

die Rydberg-Energie ist. Die nach (1.39) möglichen Energiezustände sind in Abb. 1.9 dargestellt. Der Bahnradius (1.37) lässt sich mit (1.38) schreiben als

$$r_n = a_0 n^2 \quad , \tag{1.41}$$

wobei

$$a_0 = \frac{\hbar}{mc} \frac{1}{\alpha} \cong 0.53 \times 10^{-10} \mathrm{m}$$
 (1.42)

der Bohrsche Radius ist. Der Bohrsche Radius ist der Bahnradius des Elektrons im Grundzustand (n = 1); er ist nach (1.41) der kleinste Bahnradius des Wasserstoffatoms.

Damit haben wir eine Erklärung gefunden für die Größe der Atome (mindestens für das Wasserstoffatom). Dies ist ein erster Schritt in Richtung "Stabilität der Materie".

Bis jetzt wurde die Strahlung (d.h. die Emission der Spektrallinien) nicht betrachtet. In der bisherigen Form beschreibt das Bohrsche Atommodell die möglichen Energiezustände des Systems, die sog. **stationären Zustände**; *Bohr* nannte sie die "Haltestellen" ("Holdepladser") (des Elektrons). Zur Erklärung der *Spektrallinien* und verwandter Phänomene führte *Bohr* die folgenden (zusätzlichen) **Postulate** ein (siehe Abb. 1.10):



Abb. 1.9. Energiezustände von Wasserstoff (*n*: Hauptquantenzahl)



Abb. 1.10. Emission (E) und Absorption (A) eines Photons zwischen Atomzuständen (n, n')

1. Ein Elektron kann zwischen den stationären Zuständen (n, n') springen unter *Emission* (E) bzw. *Absorption* (A) eines Photons (Frequenz $\omega = 2\pi\nu$) der Energie

$$\hbar\omega = E_{n'} - E_n \qquad (n > n') \quad . \tag{1.43}$$

Eine Anregung (A) durch *inelastische Stöße* erfolgt in diskreten Energiequanten $(E_{n'} - E_n)$.

2. Der Grundzustand (für Wasserstoff n = 1) ist absolut stabil; der Grundzustand strahlt nicht.

Die Zusatzpostulate von *Bohr* sowie die Existenz stationärer Zustände gelten für *alle Atome*. Die Anregung (A) durch *Photonen* (Abb. 1.10) ist die zeitliche Umkehr der Emission.

Damit ist das Phänomen der Spektrallinien (im Prinzip) erklärt. Die Frequenzen der Spektrallinien sind über die Relation (1.43) mit den Energien der stationären Zustände des Atoms verknüpft. Mit (1.39) erhalten wir aus (1.43) die möglichen Frequenzen der Spektrallinien des Wasserstoffatoms

$$\nu_{nn'} = \frac{R_{\infty}}{2\pi\hbar} \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad . \tag{1.44}$$

Für n' = 2 ist (1.44) identisch mit der Balmer-Formel (1.27) ($\nu_{n2} \equiv \nu_n$). (Die Kenntnis der Balmer-Formel war wichtig für Bohrs Arbeiten.) Die entsprechenden Übergänge des Elektrons sind in Abb. 1.9 eingezeichnet. Die Übergänge in den Grundzustand n' = 1 bezeichnet man als Lyman-Serie; die Frequenzen der Spektrallinien liegen im Ultraviolettbereich. Die Übergänge in den Endzustand n' = 3 (Frequenzen im Infrarotbereich) heißen Paschen-Serie, etc. Die postulierte Stabilität des Grundzustandes der Atome garantiert die Stabilität der Materie.

Neben den eindrücklichen Erfolgen des Bohrschen Atommodells bleibt aber eine Reihe von offenen Problemen:

- Der Drehimpuls der stationären Zustände stimmt nicht. Der Grundzustand beispielsweise hat in Wirklichkeit Drehimpuls Null (nicht \hbar); er ist kugelsymmetrisch und nicht flach, wie Abb. 1.8 suggerieren lässt.
- Das Elektron ist nicht auf einer klassischen Bahnkurve lokalisiert.

Diese Probleme werden im Kap. 5 aufgegriffen und gelöst.

- Das Bohrsche Modell erklärt nicht, *warum* überhaupt Spektrallinien emittiert werden; es macht keine Aussagen über die Intensitäten der Linien.
- Das Bohrsche Modell gibt keine Erklärung dafür, dass der Grundzustand stabil ist.

Diese beiden Probleme werden im Kap. 6 behandelt (siehe auch Abschn. 2.3.3).

• Hinsichtlich der Eigenschaften der stationären Zustände ist das Bohrsche Modell auf Wasserstoff beschränkt.

Eigenschaften komplizierterer Atome werden im Kap. 7 (Abschn. 7.3.1; Atombau) behandelt.

Wir zeigen nun einige Experimente zum Thema *Energiezustände* und *Spektrallinien* am Beispiel des Natriumatoms. Die tiefliegenden Energieniveaus des Na-Atoms sind in Abb. 1.11 dargestellt. Beobachteten Spektrallinien entsprechen Übergänge zwischen Energieniveaus, die durch Linien verbunden sind. Die mit den Wellenlängenwerten bezeichneten, stark ausgezogenen Übergänge werden in den nachfolgenden Demonstrationsexperimenten beobachtet.

19



Abb. 1.11. Energiezustände des Natriumatoms (Kernladung Z = 11). Einige Strahlungsübergänge sind eingezeichnet

Demonstrationsexperiment 2: Für alle drei nachfolgenden Beobachtungen wird Natrium enthaltendes *Borax*-Pulver ($Na_2B_4O_7$) in eine Bunsenflamme (in Luft) gestreut. Die Kristalle verdampfen und die Moleküle dissoziieren in atomare Bestandteile.

a) Das Verdampfen von Borax in der Flamme ist eine Quelle von intensivem gelben Licht.

Erklärung: Die Na-Atome bilden *Natriumdampf* und werden durch Strahlung und vehemente Stöße mit Atomen *angeregt* und in die beiden stationären Zustände **1** und **2** (Abb. 1.11) gebracht. Anschließend fallen die Atome in den Grundzustand, unter Emission der beiden gelben "D-Linien" (Wellenlänge 589.6 nm (1nm = 10^{-9} m), bzw. 589.0 nm; Abb. 1.11).

b) Wir bestrahlen den Natriumdampf der Bunsenflamme mit dem gelben Licht einer Natrium-Niederdrucklampe. Der Na-Dampf wirft einen *Schatten* an die Wand.

Erklärung: Das monochromatische Licht der D-Linien der Na-Lampe erzeugt eine intensive Anregung der Zustände 1 und 2 der Atome des Na-Dampfes, durch den sog. **Resonanzfluoreszenzprozess**. Klassisch verstehen wir die Resonanzfluoreszenz als Resonanzanregung des Oszillators des Na-Atoms mit der Eigenfrequenz ν der D-Linien durch das monochromatische einfallende Licht benachbarter Frequenz [KP-2-12.4]. Die Resonanzanregung des Oszillators des Na-Atoms führt zu einer intensiven Reemission des gelben Lichts der D-Linien. Da dieser Prozess einen großen Wirkungsquerschnitt hat (vgl. Kap. δ), wird die Intensität des einfallenden Lichtstrahls der Na-Lampe im Bereich des Na-Dampfes stark absorbiert und isotrop reemittiert. Das Resultat ist der Schatten an der Wand.

Quantenphysikalisch beschreiben wir den Resonanzfluoreszenzprozess als Übergang von einem Anfangszustand, bestehend aus einem Photon und

20 1 Die frühen Entdeckungen

einem Na-Atom im Grundzustand, über einen Zwischenzustand (Na-Atom im Zustand 1 bzw. 2) in einen Endzustand, der ein (anderes) Photon enthält und dessen Na-Atom wiederum im Grundzustand ist (vgl. dazu Abb. 2.25, Abschn. 2.3.2).

c) Wir bestrahlen den Na-Dampf der Bunsenflamme mit dem weißen Licht einer Lichtbogenlampe: der Schatten an der Wand ist verschwunden! Erklärung: Nur ein winzig kleiner Teil des einfallenden Lichts, das in diesem Fall ein kontinuierliches Frequenzspektrum aufweist (ähnlich dem Sonnenlicht) hat die (richtige) Frequenz ν des gelben Na-Lichts und ist befähigt, den Resonanzfluoreszenzprozess am Na-Atom des Dampfes auszulösen. Deshalb wird der einfallende Lichtstrahl durch den Na-Dampf kaum abgeschwächt.

Um die Resonanzfluoreszenz am Na-Atom direkter zu sehen, wollen wir den Na-Dampf direkt in die Lichtquelle der Bogenlampe einbauen und das emittierte Licht mit Hilfe eines Spektrographen in seine Frequenzen zerlegen (Abb. 1.12).



Abb. 1.12. Bogenlampe mit Natriumkarbonat in der negativen Kohlenspitze (siehe (b)); (a) Grundriss, (b) Seitenansicht. Das Emissions- und Absorptionsspektrum von Natrium wird mittels Prismenspektrograph an die Wand geworfen

Demonstrationsexperiment 3: Als Na-haltige Verbindung verwenden wir *Natriumkarbonat* (Na₂CO₃), das wir in einer Vertiefung an der Spitze der negativen Kohle (Kathode) einfüllen (Abb. 1.12(b)). Nachdem der Lichtbogen zwischen den Kohlen gezündet hat (blauviolette Farbe), werden die Kohlespitzen durch Joulsche Wärme und aufprallende Ladungsträger zur Weißglut erhitzt. Die Temperatur der positiven Kohle (Anode) ist > 4000 °C und etwas höher als die Temperatur der Kathode (> 3500 °C). Na-Karbonat verdampft und es bildet sich (durch Dissoziation) eine Na-Dampfwolke in der Umgebung des Lichtbogens (Abb. 1.12(b)). Das durch einen Spalt hindurchtretende Licht wird mit Hilfe eines Gradsichtprismas in seine Frequenzen zerlegt und bildet den Spalt auf die Wand ab (Abb. 1.12(a)).

Wir beobachten das kontinuierliche Spektrum des weißen Lichts (rot-gelbgrün-blau-violett), das hauptsächlich herrührt vom Bereich der Anodenkohle. Anstelle der Frequenz der D-Linien von Natrium ist eine "schwarze Linie" sichtbar, die sich oberhalb und unterhalb des Kontinuums als gelbe Linie fortsetzt (Abb. 1.12(b)). Außerhalb des Kontinuums sehen wir ferner die grüne Na-Linie, die einem Übergang zwischen den Zuständen **3** und **1** entspricht (Abb. 1.11). Die grüne Linie hat *keine* Fortsetzung als schwarze Linie im Kontinuum (im Gegensatz zur gelben Linie) (Abb. 1.12(b)).

Erklärung: Das Kontinuum des weißen Lichts zeigt das Absorptionsspektrum von Natrium; durch Resonanzfluoreszenz werden die Frequenzen des gelben Lichts der D-Linien aus dem weißen Licht der Kohlenbogenlampe herausgestreut – ähnlich wie beim früheren Experiment b) mit Borax. Es ist dasselbe Phänomen, das Anlaß gibt zu den sog. Fraunhoferschen Linien im Sonnenlicht. Die schwarzen Linien im Spektrum des Sonnenlichts entsprechen den Resonanzlinien der Gase, die sich in den äußeren Schichten der Sonne befinden; das aus den tieferen (heißeren) Schichten emittierte weiße Licht erleidet Resonanzfluoreszenz in den Oberflächenschichten.

Außerhalb des Kontinuums beobachten wir das *Emissionsspektrum* von Natrium, d.h. die Linien, die vom Na-Dampf emittiert werden (Abb. 1.12 (b)). Dazu gehören u.a. die beiden gelben D-Linien (die Zustände **1** und **2** (Abb. 1.11) werden angeregt). Die Anwesenheit der grünen Linie von 568 nm Wellenlänge zeigt, dass im heißen Na-Dampf auch der Zustand **3** angeregt wird. Diese Linie fehlt aber im Absorptionsspektrum, denn der Ausgangszustand **1** kommt im Dampf viel weniger häufig vor als der Grundzustand.

(Die dunkle Linie im Absorptionsspektrum von Natrium erscheint im Experiment grau, weil nur ein Teil des weißen Lichts Absorption an einem Na-Atom erfährt.)

1.5 Die \hbar -Regel

Die drei frühen Arbeiten zur Quantenphysik (*Planck, Einstein, Bohr*) können als Entdeckung einer neuen Naturkonstanten, der Planckschen Konstanten $\hbar = h/2\pi$ angesehen werden. Es stellt sich nämlich heraus, dass h in allen drei Bereichen (harmonischer Oszillator, Strahlung, Wasserstoffatom) numerisch identisch ist. Die Plancksche Konstante \hbar spielt für die Quantenphysik eine ähnlich zentrale Rolle wie die Lichtgeschwindigkeit c für die Relativitätstheorie.

Wenn die Quantenphysik die Erweiterung (Verallgemeinerung) der klassischen Physik sein soll, dann stellt sich die natürliche Frage nach dem klassischen Grenzfall der Quantenphysik. (Klassischer Grenzfall der Relativitätstheorie bedeutet in der Regel: charakteristische Geschwindigkeit $v \ll c$.)

Wir wollen nun versuchen, am Beispiel des Bohrschen Wasserstoffatoms, den klassischen Grenzfall zu finden. Zunächst betrachten wir das rein mechanische Problem (ohne Strahlung) und fragen: Welches ist die charakteristische Größe, welche das Verhalten des Systems bestimmt? Dies ist zweifellos der Drehimpuls L des umlaufenden Elektrons, denn alle mechanischen Größen (Bahnradius, kinetische Energie, totale Energie, Geschwindigkeit etc.) sind nach (1.33), (1.31) und (1.34) durch L bestimmt. Die nächste Frage lautet: Welcher Wertebereich von $L = n\hbar$ entspricht dem klassischen Grenzfall? Sicher sind es nicht die kleinen Werte (n = 1, 2, ...), denn für sie zeigt das System dramatische Abweichungen vom klassischen Verhalten; es sind die Werte für $n \gg 1$, denn für sie unterscheiden sich Bahnradius, Geschwindigkeit, Energie etc. immer weniger vom kontinuierlichen klassischen Verhalten.

Dieses Beispiel suggeriert eine *allgemeine Regel* über den klassischen Grenzfall eines quantenphysikalischen Systems, die wir an den verschiedensten Beispielen laufend überprüfen werden. Wir nennen sie die

ħ-Regel: Man berechne (klassisch) die charakteristische Wirkung A eines physikalischen Problems. Falls $A \gg \hbar$, dann sind wir im klassischen Grenzfall; ist A nicht viel größer als \hbar , dann muss das Problem quantenphysikalisch behandelt werden.

 \hbar (oder h) hat die Dimension einer "*Wirkung*" (Drehimpuls, oder Länge× Impuls, oder Energie×Zeit, etc.). Die Plancksche Konstante heißt auch Wirkungsquantum.

1. Beispiel: Federpendel (Demonstrationsexperiment)

Eine Masse m = 1 kg hängt an einer Feder und führt eine Vertikalschwingung aus. Die maximale Auslenkung aus der Gleichgewichtslage beträgt $x_0 = 0.2$ m und die Schwingungsperiode T = 1 s.

Darf man dieses Problem klassisch behandeln?

Um die Antwort zu finden, müssen wir die charakteristische Wirkung (A) bestimmen. Dazu fragen wir: Erstens, von welchen physikalischen Größen hängt die Lösung des Problems ab? Zweitens, welche Kombination dieser Größen führt (dimensionsmässig) auf eine Wirkung? Diese Kombination wird dann die gesuchte Wirkung A sein.

Nach der Newtonschen Bewegungsgleichung hängt die Lösung ab [KP-1-1.5] von der Masse (m), der rücktreibenden Kraft, d. h. von der Federkonstanten

1.5 Die \hbar -Regel 23

$$f = m\omega_0^2 = m\left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 \tag{1.45}$$

und von der Anfangsauslenkung (x_0) . Die Gesamtenergie der Schwingung ist

$$E = \frac{f}{2} x_0^2 \quad . \tag{1.46}$$

Zusammen mit T und (1.45) erhalten wir daraus die charakteristische Wirkung (Energie×Zeit)

$$A = \frac{f}{2} x_0^2 T = m x_0^2 \frac{2\pi^2}{T} \approx 1 \,\mathrm{Js} \approx 10^{34} \hbar \gg \hbar \quad . \tag{1.47}$$

Aus (1.47) geht klar hervor, dass wir es hier mit einem *klassischen* Problem zu tun haben.

2. Beispiel: Streuung von α -Teilchen an Kernen

 α -Teilchen (⁴He-Atomkerne, Masse $m = 6.7 \times 10^{-27}$ kg) werden an Kupferkernen (Radius $R = 5.6 \times 10^{-15}$ m) gestreut. Die Energie der α -Teilchen beträgt 40 MeV. Wir betrachten die Streuung als Folge der (kurzreichweitigen) Kernkräfte – in der Näherung ruhender Kerne – und vernachlässigen die elektrischen Ladungen.

Darf man dieses Problem klassisch behandeln?

Wir stellen uns wieder die Frage: Von welchen Größen hängt der zu messende (differentielle) Wirkungsquerschnitt für die Streuung von α -Teilchen an Kernen grundsätzlich ab? Der Wirkungsquerschnitt hängt sicher ab von der Größe des Kerns, also von R. Zudem wird er von der Energie E des α -Teilchens und dessen Masse abhängig sein. Die Größe \sqrt{Em} hat die Dimension eines Impulses. Daraus und mit R folgt die charakteristische Wirkung (Länge×Impuls)

$$A \approx R\sqrt{Em} = 11.6 \,\mathrm{Js} \approx 10 \,\hbar \quad . \tag{1.48}$$

Die Streuung von α -Teilchen muss *quantenphysikalisch* behandelt werden, da A nicht sehr viel größer ist als \hbar .

Dieses Beispiel zeigt, dass (neben der Atomphysik) im Allgemeinen auch die *Kernphysik* Domäne der Quantenphysik ist.

3. Beispiel: Bohrsches Atommodell

Wir betrachten den klassischen Bereich der stationären Zustände des Elektrons, d. h. die Zustände mit Drehimpuls

$$L = n\hbar \gg \hbar \quad , \tag{1.49}$$

also Zustände mit $n \gg 1$. (Hier ist die charakteristische Wirkung A = L.) Nun berechnen wir die Frequenz der Spektrallinie, die dem Übergang vom Zustand $n(\gg 1)$ in den Zustand (n-1)entspricht. Mit (1.39) und (1.40) ist die Energiedifferenz

$$E_n - E_{n-1} = \frac{1}{2}mc^2\alpha^2 \left(\frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2}\right) = \frac{1}{2}mc^2\alpha^2 \frac{2n-1}{n^2(n-1)^2}$$
$$\cong \frac{1}{2}mc^2\alpha^2 \frac{2}{n^3} \quad . \tag{1.50}$$

Die Frequenz ν_{rad} der Spektrallinie ist nach (1.43) und mit (1.50)

$$\nu_{rad} = \frac{mc^2 \alpha^2}{h} \frac{1}{n^3} = \frac{mc^2 \alpha^2}{2\pi\hbar} \frac{1}{n^3} \quad . \tag{1.51}$$

Andererseits wollen wir die Umlaufsfrequen
z ν_{rev} des Elektrons im stationären Zustand
 n berechnen.

$$\nu_{rev} = \frac{v_n}{2\pi r_n} \quad , \tag{1.52}$$

wobe
i v_n die Geschwindigkeit des Elektrons im Zustand
 n bezeichnet. Aus (1.31), (1.39) und (1.40) folgt^{14}

$$v_n = \frac{\alpha c}{n} \quad . \tag{1.53}$$

(1.53) und (1.41) (mit (1.42)) in (1.52) eingesetzt, ergibt

$$\nu_{rev} = \frac{mc^2\alpha^2}{2\pi\hbar} \frac{1}{n^3} \quad . \tag{1.54}$$

Aus (1.54) und (1.51) folgt

$$\nu_{rad} = \nu_{rev} \quad . \quad (n \gg 1) \tag{1.55}$$

Formel (1.55) ist genau das Charakteristikum einer klassischen Behandlung der Abstrahlung des Elektrons auf einer Kreisbahn $r_n(!)$ [vgl. z.B. KP-2-12.4]. Dieses Beispiel zeigt also, dass die \hbar -Regel, die den klassischen Grenzfall festlegt, auch für *Strahlungsprozesse* Gültigkeit hat.

In diesem Zusammenhang spricht man vom Korrespondenzprinzip (hoch angeregte quantenphysikalische Zustände verhalten sich klassisch), welches für die Entwicklung der Quantentheorie von großer Bedeutung war. Das (von N. Bohr formulierte) Korrespondenzprinzip gilt für alle Atome. Das Wasserstoffatom im klassischen Bereich heißt Rydberg-Atom.

Wir haben die \hbar -Regel an einigen Beispielen dargestellt. Es wäre vermessen zu glauben, die Regel könnte allgemein "bewiesen" werden, denn dies

¹⁴ Die Formel (1.53) für die Geschwindigkeit des Elektrons zeigt, dass eine *nichtrelativistische* Behandlung des Wasserstoffatoms eine gute Näherung ist: es ist immer $v_n \ll c$.
würde eine vollständige Quantentheorie voraussetzen, deren Gesetze wir noch gar nicht kennen. Im Verlauf des Lehrgangs soll die Gültigkeit der \hbar -Regel an konkreten Sitationen laufend dargestellt werden. Die Regel illustriert insbesondere die Grundidee, dass die klassische Physik als Grenzfall der Quantenphysik zu betrachten ist. Die \hbar -Regel gilt allgemein für Ein-Quanton-Systeme.

Aufgabe 1 Schwarzer Körper. Ein schwarzer Körper absorbiert die von außen einfallende Strahlungsenergie vollständig.

Berechne die von der Oberfläche eines schwarzen Körpers im thermischen Gleichgewicht emittierte Strahlungsenergie $s(\nu, T)$ pro Flächeneinheit, Zeiteinheit und Frequenzeinheit, ausgedrückt durch die spektrale Energiedichte $\rho(\nu, T)$ des Strahlungsfeldes.

Hinweis: Betrachte ein kleines Loch an der Oberfläche eines schwarzen Körpers und berechne die in den Halbraum emittierte Strahlungsenergie pro Zeiteinheit. Diese ist gleich der Strahlungsenergie in der Halbkugel mit Zentrum im Oberflächenelement und Radius entsprechend der Lichtgeschwindigkeit c.

Aufgabe 2 Stefan-Boltzmann-Gesetz. Zeige, dass die gesamte von der Oberfläche eines schwarzen Körpers pro Flächen- und Zeiteinheit emittierte Strahlungsenergie proportional zu T^4 ist und bestimme die Proportionalitätskonstante.

Hinweise: Verwende das Resultat der Aufgabe 1, und

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} \, dx = \frac{\pi^4}{15}$$

Aufgabe 3 *Photoeffekt.* Wie groß ist die Maximalenergie der Photoelektronen, die durch Bestrahlung einer Zinkplatte mit ultraviolettem Licht der Wellenlänge $\lambda = 2500 \text{ Å} (1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m})$ erzeugt wird?

Die Austrittsarbeit für Zink beträgt 3.6 eV.

Aufgabe 4 Wasserstoffatom. Wir studieren das Bohrsche Atommodell für den Fall einer endlichen Masse (M) des Zentralkörpers (Proton). Der totale Drehimpuls beider Massen (M und m), relativ zum Schwerpunkt des Gesamtsystems, soll der Quantisierungsbedingung (1.35) unterworfen sein.

Berechne die Energiewerte der gebundenen Zustände und drücke das Resultat aus durch die reduzierte Masse μ des Systems $\left(\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)$.

Aufgabe 5 Pionischer Wasserstoff. Negativ geladene Pionen (Masse $m_{\pi} = 139.57 \text{ MeV}/c^2$; 1 MeV = 10⁶ eV) eines Beschleunigers werden im Wasserstoff abgebremst, bis sie eine geeignete Energie haben, um das Elektron des Wasserstoffatoms zu ersetzen: Es entstehen pionische Wasserstoffatome (gebundene Systeme aus Proton und Pion).

Berechne die Energie des Photons (γ -Quants; in Einheiten eV), das bei einem Strahlungsübergang zwischen dem Zustand n = 3 und dem Grundzustand (n = 1) emittiert wird.

Hinweis: Verwende das Resultat der Aufgabe 4.

2 Das Quanton und die Heisenbergschen Ungleichungen

Inhalt: Beugung von Licht am Spalt und Streuung von α -Teilchen an Atomkernen zeigt, dass Licht *und* α -Teilchen sowohl Welleneigenschaften als auch Teilcheneigenschaften haben. Zur Beschreibung dieses allgemein gültigen, empirischen Sachverhalts postulieren wir das *Quantonprinzip*: Alle Objekte im Bereich der Quantenphysik (Photonen, α -Teilchen, Elektronen, Nukleonen, Atome etc.) sind eine neuartige Spezies – weder Welle noch Teilchen – genannt *Quantonen*, die *universellen* quantenphysikalischen Gesetzen gehorchen.

Wir nennen die Planck-Einstein-Energiebeziehung $E = \hbar \omega$ eine Teilchen-Wellen-Symmetrierelation, weil sie erstens eine klassische Teilchengröße (E) mit einer klassischen Wellengröße (ω) verbindet, und zweitens die Konstanz der Energie die Folge einer Symmetrie ist, nämlich der Translationssymmetrie bezüglich der Zeit. Im gleichen Sinn ist die De-Broglie-Beziehung $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ die Teilchen-Wellen-Symmetrierelation bezüglich der örtlichen Translationssymmetrie. Die Rotationssymmetrie schließlich führt auf die Drehimpulsbeziehung $J_z = \hbar m$, welche die allgemeine Quantisierung des Drehimpulses eines Quantons beschreibt. Wir fordern dann, dass die für klassische Wellen allgemein gültigen spektralen Ungleichungen auch im Quantenbereich existieren. Daraus gewinnen wir – zusammen mit den Teilchen-Wellen-Symmetrierelationen – die Heisenbergschen Ungleichungen.

Die fundamentale Bedeutung der Heisenbergschen Ungleichungen wird an verschiedenen physikalischen Beispielen demonstriert. Anschließend werden folgende Begriffe eingeführt: Zustand eines Quantons, Mittelwert und spektrale Breite physikalischer Größen, Eigenzustand und Eigenwert, quasistationärer Zustand (mittlere Lebensdauer und natürliche Linienbreite).

Die Resultate in diesem Kapitel werden "*heuristisch*" gewonnen. Die Heuristik ist "die Lehre von den Methoden zur Auffindung neuer wissenschaftlicher Erkenntnis". Heuristik¹ steht im Gegensatz zur *Deduktion*, der "Herleitung des Besonderen aus dem Allgemeinen" (genannt Beweis). Wir suchen also hier grundlegende Begriffe und allgemeine Gesetze, die es noch gar nicht gibt – wir erfinden sie!

¹ Die Heuristik kommt in Vorlesungen im Allgemeinen zu kurz. Die Studierenden tendieren (fälschlicherweise) dazu, nur das zu akzeptieren, was deduktivmathematisch "bewiesen" ist. Diese Vorstellung entspricht nicht der Realität in den (exakten) Naturwissenschaften; die Heuristik spielt in der physikalischen Forschung eine wichtige Rolle.

2.1 Zwei Experimente: ein neues Prinzip

2.1.1 Beugung von Licht am Spalt

Demonstrationsexperiment 4: Rotes Laserlicht ($\lambda = 6328$ Å) wird auf einen Spalt der (horizontalen) Öffnung a = 0.1 mm bzw. 0.2 mm geschickt. Im Abstand D = 2.85 m misst ein Detektor, welcher senkrecht zur Richtung des Laserstrahls horizontal verschoben wird, die Lichtintensität und erzeugt ein zur Intensität proportionales Spannungssignal. Die Spannung wird mittels Schreiber als Funktion der Detektorposition aufgezeichnet: Wir beobachten die in Abb. 2.1 dargestellten, kontinuierlichen Intensitätsverteilungen (Beugungsbilder).

Die in Abb. 2.1 dargestellten Beugungsbilder stimmen quantitativ mit den mit Hilfe der *klassischen Wellentheorie* berechneten Intensitäten überein (siehe Aufgabe 6).

Wir stellen nun die Frage: Wie ändert sich das Beugungsbild, wenn wir die Intensität des Laserlichts sukzessive verkleinern? Um dies zu klären, benötigen wir einen Lichtdetektor, der *einzelne Photonen* messen kann.



Abb. 2.1. Beugung von monochromatischem Licht am Spalt: Lichtintensität als Funktion der Detektorposition senkrecht zum Laserstrahl, für verschiedene Spaltbreiten *a*. Die Hauptmaxima sind unterdrückt (die horizontalen Linien markieren den Sättigungsbereich des Detektors)

Demonstrationsexperiment 5 ("Zündholzversuch"): Die lichtempfindliche Schicht (Photokathode) eines *Photomultipliers* ist mit einem kreiszylindrischen Gehäuse, dessen Frontfläche ein kleines Loch aufweist, zugedeckt (Abb. 2.2). Im verdunkelten Hörsaal wird im Abstand von ca. 10 m ein Zündholz angezündet. Falls die verlängerte Verbindungslinie zwischen Zündholz und Loch auf die Photokathode fällt, lösen die einzelnen Photonen durch Photoeffekt je ein Elektron aus der Photokathode heraus (Abb. 2.2). Dieses Elektron wird in der Dynodenstruktur vervielfältigt und erzeugt am Ausgang des Photomultipliers einen elektrischen Impuls, der verstärkt wird. Diese Impulse können einzeln gezählt oder mittels Lautsprecher "hörbar" gemacht werden: Ein zeitlich unregelmässiges "Knattern" des Lautsprechers lässt uns die Ankunft der einzelnen Photonen am Photomultiplier wahrnehmen!



Abb. 2.2. Zündholzversuch: Ein Photomultiplier registriert einzelne Photonen

Der Zündholzversuch ist eine eindrückliche Manifestation der *Quanten*natur des Lichts: Wir hören einzelne Photonen.

Ein moderner Detektor, der *lokal* einzelne Photonen messen kann, ist der CCD ("Charge Coupled Device"). Abb. 2.3 zeigt einen Ausschnitt eines digitalisierten CCD-Bildes. Der CCD-Detektor besteht aus einer dichten Anordnung von "Pixels" (Pixelfläche $22 \,\mu m \times 22 \,\mu m$; $1\mu m = 10^{-6} \,m$). Jedes Pixel ist ein winzig kleiner Siliziumfestkörperdetektor. Der CCD wurde während einer gewissen Expositionszeit der K_{α} -Röntgenstrahlung von Argon (Quantenenergie $h\nu = 2957 \,\mathrm{eV}$) ausgesetzt. Die Strahlung erzeugt durch Photoeffekt und nachfolgende Sekundärprozesse elektrische Ladungen, die in den einzelnen Pixels gesammelt werden. Nach Ablauf der Expositionszeit werden die Ladungen aller Pixels gemessen und ausgewertet; es wird ein digitales Bild erzeugt. Die kleinsten weißen Quadrate der Abb. 2.3 entsprechen je einer Pixelfläche; die deponierte Ladung entspricht der Quantenenergie $h\nu = 2957 \,\mathrm{eV}$. Die wei-



Abb. 2.3. Digitalisiertes CCD-Bild der K_{α} -Röntgenstrahlung von Argon. Die kleinsten weißen Quadrate repräsentieren einzelne Photonen. Die gesamte Bild-fläche entspricht einer Detektorfläche von ca. 2 mm²

ßen Quadrate repräsentieren also *einzelne Photonen* der Röntgenstrahlung von Argon. (Die grauen Quadrate sind Pixels, deren Ladung kleiner ist.)

Nach diesem Exkurs über Detektoren sind wir in der Lage, die aufgeworfene Frage nach der Änderung des Beugungsexperiments (Abb. 2.1) als Folge einer Reduktion der Intensität des Laserlichts zu beantworten. Wir denken uns den beweglichen Detektor des Demonstrationsexperiments ersetzt durch einen (ortsfesten) CCD-Detektor, der den gesamten Messbereich der Abb. 2.1 abdeckt. Die Intensität des Laserlichts wird so weit reduziert, dass in der betrachteten Expositionszeit (im Mittel) nur wenige Photonen den CCD erreichen. Wir erhalten dann ein CCD-Bild ähnlich demjenigen der Abb. 2.3, wobei die einzelnen "Photoneneinschläge" hauptsächlich im Bereich des Hauptmaximums der Abb. 2.1 auftreten werden. Wir vergrößern nun schrittweise die Intensität des einfallenden Laserlichts. Es werden immer häufiger einzelne Photonen auch außerhalb des Hauptmaximums registriert – allerdings nie an den Stellen verschwindender Intensität der Abb. 2.1. Wenn wir die Zahl der Einschläge summieren über die Höhe des CCD, dann erhalten wir schließlich (im Mittel) – bei genügend großer Lichtintensität – die Verteilungsfunktion der Abb. 2.1. Mit schrittweise zunehmender Intensität des Laserlichts (bei jeweils fester Expositionszeit) ist also die über die Detektorhöhe summierte (mittlere) Zahl der registrierten Photonen, pro Skaleneinheit der Abb. 2.1, immer genauer gegeben durch die kontinuierliche, klassische Intensitätsverteilung der Abb. 2.1. Wir fassen unsere Ergebnisse zusammen:

Das klassische Wellenkonzept genügt nicht zur Beschreibung der Beugung (Streuung) von Licht am Spalt. Die in der Detektorebene (auf dem Schirm) auftreffenden Photonen werden *lokal* als *Teilchen* (Quanten) gemessen. Die klassische Wellenbeschreibung, welche eine kontinuierliche Intensitätsverteilung vorhersagt, bricht (im allgemeinen Fall) zusammen – insbesondere dann, wenn die Lichtintensität klein ist.

2.1.2 Streuung von α -Teilchen an Atomkernen

Die Streuexperimente spielen eine zentrale Rolle in der Physik, denn sie geben Auskunft über die Kräfte zwischen Projektil und Streuzentrum. Ein typisches Streuexperiment ist in Abb. 2.4 dargestellt.



Abb. 2.4. Streuexperiment

Man misst die Zahl der gestreuten Teilchen als Funktion des Streuwinkels Θ für eine "Target" (Zielscheibe), die aus sehr vielen identischen Streuzentren (z.B. Atomen) besteht. Dabei ist die Distanz D zwischen Target und Detektor viel größer als der Strahldurchmesser und die Abmessung der Target. Würden wir die Kräfte zwischen Projektil und Steuzentrum kennen, dann könnten wir das Ergebnis des Streuexperiments im Prinzip vorhersagen. In der Regel kennen wir die Kräfte aber nicht und wir brauchen ein Konzept, das uns erlaubt, das Ergebnis eines Streuexperiments zu formulieren – unabhängig vom Kraftgesetz. Der Grundbegriff dieses Konzepts ist der differentielle Wirkungsquerschnitt.

Wir greifen in Abb. 2.5 ein einzelnes Streuzentrum der Target heraus. Die z-Achse geht durch das Streuzentrum O und hat die Richtung des Strahls; die Vertikale definiert die y-Achse (Abb. 2.5(b)).

Wir betrachten ein einzelnes Projektil welches – weit weg vom Target – parallel zur z-Achse einfällt. Der *Stoßparameter b* ist definiert als der senkrechte Abstand der Trajektorie des Projektils zur z-Achse (Abb. 2.5(a)). Es



Abb. 2.5. Streuung am einzelnen Streuzentrum O

wird vorausgesetzt, dass die Wechselwirkung zwischen Streuzentrum und Projektil invariant ist gegenüber einer Rotation um die z-Achse. In diesem Fall bewegt sich jedes Projektil in einer Ebene (*Streuebene*), die durch die z-Achse und den Winkel ϕ (siehe Abb. 2.5(b)) definiert ist. Nach der Streuung, weit weg vom Streuzentrum, bewegt sich das Projektil auf einer Asymptote an die Trajektorie (Abb. 2.5(a)), welche die z-Achse in der Nähe von O schneidet und mit ihr den Winkel θ einschließt. Der Stoßparameter b legt den Streuwinkel θ fest; umgekehrt gehört zu jedem Streuwinkel ein Wert des Stoßparameters, sodass

$$b = b(\theta) \,. \tag{2.1}$$

Bei bekanntem Kraftgesetz kann die Funktion (2.1) berechnet werden. Da die Strahlabmessung b_{max} viel kleiner ist als der Abstand D zwischen Target und Detektor (Abb. 2.4), können wir uns die Asymptote an die Bahnkurve von Oausgehend denken (Abb. 2.5(b)). Wir betrachten nun eine Parallelebene zur (x,y)-Ebene im asymptotischen Bereich vor der Streuung (Abb. 2.5(b)). Eine beliebige Bahnkurve ist darin durch die Koordinaten b und ϕ festgelegt. Alle Bahnkurven, die durch das Flächenelement

$$d\sigma = b \, d\phi \, db \tag{2.2}$$

hindurchtreten, durchstoßen ein Oberflächenelement $d\Omega$ auf der Einheitskugel um O (Abb. 2.5(b)), wobei

$$d\Omega = \sin\theta \, d\phi \, d\theta \,. \tag{2.3}$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt eines Streuprozesses ist definiert als $\frac{d\sigma}{d\Omega}$, d. h. als Fläche pro Raumwinkeleinheit. Aus (2.2), (2.3) und (2.1) folgt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b(\theta)}{\sin\theta} \left| \frac{db(\theta)}{d\theta} \right| \quad ; \quad 0 \le \theta \le \pi \,. \tag{2.4}$$

Andererseits ist der differentielle Wirkungsquerschnitt mit den Daten des Streuexperiments (Abb. 2.4) folgendermaßen verknüpft. Wir ordnen jedem Streuzentrum im Target die fiktive Fläche $\Delta\sigma$ (senkrecht zur Strahlrichtung) zu, die wir am Ort des Streuzentrums angebracht denken (Abb. 2.4). Sei n die Zahl der Streuzentren pro Volumeneinheit, N_0 die (mittlere) Zahl der Projektile im Strahl, die pro Zeiteinheit auf die Targetfläche F auftreffen und d die Target-Dicke. Dann ist die Zahl ΔZ der pro Zeiteinheit im Detektor registrierten Teilchen

$$\Delta Z = N_0 \frac{\Delta \sigma \cdot nFd}{F} = N_0 \Delta \sigma \cdot nd \quad . \tag{2.5}$$

Der Ausdruck $(\Delta \sigma \cdot nFd)/F$ ist das Verhältnis zwischen "gesperrter" Fläche und totaler Targetfläche F; $\Delta \sigma \cdot nd$ ist also die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein auf der Target auftreffendes Projektil im Detektor als Streuereignis gemessen wird. Sei $\Delta \Omega$ der *Raumwinkel des Detektors*, d. h. das Oberflächenelement auf der Einheitskugel um das Targetzentrum, das vom Kegel, welcher definiert ist durch die Detektoroberfläche und das Targetzentrum, herausgeschnitten wird. Aus (2.5) folgt dann

$$\frac{\Delta Z}{\Delta \Omega} = N_0 \frac{\Delta \sigma}{\Delta \Omega} nd \quad . \tag{2.6}$$

Wir können (2.6) durch den differentiellen Wirkungsquerschnitt ausdrücken; die Zahl der pro Zeiteinheit und Raumwinkeleinheit unter dem Streuwinkel Θ im Detektor registrierten Teilchen ist somit

$$\frac{dZ(\Theta)}{d\Omega} = N_0 \frac{d\sigma(\Theta)}{d\Omega} nd \quad . \tag{2.7}$$

Der totale Wirkungsquerschnitt σ ist gleich dem differentiellen Wirkungsquerschnitt integriert über die Einheitskugel, d.h.

$$\sigma \equiv \int \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} \sin \theta \, d\theta \, d\phi \quad . \tag{2.8}$$

In (2.8) ist vorausgesetzt, dass

$$\sigma nd \ll 1$$
 , (2.9)

d. h. die fiktive Fläche σ , die wir im Fall des totalen Wirkungsquerschnitts jedem Streuzentrum zuordnen können, muss genügend klein sein, sodass sich die einzelnen Flächen in Strahlrichtung nur unwesentlich überlappen. Anders ausgedrückt: Die "Trefferwahrscheinlichkeit" (σnd) muss klein sein.

Nach dieser allgemeinen Einführung wenden wir uns der Streuung von α -Teilchen (Atomkerne von Helium ⁴₂He) an Atomkernen, z.B. an Kupferkernen (Kernladung Z = 29) zu (siehe Abb. 2.6).

Zwischen α -Teilchen und Kupferkern wirken einerseits die langreichweitigen, abstoßenden Coulomb-Kräfte und andererseits die kurzreichweitigen Kernkräfte. Wir interessieren uns hauptsächlich für den differentiellen Wirkungsquerschnitt der Kernstreuung. Der nach (2.7) experimentell bestimmte differentielle Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ enthält natürlich die Kern- *und* die Coulomb-Streuung. In Abb. 2.6 ist das Verhältnis von $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ und dem klassisch berechneten Wirkungsquerschnitt $(\frac{d\sigma}{d\Omega})_C$ für Coulomb-Streuung aufgetragen.

Die enorm starken Variationen des differentiellen Wirkungsquerschnitts, insbesondere bei 40 MeV Energie des α -Teilchens (man beachte die logarithmische Darstellung!), stellen ein merkwürdiges Resultat dar. Man kann



Abb. 2.6. Differentieller Wirkungsquerschnitt für Streuung von α -Teilchen (von 40 MeV, bzw. 19 MeV) an Cu-Kernen, in Einheiten des Wirkungsquerschnitts für Coulomb-Streuung, als Funktion des Streuwinkels Θ im Schwerpunktsystem. [*G. Igo, H.E. Wegner* and *R.M. Eisberg*, Phys. Rev. **101** (1956) 1508]

sich kaum eine Kraft zwischen α -Teilchen und Cu-Kern vorstellen, die so beschaffen ist, dass eine winzige Änderung des Streuparameters zu einer derart starken Änderung der Streuung führt (vergleiche z.B. das Resultat der Aufgabe 7). Das Verhalten des Wirkungsquerschnitts bei 40 MeV erinnert vielmehr an ein *Beugungsbild*, wie es beispielsweise in Abb. 2.1 vorliegt: *Es sieht so aus, als würden sich die* α -*Teilchen wie Wellen verhalten, die am Cu-Kern* (als Scheibe oder Kugel vorzustellen) gebeugt werden.

Diese Interpretation wird durch die Tatsache gestützt, dass die Distanz sukzessiver Maxima mit zunehmender Energie des Projektils abnimmt (Unterschied zwischen 19 MeV und 40 MeV in Abb. 2.6), wie man dies für ein Beugungsphänomen erwarten würde. Zudem ist das Phänomen unabhängig von der Art des Atomkerns: Die α -Streuung an praktisch allen Atomkernen zeigt das typische Beugungsbild der Abb. 2.6 im differentiellen Wirkungsquerschnitt. Außerdem hängt der Effekt nicht ab von der Art des Projektils: Die Streuung von Protonen oder Neutronen an Kernen zeigt ebenfalls Beugungbilder im differentiellen Wirkungsquerschnitt. Wir fassen zusammen:

Der klassische Teilchenbegriff genügt nicht zur Beschreibung der Streuung von α -Teilchen an Atomkernen. Die im Detektor registrierten α -Teilchen zeigen eine Intensitätsverteilung, wie sie für die Beugung klassischer Wellen charakteristisch ist. Die klassische Teilchenbeschreibung der Streuung mittels Teilchentrajektorien bricht (im allgemeinen Fall) zusammen – insbesondere dann, wenn der Atomkern genügend klein ist (vgl. 2. Beispiel, Abschn. 1.5).

2.1.3 Der Quantonbegriff

In der *klassischen Physik* haben wir zwei grundlegend verschiedene allgemeine Begriffe. Der eine ist der Begriff des *Teilchens* (z.B. Massenpunkte in der Mechanik oder in der kinetischen Gastheorie): das Objekt ist vollständig lokalisiert. Der andere ist der Begriff des *Feldes*. Eine (allgemeine) Form von Feldern sind beispielsweise die elektromagnetischen *Wellen* (Licht, Radiowellen, Röntgenstrahlen etc.). Hier ist das Objekt räumlich ausgedehnt.

Die beiden Experimente zeigen, dass im Bereich der *Quantenphysik* weder der klassische Teilchenbegriff noch der klassische Wellenbegriff genügen. Die doch sehr unterschiedlichen Experimente weisen beide sowohl Teilchencharakter als auch Wellencharakter auf. Teilchencharakter im Fall von Licht bedeutet aber nicht ein Verhalten wie klassische Teilchen (im quantenphysikalischen Bereich verschwinden die Beugungsbilder nicht!). Wellencharakter im Fall der α -Teilchen bedeutet nicht ein Verhalten wie klassische Wellen (die Objekte werden in geeigneten Detektoren als Teilchen registriert).

Diese Beobachtungen zeigen, dass wir im quantenphysikalischen Bereich ein *neues Konzept* brauchen. Wir formulieren die (kühne) These, dass sich Photonen und α -Teilchen (im quantenphysikalischen Bereich) "gleich" verhalten, d.h. den gleichen quantenphysikalischen Gesetzen unterworfen sind. Wir gehen noch einen Schritt weiter und behaupten, dass *alle* Objekte (Photonen, Elektronen, Protonen, Neutronen, α -Teilchen, Atomkerne, Atome etc.) *universellen* quantenphysikalischen Gesetzen gehorchen. In der Quantenphysik gibt es also nur *eine* Sorte von Objekten – wir nennen sie **Quantonen**².

Das **Quantonprinzip**³ besagt, dass alle Objekte (genannt Quantonen) den gleichen quantenphysikalischen Gesetzen gehorchen.

Diese Gesetze versuchen wir im Folgenden zu finden. Die Forschung der letzten hundert Jahre hat das Quantonprinzip auf eindrücklichste Weise bestätigt.

Das Quantonprinzip bedeutet natürlich nicht, dass alle Quantonen gleich sind. Die einzelnen Objekte (Photon, Elektron, Proton, Neutron, Atomkern, Atom etc.) unterscheiden sich durch ihre inneren Eigenschaften. Für stationäre Quantonen sind dies: Masse, elektrische Ladung, Eigendrehimpuls (Spin), magnetisches Moment etc.

2.2 Die Teilchen-Wellen-Symmetrierelationen

2.2.1 Die Planck-Einstein-Beziehung

Erstmals bei der Hohlraumstrahlung (1.19), dann beim Photoeffekt (1.21), (1.24), und schließlich im Zusammenhang mit dem Bohrschen Atommodell (1.43) haben wir die Relation

$$E = \hbar\omega \qquad = h\nu \tag{2.10}$$

angetroffen. Sie heißt *Planck-Einstein-Beziehung* und beschreibt den Einzelprozess der Erzeugung (Emission) und der Vernichtung (Absorption) eines Photons, d.h. des Quantons der elektromagnetischen Strahlung. Die Erzeugung oder Vernichtung eines Photons geschieht immer als Folge der Wechselwirkung der Strahlung mit einem materiellen System. (Bei der Hohlraumstrahlung ist das materielle System die Gesamtheit der harmonischen Oszillatoren, beim Photoeffekt das Metall und beim Bohrschen Atommodell das

 $^{^2}$ Man hat auch den Ausdruck "Wavicle"geprägt: weder "Wave" noch "Particle" – etwas Neues!

³ Das Quantonprinzip hat seinen Anfang in den Überlegungen von Nils Bohr (siehe M. Jammer (Fußnote 1-3) Sect. 7.2). Bohr bezeichnete den quantenphysikalischen Wellen-Teilchen-Dualismus als Komplementaritätsprinzip. Dieser Schritt markierte den radikalen Bruch mit den Vorstellungen der klassischen Physik. Aus der zitierten Darstellung von Jammer geht hervor, dass verschiedene Protagonisten der Quantenphysik teilweise unterschiedliche Vorstellungen mit dem Begriff "Komplementaritätsprinzip" verbanden. Dasselbe gilt für heutige Physiker, weshalb wir den Begriff in der vorliegenden Einführung nicht verwenden.

Wasserstoffatom.) Die Beziehung (2.10) bringt zum Ausdruck, dass die Einzelprozesse in der Energie (E) quantisiert sind. E ist (im Sinne des Teilchen-Wellen-Dualismus) eine Teilchengröße. Andererseits ist ω in (2.10) eine Wellengröße, denn ω ist die Frequenz des (klassischen) elektromagnetischen Wellenfeldes, aus dem heraus das Photon absorbiert wird, oder welches aus einer Vielzahl von Emissionen identischer materieller Systeme entsteht. Deshalb nennen wir (2.10) eine *Teilchen-Wellen*-Relation.

Es ist wichtig zu realisieren, dass die Planck-Einstein-Beziehung (2.10) für das gesamte elektromagnetische Spektrum gilt (siehe Abb. 2.7).

Die physikalische Größe Energie hat etwas zu tun mit einer Raum-Zeit-Symmetrie, nämlich mit der Invarianz gegenüber einer Translation in der Zeit. In der klassischen Mechanik nicht relativistischer Teilchen zeigt man, dass für Probleme, deren physikalische Gesetze identisch sind für Bezugssysteme, die sich nur durch eine Translation in der Zeit unterscheiden, die Energie eine Konstante der Bewegung ist. Ebenso folgt in der klassischen Feldtheorie aus der Invarianz gegenüber einer Translation in der Zeit die Energieerhaltung des Feldes. Deshalb nennen wir den Ausdruck (2.10) eine Teilchen-Wellen-Symmetrierelation, indem wir Bezug nehmen auf die zeitliche Translationssymmetrie (vgl. erste Zeile der Tabelle 2.1). Das entsprechende elektromagnetische (klassische) Wellenfeld ist eine fortlaufende harmonische Welle, dessen E-Feld geschrieben werden kann [KP-2-12.2] als

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}_{\mathbf{0}} \sin(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad . \tag{2.11}$$

Die charakteristische Wellengröße ω (Frequenz) multipliziert die Variable der Symmetrietransformation (t) im Argument der harmonischen Funktion (**k** ist der Wellenvektor).

Raum-Zeit-	Erhaltungsgröße	$Wellengr\"öeta e$	Teilchen-Wellen-
Symmetrie			Symmetrie relation
Translation in	Energie E	Frequenz ω	$E = \hbar \omega$
der Zeit (t)			
Translation	Impuls	Wellenvektor	$\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$
im Ort (x, y, z)	$\mathbf{p}(p_x, p_y, p_z)$	$\mathbf{k}(k_x,k_y,k_z)$	
Rotation bezüglich	Drehimpuls	azimutale	$J_z = \hbar m$
z-Achse (ϕ)	J_z	Wellenzahl m ;	
		$m=0,\pm 1,,\pm j$	
		oder	
		$m = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2},, \pm j$	

Tabelle 2.1. Die Teilchen-Wellen-Symmetrierelationen

(): Variable der Raum-Zeit-Symmetrie

Im Folgenden werden uns weitere Teilchen-Wellen-Symmetrierelationen begegnen.



38 2 Das Quanton und die Heisenbergschen Ungleichungen

Abb. 2.7. Frequenz ν , Wellenlänge λ ($\nu\lambda = c$; c: Vakuumlichtgeschwindigkeit) und Quantonenergie E der elektromagnetischen Strahlung

2.2.2 Die De-Broglie-Beziehung

Wir wollen die Energie E (2.10) des Photons ausdrücken durch dessen Impuls *p*. Die Energie-Impuls-Beziehung ist nach der speziellen Relativitätstheorie für ein beliebiges Teilchen [siehe z.B. KP-1-8.9]

$$E^2 - p^2 c^2 = m^2 c^4 \quad , \tag{2.12}$$

wobe
imdie Teilchenmasse und cdie Vakuumlichtgeschwindigk
eit ist. Speziell für das Photon (Massem=0)gilt

$$E = pc \quad . \tag{2.13}$$

Andererseits ist

$$\omega = kc \quad , \tag{2.14}$$

wobei k die Wellenzahl des klassischen Wellenfeldes bedeutet. Aus (2.13) und (2.14) folgt mit (2.10)

$$p = \hbar k \quad . \tag{2.15}$$

In (2.15) ist p der Impuls des absorbierten bzw. emittierten Photons – eine Teilchengröße, und k ist eine Wellengröße. Wir haben also in (2.15) wiederum eine *Teilchen-Wellen*-Relation vor uns. Auch hier handelt es sich um eine Symmetrierelation, denn die physikalische Größe Impuls ist verknüpft mit der Invarianz gegenüber einer örtlichen Translation: In der klassischen Mechanik wie auch in der klassischen Feldtheorie folgt aus der Translationsinvarianz im Ort (x, y, z) die Erhaltung des Gesamtimpulses $\mathbf{p}(p_x, p_y, p_z)$. Die Symmetrierelation (2.15) lässt sich vektoriell schreiben als

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad . \tag{2.16}$$

Genau wie im Fall der Energie multipliziert die charakteristische Wellengröße (Wellenvektor \mathbf{k}) die Variable der Symmetrietransformation (\mathbf{r}) im Argument der harmonischen elektromagnetischen Welle (2.11). (Vergleiche die zweite Zeile in der Tabelle 2.1.)

An dieser Stelle kommt nun die Dissertation "Recherche sur la Théorie des Quanta" von Louis de Broglie (1924) zum Zug, die für die Entwicklung der Quantenphysik von größter Bedeutung war. In dieser Arbeit wird den Elektronen Wellencharakter zugeschrieben (man spricht von "Materiewellen"): Elektronen der Geschwindigkeit v (Masse m) haben eine Wellenlänge, genannt De-Broglie-Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p} \quad . \tag{2.17}$$

Diese *De-Broglie-Beziehung* ist identisch mit der für Photonen hergeleiteten Symmetrierelation (2.15), denn $k = 2\pi/\lambda$ ($h = 2\pi\hbar$). De Broglie postuliert also, dass dieselbe Teilchen-Wellen-Symmetrierelation, wie wir sie für Photonen gewonnen haben, auch für *Elektronen* gelten soll⁴. Falls diese These richtig ist, dann muss nach dem Quantonprinzip (Abschn. 2.1.3) die Symmetrierelation (2.16) gelten für *irgendein* Quanton, also auch für Neutronen, α -Teilchen, Atome etc.

Drei Jahre später bestätigten die von *Clinton Joseph Davisson* und *Lester H. Germer* durchgeführten Streuexperimente mit Elektronen an Nickeleinkristallen auf unmissverständliche Weise die kühne These von *de Broglie*⁵.

Wir wählen nun einen Umweg. Anstelle einer Erklärung der Experimente von *Davisson* und *Germer*, wenden wir uns zuerst dem entsprechenden Streuproblem mit *Photonen* (in der Form von $R\ddot{o}ntgenstrahlen^6$) zu.

Streuung (Beugung) von Röntgenstrahlen an Kristallen

Anschließend werden wir in einem *Demonstrationsexperiment* zeigen, dass sich Elektronen in ihrer Streung an Kristallen genauso verhalten wie Röntgenstrahlen!

Das Verhalten der Röntgenstrahlen ist bestimmt durch das **Braggsche Gesetz**. Wir leiten das Braggsche Gesetz her für eine einfache Schar von Gitterebenen eines kubischen Gitters (siehe Abbildungen 2.8 und 2.9).

Eine monochromatische ebene Welle von Röntgenstrahlen fällt unter dem Einfallswinkel θ_e bezüglich der Gitterebenen auf den Einkristall ein (Abb. 2.8) (Einfallsrichtung in der Zeichenebene) und wird an den einzelnen Atomen gestreut. Die von den einzelnen Atomen emittierte Streustrahlung hat nach der klassischen Wellentheorie die *gleiche Frequenz* wie die einlaufende Welle [siehe z.B. Lichtstreuung an Atomen, KP-2-12.4, 3. Beispiel]. Die Streustrahlung hat zudem eine *feste Phasenbeziehung* relativ zur einlaufenden Welle. Wir können uns jedes Atom als Quelle einer sekundären Kugelwelle vorstellen; alle Atome, die auf einer Parallelen zur Wellenfront der einlaufenden Welle liegen, emittieren in Phase. Wir stellen nun die Frage: Ist es möglich – weit weg vom Kristall – als Superposition aller sekundären Kugelwellen, eine auslaufende (monochromatische) ebene Welle zu erhalten? Dies ist dann der

⁴ Das Professorenkomitee der Gutachter war beeindruckt von der Originalität der Dissertation von L. de Broglie – glaubte aber damals nicht an die Realität der neuen Wellen!

⁵ Siehe *M. Jammer* (*Fussnote 1-3*) p. 252–255.

⁶ Röntgenstrahlen sind Teil des elektromagnetischen Spektrums (Abb. 2.7). Monochromatische Röntgenstrahlen bestimmter Wellenlängen (Energien) entstehen durch Bestrahlung von Atomen (Materie) mit beschleunigten Elektronen: Diese schlagen einzelne (tiefliegende) Elektronen aus dem Atomverband heraus (Ionisation). Das entstehende "Loch" im Atom wird durch ein anderes Elektron der Atomhülle aufgefüllt, unter Emission eines Röntgenquants der Energie $\hbar\omega = E_i - E_f$, wobei E_i die Energie des Ions im Lochzustand ist und E_f die Energie nach dem Auffüllprozess.

Fall, wenn alle Kugelwellen – weit weg vom Kristall – in einer festen Richtung θ_r (Abb. 2.8) kohärent beitragen. Wir zeigen zunächst, dass für $\theta_r = \theta_e$ alle Atome einer festen Gitterebene konstruktiv interferieren; es genügt, dies für zwei Atome A und B (Abb. 2.8) zu zeigen. Die durch A und 1 definierte Wellenfront der einlaufenden Welle ist zu einem späteren Zeitpunkt in B. In dieser Zeit gelangt die einlaufende Welle von 1 nach B und die in A emittierte Streuwelle nach 2. Für $\theta_r = \theta_e$ sind die Wegdifferenzen $\overline{A2}$ und $\overline{1B}$ gleich ($\overline{A2} = d' \cos \theta_r$; $\overline{1B} = d' \cos \theta_e$). Damit ist auch die Kohärenz (konstruktive Interferenz) der Streuwellen weit weg von A und B garantiert.

Nun müssen wir noch die Kohärenzbedingung für Kugelwellen von Atomen in verschiedenen Gitterebenen formulieren – etwa der Atome B und C in Abb. 2.9. Wir setzen $\theta_e = \theta_r = \theta$ und entnehmen der Abbildung, dass für eine Wegdifferenz $2d \sin \theta$, welche ein ganzes Vielfaches der Wellenlänge λ der einfallenden Röntgenstrahlung ist, die von B und C emittierten Kugelwellen weit weg konstruktiv interferieren, also muss gelten

$$2d \sin \theta_n = n\lambda$$
; $n = 1, 2, 3, ...$ (2.18)

Das Braggsche Gesetz kann somit folgendermaßen formuliert werden:

Eine monochromatische ebene Welle von Röntgenstrahlen wird an einem Einkristall reflektiert, falls der Einfallswinkel (θ_e) dem durch die Braggsche Beziehung (2.18) definierten diskreten (Braggschen)



Abb. 2.8. Streuung von Röntgenstrahlung an Kristallatomen ($\theta_r = \theta_e$)



Abb. 2.9. Streuung von Röntgenstrahlung an Kristallatomen (Braggsche Bedingung)

Winkel θ_n entspricht. Die ebene reflektierte Welle hat die Richtung $\theta_r = \theta_n$ und die Frequenz der einlaufenden Welle.

Nun betrachten wir wirkliche Röntgenstrahlexperimente, die in der Festkörperphysik eine zentrale Funktion haben: Sie werden zur Bestimmung der Gitterstrukturen verwendet. (In unserem einfachen Beispiel lässt sich aus Röntgenstrahlexperimenten die Gitterkonstante d mit großer Genauigkeit bestimmen.)

1. Experiment: Debye-Scherrer (Pulver)-Methode (Abb. 2.10)

Ein Strahl monochromatischer Röntgenstrahlung trifft auf eine aus vielen kleinen Einkristallen (Pulver) bestehende Probe eines bestimmten Materials (siehe Abb. 2.10(a)). Die Probe ist im Zentrum eines auf der Mantelfläche eines Kreiszvlinders angeordneten Films plaziert; der direkte Strahl ist ausgeblendet. Wir denken uns eine feste Schar von Gitterebenen in jedem Einkristall durch einen Normalenvektor \mathbf{n} gekennzeichnet, der senkrecht zu den Gitterebenen steht. Für einen festen Braggschen Winkel θ_n ist die Braggsche Bedingung (2.18) erfüllt für Einkristalle, deren Normalenvektor **n** den Winkel $(\pi/2 - \theta_n)$ zum Strahl einschließt (Abb. 2.8). Für jeden dieser Einkristalle ist der Bragg-reflektierte Strahl in der Ebene, die durch die Einstrahlrichtung und \mathbf{n} definiert wird. Die Gesamtheit der reflektierten Strahlen, die zu einem festen θ_n gehört, liegt somit auf der Mantelfläche eines Kreiskegels, dessen Achse mit der Einstrahlrichtung zusammenfällt (halber Öffnungswinkel $2\theta_n$!) und dessen Spitze in der (näherungsweise punktförmigen) Probe liegt. Der Film (weit weg von der Probe) schneidet aus dem Kreiskegel zwei Kreisbogen heraus. Zu jedem Braggschen Winkel θ_n einer festen Schar von Gitterebenen gehören also zwei symmetrisch angeordnete Kreisbogen auf dem Film der



Abb. 2.10. Streuung monochromatischer Röntgenstrahlung an kristallinem Pulver. (a) Experimenteller Aufbau; (b) Beugungsringe von ZnO-Pulver [*C. Kittel*, Introduction to Solid State Physics, John Wiley (1959), p. 60]

Abb. 2.10(b). Die Vermessung der "Röntgenlinien" auf dem Film gestattet es, die Gitterstruktur des Probenmaterials zu bestimmen. Das Beugungsbild der Abb. 2.10(b) entspricht einer polykristallinen ZnO-Probe.

2. Experiment: Laue (Einkristall)-Methode (Abb. 2.11)

Ein Röntgenstrahl mit kontinuierlichem Frequenzspektrum trifft auf einen Einkristall eines bestimmten Materials (Abb. 2.11(a)). In einer Ebene senkrecht zum Strahl ist ein Film angeordnet. In dieser Anordnung ist der Normalenvektor **n**, der zu einer bestimmten Schar von Gitterebenen gehört, fest im Raum, und damit ist der Winkel $(\pi/2 - \theta_n)$ zwischen ihm und der Strahlrichtung festgelegt (und somit auch der Braggsche Winkel θ_n). Für jede Ordnung n folgt dann aus dem Braggschen Gesetz (2.18) eine bestimmte Wellenlänge λ_n . Aus dem kontinuierlichen Röntgenstrahlspektrum wird die entsprechende Frequenz herausgefiltert, und der Bragg-gebeugte Strahl erzeugt einen *Punkt* in der Filmebene (denn die Streuung erfolgt in der Ebene, die durch Strahlrichtung und **n** bestimmt ist). Die Abb. 2.11(b) zeigt das Beugungsbild





(b)

Abb. 2.11. Streuung von "weißem Röntgenlicht" an Einkristall. (a) Experimenteller Aufbau; (b) Beugungspunkte von SiO₂-Einkristall [*E. Hecht*, Optics, Addison-Wesley (1987), p.433]

eines SiO₂-Einkristalls. Die Vermessung der Punkte gestattet wiederum eine Bestimmung der Gitterstruktur der Probe.

Wir wollen nun die beiden Experimente nicht mit Röntgenstrahlen, sondern mit **Elektronen** durchführen. Die Apparatur ist in Abb. 2.12 dargestellt.



Abb. 2.12. Streuung von Elektronen an Au-Kristallpulver und Au-Einkristall; experimenteller Aufbau

46 2 Das Quanton und die Heisenbergschen Ungleichungen

Demonstrationsexperiment 6: In der Apparatur der Abb. 2.12 wird ein *Elektronenstrahl* erzeugt. Eine (negative) Hochspannung $V (\approx -60 \text{ kV})$ ist zwischen einer isolierten Elektrode \ominus und einer geerdeten Elektrode \oplus , die ein Loch aufweist, angelegt. Positiv geladene Ionen des Restgases werden im **E**-Feld des Kondensators beschleunigt, prallen auf der negativen Elektrode auf und lösen dort Elektronen aus, die ihrerseits im **E**-Feld beschleunigt werden. Die Elektronen treten teilweise durch das Loch in den hochevakuierten Außenraum aus. Der nahezu parallele Elektronenstrahl wird durch ein geeignet dimensioniertes Magnetfeld, das eine Linsenwirkung aufweist, auf einen Punkt des Fluoreszenzschirms fokussiert.

Schieben wir nun einen Goldeinkristall in den Elektronenstrahl (Abb. 2.12), dann erscheint auf dem Fluoreszenzschirm eine Anordnung von *Punkten* – ähnlich dem Beugungsbild von Röntgenstrahlen in Abb. 2.11. (Der direkte Elektronenstrahl wird ausgeblendet.) Eine Komponente des Strahls besteht aus Elektronen mit kontinuierlicher Energieverteilung.

Ersetzen wir die einkristalline Probe durch eine (multikristalline) Goldfolie, dann tritt anstelle der Punkte eine Anordnung *konzentrischer Kreise* – ähnlich dem Beugungsbild von Röntgenstrahlen in der Debye-Scherrer-Anordnung der Abb. 2.10.

Verändern wir die Energie E der Elektronen durch Änderung der Beschleunigungsspannung V, dann ändert sich der Radius der Kreise, entsprechend dem Braggschen Gesetz (2.18) und der de-Broglie-Beziehung (2.17) ($p = \sqrt{2Em}$; m: Elektronenmasse).

Diese Experimente zeigen klar, dass *Elektronen Wellencharakter* haben, denn es scheint unmöglich, diese für Wellenphänomene so typischen Bilder auf irgend eine andere Art zu erklären. Selbstverständlich ist die Streuung von Elektronen an Kristallen nicht identisch mit der Streuung der Röntgenstrahlen. Die Projektile unterscheiden sich wesentlich durch die Masse, die elektrische Ladung (und auch den Eigendrehimpuls (Spin)), und deshalb ist die Streuung an einem einzelnen Atom beispielsweise sicher ganz verschieden. (Die beiden Quantonen verhalten sich nur hinsichtlich der quantenphysikalischen Gesetze – etwa (2.10) und (2.16) – gleich.) Die Experimente zeigen, dass diese intrinsischen Unterschiede der beiden Quantonen für die Streuung an *Kristallen* von untergeordneter Bedeutung sind; der Wellencharakter, zusammen mit der geometrisch-periodischen Struktur der Kristalle, dominieren eindeutig das Phänomen – für Strahlung wie für "Teilchen".

Der Compton-Effekt

Im Anschluss an die Streuung von Quantonen an den Atomen eines Kristalls wenden wir uns einem ganz anders gearteten Prozess zu, nämlich einer Streuung zweier Quantonen aneinander.

Arthur Holly Compton streute Röntgenstrahlen an Materie und stellte fest, dass die Wellenlänge der gestreuten Strahlung praktisch unabhängig vom Material des Streukörpers ist; die Wellenlänge hängt ab von der Wellenlänge der einfallenden Strahlung und vom Streuwinkel. Alle Versuche, diese Beobachtungen als Streuung von klassischen elektromagnetischen Wellen an Elektronen der Materie zu deuten, schlugen fehl. *Compton* versuchte (1923), das Phänomen als quantenhaften Elementarprozess zu erklären: Ein Röntgenquant der Energie $E = \hbar \omega$ (Impuls $p = \hbar \omega/c$) streut an einem quasifreien Elektron. Der Endzustand besteht aus einem Röntgenquant der Energie E' und einem bewegten Elektron. Wir werden anschließend die Theorie von *Compton* in einem Demonstrationsexperiment mit γ -Quanten (Gammastrahlen) prüfen; deshalb formulieren wir den Compton-Effekt gleich mit γ -Quanten (Abb. 2.13).



Abb. 2.13. Compton-Streuung am freien Elektron

Da die Energie des einlaufenden γ -Quants (Impuls \mathbf{p} , Energie E) um viele Größenordnungen höher ist als die Bindungsenergie der Elektronen der Materie, können wir das Elektron (Masse m) im Anfangszustand (Abb. 2.13) als frei und ruhend betrachten. Das γ' -Quant im Endzustand (Impuls \mathbf{p}' , Energie E') besitze den Streuwinkel θ (relativ zur Richtung von \mathbf{p}) und das Elektron den Impuls \mathbf{p}_e und die Energie E_e (Abb. 2.13). Wir formulieren (nach *Compton*) die Energie- und Impulserhaltung und verwenden die Energie-Impuls-Beziehung (2.12). Letztere lautet (mit den Bezeichnungen der Abb. 2.13) für das Elektron im Endzustand

$$E_e^2 - \mathbf{p}_e^2 c^2 = m^2 c^4 \tag{2.19}$$

und für das γ -Quant (Masse Null!)

$$E = pc \quad . \tag{2.20}$$

Die Energieerhaltung bedeutet

$$E + mc^2 = E' + E_e \tag{2.21}$$

48 2 Das Quanton und die Heisenbergschen Ungleichungen

und die Impulserhaltung

$$\mathbf{p} + 0 = \mathbf{p}' + \mathbf{p}_e \quad . \tag{2.22}$$

Wir lösen (2.21) nach E_e auf und (2.22) nach \mathbf{p}_e und setzen beides in (2.19) ein:

$$[(E + mc2) - E']2 - (\mathbf{p}c - \mathbf{p}'c)2 = m2c4 . (2.23)$$

Damit haben wir die Größen des Elektrons eliminiert. Beim Quadrieren der Ausdrücke in (2.23) verwenden wir (2.20) und erhalten

$$Emc^{2} - E'mc^{2} - EE' + EE'\cos\theta = 0$$
 . (2.24)

Wir dividieren (2.24) durch $E'mc^2$ und finden

$$\frac{E}{E'} = 1 + \frac{E}{mc^2} \left(1 - \cos\theta\right)$$

oder

$$E' = \frac{E}{1 + \frac{E}{mc^2}(1 - \cos\theta)} \quad . \tag{2.25}$$

In (2.25) ist die Energie E' des gestreuten γ -Quants als Funktion des Streuwinkels θ und der Energie E des einlaufenden γ -Quants dargestellt.

Im folgenden *Demonstrationsexperiment* wollen wir die Relation (2.25) prüfen.

Als Gammaquelle dient das radioaktive Isotop $^{137}_{55}$ Cs mit der mittleren Lebensdauer $\tau = 44$ Jahre (siehe Abb. 2.14). Nach dieser Zeit ist (im Mittel) der Bruchteil (1/e) der $^{137}_{55}$ Cs-Atomkerne durch β -Zerfall, d. h. durch Emission eines Elektrons (e^-) und eines Antineutrinos ($\overline{\nu_e}$), in den angeregten Zustand $^{137}_{56}$ Ba^{*} des $^{137}_{56}$ Ba-Isotops zerfallen. Der Zustand $^{137}_{56}$ Ba^{*} geht seinerseits (mit der mittleren Lebensdauer $\tau = 3.7$ Minuten), unter Emission eines γ -Quants der Energie $E = 661 \, \rm keV$ (1 keV = 10³ eV), in den Grundzustand des Ba-Kerns $^{137}_{56}$ Ba über.

Die γ -Quanten werden im Demonstrationsexperiment mit einem NaI(Tl)-Szintillationsdetektor gemessen (Abb. 2.15(a)). Der Detektor besteht aus einem Photomultiplier (Abb. 2.2), auf dessen Photokathode ein Szintillationskristall aus Natriumiodid (mit Thallium aktiviert) montiert ist. Die auf den Kristall auftreffenden γ -Quanten bewirken einen Photoeffekt oder Compton-Effekt im Kristallmaterial. Aus diesen Prozessen resultieren energiereiche Elektronen, die im Kristall abgebremst werden und dabei Licht erzeugen. Dieses Licht trifft auf die Photokathode und löst – durch Photoeffekt – Elektronen aus, welche vervielfacht und als elektrischer Spannungsimpuls registriert werden. Zu jedem gemessenen γ -Quant gehört ein Spannungsimpuls, dessen Höhe proportional zu der im Kristall total deponierten Energie ist. Die zahlreichen γ -Ereignisse eines Experiments werden als Pulshöhenhistogramm (Pulshöhenspektrum) in einem Vielkanalanalysator elektronisch registriert (siehe z.B. Abb. 2.16(a)).



Abb. 2.14. Zerfallskette und Zerfallsschema von ¹³⁷Cs

Demonstrationsexperiment 7:

Im Experiment (a) (Abb. 2.15(a)) messen wir die von der ¹³⁷Cs-Quelle (sie befindet sich im Zentrum eines Bleikörpers) emittierten γ -Quanten der Energie E = 661 keV. Das resultierende Pulshöhenspektrum (nach einer Messzeit von 1s) ist in Abb. 2.16(a) dargestellt. Die vertikale Koordinate jedes Messpunkts gibt die Anzahl der Ereignisse an, welche eine der horizontalen Koordinaten entsprechende Pulshöhe haben. Zunächst fällt auf, dass das Pulshöhenspektrum diskontinuierlich ist; die einzelnen Messpunkte scheinen um eine kontinuierliche Kurve herum zu schwanken. Dies ist Ausdruck des statistischen Charakters des radioaktiven Zerfalls. Das (mittlere) Pulshöhenspektrum ist dominiert durch die sog. "Photolinie", die einer Energiedeposition im Kristall von 661 keV entspricht: Das γ -Quant bewirkt z. B. einen Photoeffekt, und die Energie des (energiereichen) Elektrons wird vollständig im Kristall deponiert. Falls das einlaufende γ -Quant im Kristall ein Compton-Ereignis verursacht und das (Comptongestreute) γ' -Quant den Kristall verlässt, wird die Energie von 661 keV nicht vollständig deponiert; die Pulshöhe des entsprechenden Ereignisses ist kleiner als diejenige des Photoereignisses (Abb. 2.16(a)).

Im Experiment (b) (Abb. 2.15(b)) plazieren wir einen Streukörper aus Kupfer zwischen Quelle und Detektor, der als Quelle der "ruhenden" Elektronen (Compton-Effekt) dient. Abb. 2.16(b) zeigt das resultierende Pulshöhenspektrum (wiederum nach einer Messzeit von 1 s). Das Spektrum ist praktisch identisch mit demjenigen ohne Streukörper (Abb. 2.16(a)). Erklärung: Wir messen eine Überlagerung der den Streukörper durchdringenden γ -Quanten und der Compton-gestreuten γ' -Quanten mit Streuwinkel $\theta = 0$; nach Formel (2.25) haben Letztere aber auch die Energie der einlaufenden Quanten (661 keV).

Der Bleikörper der γ -Quelle ist so montiert, dass er in der Vertikalebene, auf einem Kreis mit Zentrum im Streukörper, beliebig bewegt werden kann (Abb. 2.15(c)). Damit kann ein beliebiger Streuwinkel θ eingestellt werden. Im *Experiment* (c) wählen wir den Streuwinkel $\theta = 77^{\circ}$; für diesen speziellen Wert ist nach (2.25) $E' = \frac{1}{2}E$ (mc² = 511 keV). Nach einer Messzeit



Abb. 2.15. Demonstrations experiment *Compton-Effekt*; experimenteller Aufbau. (a) Ohne Streukörper; (b) Cu-Streukörper, $\theta = 0^{\circ}$; (c) Streuwinkel $\theta = 77^{\circ}$

von 100s erhalten wir das in Abb. 2.16(c) dargestellte Pulshöhenspektrum: Die mittlere Pulshöhe der Photolinie ist genau um den Faktor 2 kleiner. (Die Ereignisse außerhalb der Photolinie resultieren hauptsächlich aus Compton-Streuung an der umliegenden Materie.)

Im Experiment (d) schließlich lassen wir die Quelle unverändert ($\theta = 77^{0}$) und ersetzen den Streukörper aus Kupfer durch einen solchen aus Aluminium. Das resultierende Spektrum (Abb. 2.16(d); Messzeit 150s) ist im Wesentlichen unverändert. Die Form des Energiespektrums der Comptongestreuten Strahlung ist also unabhängig vom Material des Streuers, wie wir dies theoretisch erwarten.

Solche Messungen, ausgeführt für verschiedene Streuwinkel θ (und γ -Energien), bestätigen das theoretische Resultat (2.25) exakt.



Abb. 2.16. Demonstrations experiment *Compton-Effekt*; Resultate. (a) Ohne Streukörper, $\theta = 0^{0}$; (b) Cu-Streukörper, $\theta = 0^{0}$; (c) Cu-Streukörper, (d) Al-Streukörper, $\theta = 77^{0}$

52 2 Das Quanton und die Heisenbergschen Ungleichungen

In der historischen Entwicklung der Quantentheorie spielte der Compton-Effekt eine wichtige Rolle, erstens als Bestätigung der Lichtquantenhypothese, zweitens demonstrierte er die Gültigkeit der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung (2.12) im Quantenbereich, und drittens ging die De-Broglie-Beziehung (2.17) wesentlich in die Behandlung ein, denn die historischen Experimente wurden damals mit Röntgenstrahlen durchgeführt, die experimentell durch die Wellenlänge charakterisiert waren. (Man benutzte die Beugung an bekannten Einkristallen (Kristallspektrometrie) und das Braggsche Gesetz (2.18)).

Unsere Herleitung zum Compton-Effekt scheint zu zeigen, dass der Effekt durch die *Teilchenbeschreibung* allein bestimmt ist (wir benutzten ausschließlich Energie- und Impulserhaltung). Dies ist ein Trugschluss, der darauf beruht, dass wir nur die Frage nach Energie und Impuls der Quantonen im Endzustand gestellt haben. Würden wir beispielsweise nach dem Wirkungsquerschnitt fragen, dann kämen wir mit der (reinen) Teilchenbeschreibung nicht mehr aus.

Die λ -Regel

Die De-Broglie-Wellenlänge λ hat eine wichtige, allgemeine physikalische Bedeutung. Wir erläutern den allgemeinen Zusammenhang zunächst an einem einfachen **Beispiel** aus der *klassischen Elektrodynamik* (Abb. 2.17).

Zwei kohärente, punktförmige Lichtquellen im Abstand d emittieren monochromatische elektromagnetische Wellen. Wir können uns zwei atomare harmonische Oszillatoren vorstellen, die senkrecht zur Zeichenebene in Phase schwingen. Auf einem Schirm im (großen) Abstand R ($R \gg d$) messen wir die Intensitätsverteilung (Aufgabe 9)

$$I(\theta) = I_0 \cos^2\left(\pi \frac{d\sin\theta}{\lambda}\right) \quad , \tag{2.26}$$



Abb. 2.17. Interferenz zweier kohärenter Lichtquellen; Anordnung

wobei θ der Streuwinkel ist (Abb. 2.17) und λ die Wellenlänge der Strahlung. Die beiden Quellen interferieren *konstruktiv* für die Streuwinkel

$$d\sin\theta_n = n\lambda; \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$
 (2.27)

und destruktiv für $n = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots$

Nun denken wir uns die beiden atomaren Oszillatoren der Punktquellen durch eine ebene harmonische Welle, die senkrecht zur Zeichenebene linear polarisiert ist, angeregt (Abb. 2.17) und fassen das Ganze als eine experimentelle Anordnung zur Messung des Quellabstandes d auf, indem wir – mittels Strahlungsdetektor – die Intensitätsverteilung (2.26) ausmessen. Ist s_n die Position des Intensitätsmaximums der Ordnung n (Abb. 2.17), dann gilt

$$\frac{s_n}{R} = \theta_n \quad , \tag{2.28}$$

wobei $\theta_n \leq \pi/2$ der entsprechende Streuwinkel ist. Mit (2.27) folgt aus (2.28)

$$d = n \frac{\lambda}{\sin(s_n/R)} \quad . \tag{2.29}$$

Speziell für n = 1 ist

$$d = \frac{\lambda}{\sin(s_1/R)} \quad . \tag{2.30}$$

Aus der Position s_1 des 1. Nebenmaximums der Intensitätsverteilung können wir also den Quellabstand d bestimmen – vorausgesetzt

$$d \ge \lambda$$
 , (2.31)

denn für $d < \lambda$ ist s_1 nicht definiert: Man beobachtet kein 1. Nebenmaximum. Wenn wir den Abstand d immer kleiner werden lassen (bei fester Wellenlänge λ), dann verschwindet das Interferenzbild allmählich; in Abb. 2.18 ist die Intensitätsverteilung (2.26) für verschiedene Verhältnisse d/λ dargestellt. Aus der Abbildung geht hervor, dass die Bestimmung des Quellabstandes d umso schwieriger wird, je größer die Wellenlänge im Vergleich zu d ist. Allgemein gesagt: Eine Bestimmung des Quellabstandes ist also nur dann möglich, wenn die Bedingung

$$\lambda \stackrel{<}{\sim} d \tag{2.32}$$

erfüllt ist.

Dieser Sachverhalt gilt viel allgemeiner. (Wir bleiben zunächst im Rahmen der klassischen Elektrodynamik.) Wollen wir durch Streuung (Beugung) elektromagnetischer Wellen die Ausdehnung oder Größe irgendeiner Struktur (oder eines Objekts) bestimmen, dann müssen wir dafür sorgen, dass die Wellenlänge λ kleiner ist als die Objektgröße d. Weitere Beispiele dazu aus unserem Erfahrungsbereich sind: Die Beugung am Spalt (Aufgabe 6; die Objektgröße ist die Spaltbreite a), sowie die Beugung von Röntgenstrahlen an



Abb. 2.18. Interferenz zweier kohärenter Lichtquellen; Intensitätsverteilung für verschiedene Abstände d

Kristallen, die durch das Braggsche Gesetz (2.18) bestimmt wird (hier ist die Objektgröße der Abstand d der Gitterebenen – begründe dies!).

Wir verlassen nun den Bereich der klassischen elektromagnetischen Wellen. Die Bestimmung von Strukturen und Objekten ist ein zentrales Thema der Physik. Wir erinnern an zwei Strukturbestimmungen von historischer Bedeutung.

- Die Streuung von α -Teilchen (⁴₂He-Atomkerne) aus natürlich-radioaktiven Substanzen an Atomen zeigte, dass praktisch die gesamte Masse des Atoms im Atom*kern* der Ausdehnung ~ 10 fm (1 fm = 10⁻¹⁵ m) konzentriert ist. Diese Beobachtungen haben im Atommodell von *Ernest Ruther*ford (1911) eine quantitative Beschreibung gefunden (vgl. Abschn. 1.4).
- Die Streuung von hochenergetischen Elektronen, Myonen und Neutrinos an Nukleonen (Proton und Neutron) haben gezeigt, dass die Nukleonen aus "punktförmigen" Elementarteilchen, den *Quarks* zusammengesetzt sind. Wir wissen heute, dass alle Hadronen (Baryonen und Mesonen) aus Quarks aufgebaut sind (Abschn. 8.2).

Es zeigt sich, dass für alle diese (und andere) Strukturbestimmungen die zentrale Größe die *De-Broglie-Wellenlänge* λ des Projektils ist. Die Resultate, die wir mit klassischen elektromagnetischen Wellen gewonnen haben, lassen sich verallgemeinern auf die Streuung beliebiger Quantonen an beliebigen Objekten. Die verallgemeinerte λ -Regel lautet:

Wir können durch Streuung von Quantonen die Struktur eines Objekts nur dann bestimmen, wenn die Bedingung De-Broglie-Wellenlänge λ des Quantons $\leq Objektgröße$ erfüllt ist.

(Die De-Broglie-Wellenlänge des Photons ist die klassische Wellenlänge des elektromagnetischen Feldes.)

Die λ -Regel liefert die zentrale Motivation für den Hochenergiebereich der Teilchenphysik, in dem man versucht, immer kleinere Teilchenstrukturen aufzulösen: kleine Wellenlängen – hohe Energien!

Ähnlich wie bei der \hbar -Regel (Abschn. 1.5), wäre eine allgemeine Begründung der λ -Regel eine formidable Aufgabe, die unsere Möglichkeiten weit übersteigt; das ganze Arsenal der Quantentheorie müsste uns zur Verfügung stehen. Die λ -Regel als Erfolgsaussage eröffnet uns aber einen tiefen Einblick in die physikalische Bedeutung der De-Broglie-Wellenlänge des Quantons.

2.2.3 Die Quantisierung des Drehimpulses

Der wesentliche Inhalt der letzten beiden Abschnitte ist in den ersten zwei Zeilen der Tabelle 2.1 zusammengefasst. Ausgangspunkt unserer Überlegungen waren die Raum-Zeit-Symmetrien (Translation in Ort und Zeit). Daraus resultierten entsprechende Teilchen-Wellen-Symmetrierelationen. Der Erfolg der Überlegungen ermutigt uns, auf dem eingeschlagenen Weg weiterzugehen. Es gibt nämlich noch eine weitere Raum-Zeit-Symmetrie, die *Symmetrie bezüglich der Rotation um eine feste Achse*. Gibt es auch hier – für Systeme, die rotationsinvariant sind – eine entsprechende Teilchen-Wellen-Symmetrierelation?

Wir betrachten irgendein elementares freies Quanton oder ein beliebiges, aus Quantonen zusammengesetztes System ohne äußere Kräfte. Der Schwerpunkt S des Systems sei in Ruhe und eine beliebige, raumfeste Achse durch S sei die z-Achse. Ein solches System ist invariant bezüglich einer beliebigen Rotation (Drehwinkel ϕ) um die z-Achse, d.h. die physikalischen Gesetze sind identisch für Bezugssysteme, die sich nur durch eine Drehung ϕ unterscheiden. In der klassischen Physik zeigt man, dass für Probleme, die invariant sind bezüglich einer Rotation um die z-Achse, der *Gesamtdrehimpuls J_z* des Systems (bezüglich der z-Achse) eine Konstante der Bewegung ist. In Analogie zu den Teilchen-Wellen-Symmetrierelationen der Translationen, (2.10) und (2.16), können wir eine neue Teilchen-Wellen-Symmetrierelation aufstellen

$$J_z = \hbar m \qquad (2.33)$$

Welche Bedeutung hat die Wellengröße m in (2.33)? Da \hbar die Dimension eines Drehimpulses hat, ist m dimensionslos. Um Eigenschaften der Wellengröße m zu finden, betrachten wir das denkbar einfachste klassische, rotationssymmetrische Wellenproblem, nämlich Schallwellen im Innern eines gasgefüllten schlanken Torus (Abb. 2.19).

Eine fortlaufende, harmonische Schallwelle im Innern des Torus hat die Auslenkungsfunktion

$$\Phi(s,t) = A\cos(ks - \omega t + \alpha) \quad , \tag{2.34}$$

welche die mittlere Bewegung des Mediums tangential an den Kreis mit Radius r_0 beschreibt. Darin ist k die Wellenzahl, ω die Frequenz ($\omega/k = v_0$: Schallgeschwindigkeit) und α ein beliebiger Phasenwinkel. Es ist zweckmäßig,



Abb. 2.19. Schallwellen im Torus; Anordnung

als örtliche Variable den Azimutwinkel $\phi = s/r_0$ einzuführen (Abb. 2.19); damit schreibt sich die Auslenkungsfunktion (2.34) als

$$\Phi(\phi, t) = A\cos(m\phi - \omega t + \alpha) \quad , \tag{2.35}$$

wobei die azimutale Wellenzahl m definiert ist als

$$m = r_0 k \quad . \tag{2.36}$$

Wegen der Eindeutigkeit der Auslenkungsfunktion müssen wir die *Periodi*zitätsbedingung

$$\Phi(\phi + 2\pi, t) = \Phi(\phi, t) \tag{2.37}$$

verlangen, die für alle ϕ und t gültig ist. Aus (2.37) folgt mit (2.35)

$$\cos(m\phi + m2\pi - \omega t + \alpha) = \cos(m\phi - \omega t + \alpha)$$

und daraus

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \tag{2.38}$$

D.h. die azimutale Wellenzahl hat diskrete (in unserem Fall ganzzahlige) Werte. Weil dies allein eine Folge der Symmetrie ist, können wir vermuten, dass die "Quantisierung der m-Werte" nicht auf unser einfaches Beispiel beschränkt ist, sondern für beliebige (zunächst klassische) Wellen gelten müsste (vgl. Aufgabe 14). Da ferner m die Variable der Symmetrietransformation (ϕ) im Argument der harmonischen Funktion (2.35) multipliziert, identifizieren wir die Wellengröße m in (2.33) mit der azimutalen Wellenzahl m in (2.35) – in Analogie zu den früheren Teilchen-Wellen-Symmetrierelationen. Dies hat die weit reichende Konsequenz, dass der Gesamtdrehimpuls J_z diskrete Werte haben muss. In unserer heuristischen Überlegung beansprucht die Symmetrierelation (2.33) die allgemeine Gültigkeit der Relationen (2.10) und (2.16). Dies bedeutet, dass der Gesamtdrehimpuls J_z für jedes freie Quanton (oder quantenphysikalische System) diskrete Werte haben muss; wir sagen:

Der Drehimpuls ist quantisiert.

Einige Bemerkungen drängen sich auf.

- Die allgemeine Quantisierung des Drehimpulses (2.33) ist ein durch Analogieschluss gefundenes Resultat, welches an Experimenten überprüft werden muss.
- Das *Stern-Gerlach-Experiment* (1922) demonstrierte erstmals die räumliche Quantisierung des Drehimpulses eines Atoms (siehe Abschn. 2.4).
- Es stellt sich heraus (experimentell und theoretisch), dass ganzzahlige Werte der z-Komponente des Drehimpulses (2.38) nicht die einzigen Möglichkeiten sind. Wir werden sehen, dass es Objekte gibt, die erst nach einer Rotation um den Winkel 4π in sich übergehen. Ein Beispiel dafür sind die Spin 1/2-Quantonen (Abschn. 4.3). Entsprechend sind die *m*-Werte in (2.33) für diese Fälle *halbzahlig*:

$$m = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2, \dots \tag{2.39}$$

Es zeigt sich (experimentell und theoretisch), dass ganzzahlige und halbzahlige m-Werte nie gemischt auftreten; ein Quanton hat entweder ganzzahlige oder halbzahlige Werte.

Die bisherigen Resultate dieses Abschnitts sind in der dritten Zeile der Tabelle 2.1 (Abschn. 2.2.1) zusammengefasst.

Im Folgenden studieren wir weitere **Drehimpulseigenschaften** des freien Quantons. Als konkretes physikalisches System stellen wir uns beispielsweise ein *paramagnetisches Gas im thermischen Gleichgewicht* vor, dessen Atome den *Gesamtdrehimpuls* **J** haben.

In der klassischen Physik sind die Drehimpulsvektoren der einzelnen Atome (bezogen auf den Schwerpunkt S des Atoms) statistisch-isotrop verteilt; alle räumlichen Orientierungen kommen im Mittel gleich oft vor (Abb. 2.20). Die z-Komponente J_z des Drehimpulses (bezüglich einer beliebigen aber festen z-Achse) variiert in den Grenzen

$$-J \le J_z \le J \quad ; \quad J \equiv |\mathbf{J}| \quad .$$
 (2.40)

Quantenphysikalisch nimmt J_z die diskreten Werte (2.33) an, wobei jedes System (Quanton) durch einen Maximalwert m_{max} charakterisiert ist, den wir

$$j \equiv m_{max} \tag{2.41}$$

nennen; j heisst Drehimpulsquantenzahl. Somit variieren die m-Werte (aus Symmetriegründen) in den Grenzen

$$-j \le m \le j \quad . \tag{2.42}$$

Es sind also Quantonen mit den folgenden Drehimpulsquantenzahlen j möglich (gegeben sind auch die entsprechenden m-Quantenzahlen):



Abb. 2.20. Paramagnetisches Gas; isotrope Verteilung der Drehimpulse (klassisch)

$$j = 0 : m = 0$$

$$j = 1/2 : m = \pm 1/2$$

$$j = 1 : m = 0, \pm 1$$

$$j = 3/2 : m = \pm 1/2, \pm 3/2$$

$$j = 2 : m = 0, \pm 1, \pm 2$$

$$\vdots$$

(2.43)

Die *m*-Quantenzahl (klassisch die azimutale Wellenzahl) nennen wir – aus später ersichtlichen Gründen – *magnetische Quantenzahl* des Gesamtdrehimpulses. Aus (2.43) geht hervor, dass es für jeden Wert von j immer (2j + 1) diskrete *m*-Werte gibt.

Die nächste Frage lautet: Wie ist die Drehimpulsquantenzahl j mit dem physikalischen Drehimpuls $\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$ des Quantons verknüpft? Wir wollen das *Quadrat* des Drehimpulses, definiert als

$$\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \quad , \tag{2.44}$$

berechnen, indem wir die Größe (2.44) über die Gesamtheit der Systeme (z.B. der Atome des paramagnetischen Gases) mitteln:

$$\mathbf{J}^{2} = \left\langle J_{x}^{2} \right\rangle + \left\langle J_{y}^{2} \right\rangle + \left\langle J_{z}^{2} \right\rangle \quad . \tag{2.45}$$

Aus Symmetriegründen ist

$$\langle J_x^2 \rangle = \langle J_y^2 \rangle = \langle J_z^2 \rangle \quad .$$
 (2.46)

Mit (2.46) können wir (2.45) schreiben als

$$\mathbf{J}^2 = 3\left\langle J_z^2 \right\rangle \quad . \tag{2.47}$$

Wir behaupten

2.2 Die Teilchen-Wellen-Symmetrierelationen

59

$$\langle J_z^2 \rangle = \frac{1}{2j+1} \sum_{m=-j}^{+j} (m\hbar)^2 \quad ,$$
 (2.48)

wobei die Summe über alle *m*-Werte zu erstrecken ist. Die Formel drückt aus, dass alle *m*-Zustände gleiches Gewicht haben, d.h. proportional zu $J_z^2 = (m\hbar)^2$ beitragen ((2j + 1) ist die Anzahl der Zustände). Der Ausdruck (2.48) ist durch die statistische Mechanik motiviert: jeder mögliche Zustand ist gleich wahrscheinlich. Man zeigt leicht, dass (2.48) richtig sein muss mindestens für die beiden Grenzfälle:

- j = 1/2: Aus Symmetriegründen müssen die beiden einzigen *m*-Zustände gleich beitragen.
- <u>Klassisch</u> ist der Drehimpulsvektor **J** räumlich isotrop verteilt, d.h. der Endpunkt des **J**-Vektors ist mit konstanter Flächendichte auf der Kugel mit Radius $J = |\mathbf{J}|$ kontinuierlich verteilt (Abb. 2.20). Projiziert auf die z-Achse, resultiert eine konstante Dichte von Zuständen

$$\rho(z) \propto \frac{d\Omega}{dz} = \frac{2\pi J \sin \theta J \, d\theta}{J \sin \theta \, d\theta} = 2\pi J = konst.$$

Dies ist genau die Aussage (2.48) im klassischen Grenzfall.

Wir akzeptieren die Relation (2.48). Nun können wir in (2.48) die Summe über m ausführen für j ganzzahlig, bzw. halbzahlig (Aufgabe 15) und erhalten in beiden Fällen

$$\langle J_z^2 \rangle = \frac{1}{3} j(j+1)\hbar^2$$
 . (2.49)

(2.49) in (2.47) eingesetzt, ergibt das Schlussresultat

$$\mathbf{J}^2 = j(j+1)\hbar^2 \tag{2.50}$$

oder

$$J \equiv \sqrt{\mathbf{J}^2} = \sqrt{j(j+1)}\,\hbar \quad . \tag{2.51}$$

Die Größe J^2 (oder J) hat also für ein bestimmtes Quanton einen festen Wert, der durch die Drehimpulsquantenzahl j gegeben ist.

Für ein räumlich isotropes Problem (z.B. unser paramagnetisches Gas ohne äußeres Magnetfeld) können wir uns die (2j+1) diskreten *m*-Zustände als räumliche Einstellungen des (konstanten) **J**-Vektors mit jeweils festem Wert von $J_z = m\hbar$ vorstellen, wobei die **J**-Vektoren für feste magnetische Quantenzahl *m* auf einem Kreiskegel, dessen Achse die z-Achse ist, gleichmäßig verteilt sind. In Abb. 2.21 sind die Drehimpulseigenschaften für ein System (Quanton) mit j = 3/2 dargestellt.

Nach der \hbar -Regel (Abschn. 1.5) muss im klassischen Grenzfall $J \gg \hbar$ sein. In diesem Fall – und nur in diesem – folgt aus (2.51)

$$J = j\hbar \quad ; \tag{2.52}$$



Abb. 2.21. Quantisierung der Eigendrehimpulse; paramagnetische Atome mit j=3/2

im Allgemeinen ist (siehe Abb. 2.21)

$$J_z(max) = j\hbar < J \quad . \tag{2.53}$$

(Klassisch sind die **J**-Vektoren (im Mittel) räumlich isotrop verteilt; Abb. 2.20.)

Der Gesamtdrehimpuls eines Quantons (bezüglich dessen Schwerpunkt) wird oft als "**Spin**" oder auch *Eigendrehimpuls* bezeichnet; man spricht dann von der *Spinquantenzahl s* (anstelle von j). Für Elektronen, Myonen und Neutrinos beispielsweise ist s = 1/2; wir sagen, diese Quantonen haben "Spin 1/2".

2.3 Die Heisenbergschen Ungleichungen

Wir wollen die Teilchen-Wellen-Symmetrierelationen (Abschn. 2.2) mit fundamentalen (klassischen) Welleneigenschaften, den *spektralen Ungleichungen* kombinieren.

2.3.1 Die klassischen spektralen Ungleichungen

Die Wellengleichungen sind *lineare* Differentialgleichungen. Deshalb gilt das Superpositionsprinzip: Beliebige Überlagerungen von harmonischen, fortlaufenden Wellen beispielsweise sind wieder Lösungen der Wellengleichung; wir sprechen von einem *Wellenpaket*. Für *skalare* Wellen lässt sich das Wellenpaket in der allgemeinsten Form schreiben als

$$\Phi(\mathbf{r},t) = \iiint A(k_x,k_y,k_z)e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} dk_x dk_y dk_z \quad , \qquad (2.54)$$

wobei $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ der Wellenvektor ist und $A(k_1, k_2, k_3)$ die Amplitude des Wellenpakets beschreibt. Die Frequenz ω ist eine vom konkreten Wellenproblem abhängige Funktion von \mathbf{k} (Dispersionsrelation):

$$\omega = \omega(k_x, k_y, k_z) \quad . \tag{2.55}$$

Klassische Wellen sind *reelle* Größen; die (kompakte) komplexe Schreibweise (2.54) bedeutet, dass die physikalische Größe $\Phi(\mathbf{r}, t)$ der Realteil des Ausdrucks (2.54) ist.

Ein konkretes, skalares Wellenproblem beispielsweise sind Schallwellen in Gasen. Die räumliche Wellenfunktion $\Phi(\mathbf{r}, t)$ in diesem Fall ist der Überdruck der Schallwelle im Medium [siehe z. B. KP-1-7.2]. Das Problem ist isotrop und die Relation (2.55) lautet in diesem Fall einfach

$$\omega = \omega(k) = v_0 k = v_0 \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} \quad , \tag{2.56}$$

wobei v_0 die Schallgeschwindigkeit ist. Für einen festen Ort (z.B. $\mathbf{r} = 0$) lässt sich die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion schreiben in der Form

$$F(t) \equiv \Phi(0,t) = \int_{-\infty}^{\infty} a(\omega)e^{-i\omega t} d\omega \quad .$$
 (2.57)

Um von (2.54) zum Ausdruck (2.57) zu gelangen, führen wir Kugelkoordinaten im **k**-Raum ein, integrieren über die Winkelvariablen und ersetzen die Variable k durch ω , entsprechend (2.56). Nach dem Fourier-Integralsatz [siehe z.B. KP-1- Anhang D] ist die *Spektralfunktion* $a(\omega)$ in (2.57)

$$a(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(t) e^{i\omega t} dt \quad .$$
(2.58)

Wir können also zu jeder Signalfunktion F(t) mit (2.58) die entsprechende Spektralfunktion $a(\omega)$ berechnen. Umgekehrt lässt sich aus jeder Spektralfunktion $a(\omega)$ mit (2.57) die entsprechende Signalfunktion berechnen. Durch konkretes Durchrechnen verschiedener Beispiele [KP-1- Anhang D] kann man sich davon überzeugen, dass die typische Breite Δt der Signalfunktion und die typische Breite $\Delta \omega$ der Spektralfunktion immer folgender Ungleichung genügen:

$$\underline{\Delta\omega} \cdot \underline{\Delta t} \stackrel{>}{\sim} \underline{1} \quad . \tag{2.59}$$

Die Relation heißt **zeitliche spektrale Ungleichung**; sie stellt eine fundamentale Eigenschaft klassischer Wellen dar, die sich allgemein beweisen lässt, falls man die Größen $\Delta \omega$ und Δt exakt definiert (siehe dazu Abschnitte 2.3.2, 4.2.3 und (2.73)).
Die Ungleichung (2.59) bringt zum Ausdruck, dass es für ein Wellenpaket mit scharfer Frequenz ($\Delta \omega \rightarrow 0$) keinen Ort gibt, der ein beliebig kurzzeitiges Signal aufweist. Umgekehrt, falls ein Wellenpaket an einem Ort ein (kurzzeitiges) Signal der Breite Δt hat, dann gilt für die Frequenzbreite des Pakets $\Delta \omega \geq 1/\Delta t$. Für ein Wellenpaket, das aus einer einzigen monochromatischen Komponente besteht, ist $\Delta \omega = 0$. Aus (2.59) folgt für diesen Fall $\Delta t \rightarrow \infty$, d. h. das entsprechende Signal F(t) ist zeitlich unendlich ausgedehnt – die harmonische Funktion! Umgekehrt muss für ein vollkommen scharfes zeitliches Signal ($\Delta t = 0$) nach (2.59) $\Delta \omega \rightarrow \infty$ gelten, d. h. das entsprechende Wellenpaket muss ein unendlich ausgedehntes Frequenzenspektrum haben. Ein Beispiel dafür (aus dem Bereich der elektromagnetischen Wellen) ist der Blitz; es ist bekannt, dass der Blitz viele Radiosender stört (viele Frequenzen kommen vor!).

Auf analoge Weise zeigt man, dass für ein allgemeines Wellenpaket der Form (2.54) die folgenden drei **räumlichen spektralen Ungleichungen** gelten:

$$\Delta k_x \cdot \Delta x \stackrel{>}{\sim} 1 \quad ; \Delta k_y \cdot \Delta y \stackrel{>}{\sim} 1 \quad ; \Delta k_z \cdot \Delta z \stackrel{>}{\sim} 1 \quad . \tag{2.60}$$

In (2.60) bedeutet beispielsweise Δk_x die typische Breite der Verteilungsfunktion der Komponenten k_x des Wellenpakets, und Δx die typische räumliche Ausdehnung des Wellenpakets in *x*-Richtung; entsprechendes gilt für die Größen in den anderen beiden Ungleichungen.

Als **Beispiel** betrachten wir ein eindimensionales Wellenpaket, dessen Breite der Spektralfunktion $\Delta \omega \ll \omega_0$ ist, wobei ω_0 die mittlere Frequenz darstellt. Das Wellenpaket bewege sich in positiver z-Richtung. Allgemein ist die *Gruppengeschwindigkeit* v_g des Wellenpakets verknüpft mit der Dispersionsrelation $k(\omega)$ durch die Beziehung

$$v_g^{-1} = \frac{dk(\omega)}{d\omega}\Big|_{\omega=\omega_0} \quad . \tag{2.61}$$

(Für Schallwellen im Gas ist $k(\omega) = \omega/v_0$, und folglich $v_g = v_0$: Schallgeschwindigkeit.) Der mittleren Frequenz ω_0 entspricht im Allgemeinen eine mittlere Wellenzahl $k_0 = k(\omega_0)$, und der spektralen Breite $\Delta \omega$ entspricht eine Breite Δk in der Verteilung der Wellenzahlen, welche gegeben ist durch

$$\Delta k \simeq \frac{dk(\omega)}{d\omega}\Big|_{\omega=\omega_0} \cdot \Delta \omega = \frac{\Delta \omega}{v_g} \quad . \tag{2.62}$$

In (2.62) wurde (2.61) benutzt. Das Wellenpaket habe die räumliche Ausdehnung Δz in z-Richtung. Die Zeit Δt , die das Wellenpaket braucht, um den Ort z zu überstreichen, ist gegeben durch

$$\Delta z \simeq v_g \Delta t \quad . \tag{2.63}$$

Wir multiplizieren die Gleichungen (2.62) und (2.63) und erhalten

$$\Delta k \cdot \Delta z \approx \Delta \omega \cdot \Delta t \quad . \tag{2.64}$$

Durch Vergleich von (2.64) mit der Ungleichung (2.59) erhalten wir die räumliche spektrale Ungleichung in einer Dimension:

$$\underline{\Delta k} \cdot \underline{\Delta z} \stackrel{>}{\sim} \underline{1} \quad . \tag{2.65}$$

Für die monochromatische ebene Welle ist neben $\Delta \omega = 0$ auch $\Delta k = 0$; aus (2.65) folgt dann $\Delta z \to \infty$. Dies ist die charakteristische Eigenschaft der harmonischen Welle.

Ein räumlich exakt lokalisiertes Wellenpaket ($\Delta z = 0$) hat nach (2.65) ein unendlich breites Spektrum von Wellenzahlen ($\Delta k \to \infty$) und wegen der Dispersionsrelation $k(\omega)$ (2.56) allgemein auch ein unendlich breites Frequenzspektrum ($\Delta \omega \to \infty$). (Wegen (2.63) ist neben Δz auch $\Delta t = 0$.) Ein Beispiel dafür aus der Akustik ist die Schallwelle des Knalls.

Schließlich betrachten wir ein räumlich beschränktes System klassischer Wellen, das Achsialsymmetrie bezüglich einer z-Achse aufweist, z.B. das System der Abb. 2.19. Für ein in diesem System in positiver ϕ -Richtung bewegtes Wellenpaket können wir das Resultat (2.65) des eindimensionalen Mediums direkt übertragen. Anstelle der Wellenzahl k tritt hier die azimutale Wellenzahl m (2.36), und die Ortsvariable z wird ersetzt durch den Azimutwinkel ϕ (2.35). Wir erhalten somit aus (2.65) die **azimutale spektrale Ungleichung**

$$\Delta m \cdot \Delta \phi \stackrel{>}{\sim} 1 \quad . \tag{2.66}$$

Es ist zu beachten, dass hier m (im Gegensatz zu k in (2.65)) diskrete Werte hat. Deshalb ist Δm in (2.66) sinngemäß die typische Breite der m-Verteilung derjenigen m-Werte, welche zur betreffenden fortlaufenden Welle beitragen. Die Breite $\Delta \phi$ beschreibt (entsprechend $\phi = s/r_0$) die räumliche Ausdehnung (Δs) des Wellenpakets im Abstand r_0 ; sinngemäß ist $\Delta \phi \leq 2\pi$. Für eine Welle mit fester azimutaler Wellenzahl ($\Delta m = 0$) hat nach (2.66) $\Delta \phi$ den Maximalwert, also $\Delta \phi = 2\pi$; ist dagegen das Wellenpaket im Azimutwinkel scharf lokalisiert ($\Delta \phi \to 0$), muss $\Delta m \gg 1$ gelten.

2.3.2 Energie und Zeit

Die Planck-Einstein-Beziehung (2.10) verknüpft die Energie (E), beispielsweise eines Photons, mit der Frequenz (ω) des entsprechenden (monochromatischen) elektromagnetischen Feldes. Ein allgemeines klassisches Wellenpaket ist bestimmt durch ein *Spektrum von Frequenzen* ω , dessen Verteilung etwa durch einen Mittelwert $(\overline{\omega})$ und eine typische spektrale Breite $\Delta \omega$ charakterisiert werden kann. Die Relation (2.10) legt nahe, dem entsprechenden Quanton (dem Photon) ein *Spektrum von Energien E* zuzuschreiben, dessen Verteilung durch die Breite

$$\Delta E = \hbar \,\Delta\omega \tag{2.67}$$

charakterisiert ist. Wir setzen $\Delta \omega$ aus (2.67) in der zeitlichen spektralen Ungleichung (2.59) ein und erhalten

$$\Delta E \cdot \Delta t \stackrel{>}{\sim} \hbar \qquad (2.68)$$

Die Formel (2.68) ist die Heisenbergsche Ungleichung in Energie und Zeit, welche fundamentale Eigenschaften der Quantenphysik beschreibt. Zu unserer Herleitung der Ungleichung (2.68) ist zu bemerken, dass sie ein heuristisches Element enthält: Wir haben angenommen, dass die zeitliche spektrale Ungleichung, die wir für *klassische* Wellen diskutiert haben, auch im Quantenbereich ihre Gültigkeit beibehält.

Wir wollen die Bedeutung der Heisenbergschen Ungleichung (2.68) an einer konkreten physikalischen Situation erläutern. Wir führen zwei Experimente aus an einem angeregten Zustand a eines Atomkerns, der durch γ -Emission in den Grundzustand g übergeht (Abb. 2.22(a)).



Abb. 2.22. Angeregter Zustand *a* eines Atomkerns. (a) Erzeugung und Zerfall; (b) Energiemessung (Mössbauer-Effekt); (c) Zeitmessung

Im 1. Experiment verwenden wir eine radioaktive Quelle, die eine sehr große Zahl von Atomkernen enthält, welche sich in einem langlebigen angeregten Zustand q befinden (Abb. 2.22(a)). Der Zustand q (Lebensdauer $\tau_q \gg \tau_a$) geht durch spontane Emission eines γ -Quants γ_1 in den angeregten Zustand a über, welcher seinerseits durch Emission von γ_2 in den Grundzustand zerfällt.

1. Experiment: Zeitmessung

Die experimentelle Anordnung ist in Abb. 2.23 skizziert.



Abb. 2.23. Zeitmessung; experimentelle Anordnung

Die radioaktive Quelle (Q) befindet sich zwischen zwei NaI(Tl)-Szintillationsdetektoren 1 und 2, wie wir sie schon beim Experiment zum Compton-Effekt (Abschn. 2.2.2) verwendet hatten. Der Detektor **1** misst γ_1 und erzeugt ein kurzzeitiges "Startsignal" (Spannungsimpuls), das die Bildung eines Zustandes a signalisiert (zur Zeit t_1). Detektor **2** misst ein anschließend emittiertes Quant γ_2 (Zeit t_2) und erzeugt ein kurzzeitiges "Stoppsignal". Dieses signalisiert den entsprechenden Zerfall des angeregten Zustandes a in den Grundzustand q. Das Startsignal setzt im TAC ("Time-to-Amplitude-Converter") eine Uhr (Oszillator) in Bewegung, welche durch das Stoppsignal wieder abgestellt wird. Der TAC erzeugt dann ein Histogramm; die Amplitude jedes Ereignisses ist proportional zur Anzahl der Oszillationen und damit zur Zeitdifferenz zwischen Stopp- und Startsignal. (Das schnelle Ausgangssignal der NaI(Tl)-Detektoren wird aus den ersten Photoelektronen gebildet, welche die Photokathode des Photomultipliers verlassen; es entspricht somit dem Zeitpunkt der Wechselwirkung des γ -Quants im NaI-Kristall.) In diesem Experiment messen wir also die Häufigkeitsverteilung der Zeitdifferenzen $t = t_2 - t_1$ der schnellen Signale, d.h. die Zerfallshäufigkeit des angeregten Zustandes a.

Man findet die in Abb. 2.22(c) dargestellte (mittlere) Verteilungsfunktion

$$Z(t) = Konstante \times e^{-t/\tau} \quad ; \quad t = t_2 - t_1 \tag{2.69}$$

Der Parameter τ in (2.69) heißt *mittlere Lebensdauer* des Zustandes *a*. Experimentell findet man *statistische Schwankungen* um die mittlere Verteilungsfunktion (2.69) – ein Charakteristikum aller Messungen an radioaktiven Quellen (siehe z.B. Abb. 2.30).

Die Exponentialfunktion (2.69) können wir folgendermaßen erklären. Das Grundgesetz des radioaktiven Zerfalls besagt, dass die Zerfallswahrscheinlichkeit eines Systems in einem festen Zeitintervall Δt unabhängig von der Zeit ist. Wir betrachten einen Atomkern im Zustand *a* zur Zeit t = 0. Sei λ die mittlere Zerfallswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit (genannt Zerfallskonstan-

65

te) des Atomkerns im Zustand a und P(t) die Wahrscheinlichkeit, dass der Zustand z. Zt. t noch lebt. Dann besagt das radioaktive Zerfallsgesetz

$$dP(t) = -P(t)\lambda \, dt \quad : \tag{2.70}$$

Die Abnahme der Wahrscheinlichkeit P(t) im Zeitintervall dt ist gleich dem Produkt aus P(t), λ und dt. Die Lösung der Differentialgleichung (2.70) mit der Anfangsbedingung P(0) = 1 lautet

$$P(t) = e^{-\lambda t} \quad . \tag{2.71}$$

Die Zerfallshäufigkeit (2.69) ist proportional zur Wahrscheinlichkeit (2.71). Somit ist die Zerfallskonstante λ mit der mittleren Lebensdauer τ verknüpft durch die Relation

$$\lambda = 1/\tau \quad . \tag{2.72}$$

Man überzeugt sich leicht (siehe Aufgabe 20), dass für eine exponentielle Verteilungsfunktion sowohl der Mittelwert $\langle t \rangle$ als auch die spektrale Breite

$$\Delta t \equiv \sqrt{\langle (t - \langle t \rangle)^2 \rangle} \tag{2.73}$$

gleich der mittleren Lebensdauer τ ist. Somit folgt aus der Heisenbergschen Ungleichung (2.68)

$$\Delta E \cdot \tau \stackrel{>}{\sim} \hbar \quad . \tag{2.74}$$

Für jeden Zustand (irgendeines Systems!), der eine feste Energie hat ($\Delta E = 0$), folgt aus (2.74)

$$\tau \to \infty$$
 , (2.75)

d. h. der Zustand ist stationär. Wir schließen daraus:

Jeder Zustand fester Energie ist stationär⁷.

Das 2. Experiment am angeregten Zustand *a* des Atomkerns (Abb. 2.22) soll eine *Energiemessung* sein. Es gibt die interessante Möglichkeit, die Energieänderungen von γ -Quanten von typisch 20 keV (1 keV = 10^3 eV) mit Genauigkeiten von der Größenordnung ~ $10^{-8} \text{ eV}(!)$ zu messen, indem man den von *Rudolf Mössbauer* 1958 (in seiner Dissertation) entdeckten und nach ihm benannten Effekt heranzieht. Wir werden in diesem und im Abschn. 2.3.4 je ein Demonstrationsexperiment zum Mössbauer-Effekt vorführen und geben deshalb hier eine Darstellung des Phänomens.

Der Mössbauer-Effekt

Wir nehmen zunächst an, die radioaktive Quelle, in welcher der angeregte Zustand a erzeugt wird (Abb. 2.22(a)), bestehe aus *freien* Atomkernen (ohne elektronische oder kristalline Umgebung), und fragen: Wie groß ist die beim

⁷ Es gilt auch die Umkehrung; vgl. (2.96).

67



Abb. 2.24. γ -Emission am freien Atomkern. (a) Anfangszustand; (b) Endzustand

Übergang in den Grundzustand g emittierte Energie E_{γ} des γ -Quants, falls der Atomkern unmittelbar vor der γ -Emission den Impuls **p** hat (Abb. 2.24)?

Wir formulieren Impuls- und Energieerhaltung bezüglich des Zustandes unmittelbar nach der γ -Emission (Endzustand; Abb. 2.24(b)). Die Impulserhaltung verlangt

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}' + \mathbf{p}_{\gamma} \quad , \tag{2.76}$$

wobei \mathbf{p}' der Impuls des Atomkerns und \mathbf{p}_{γ} derjenige des γ -Quants im Endzustand ist. Die Energieerhaltung verlangt

$$E_a + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = E_g + \frac{\mathbf{p}'^2}{2m} + E_\gamma$$
 (2.77)

Hier bedeutet E_a die Energie im Ruhesystem des Atomkerns, falls sich dieser im angeregten Zustand *a* befindet, und E_g die entsprechende Energie des Grundzustandes g; m ist die Masse des Atomkerns im Grundzustand. (Es stellt sich heraus, dass wir im vorliegenden Problem die nicht-relativistischen Ausdrücke für die kinetischen Energien der Atomkerne in (2.77) verwenden dürfen.) Wir eliminieren \mathbf{p}' aus den Gleichungen (2.76) und (2.77) und finden

$$E_a + \frac{p^2}{2m} = E_g + \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{p}_{\gamma})^2}{2m} + E_{\gamma} \quad .$$
 (2.78)

Mit $p_{\gamma} = |\mathbf{p}_{\gamma}| = E_{\gamma}/c$ erhalten wir aus (2.78)

$$E_{\gamma} = (E_a - E_g) - \frac{E_{\gamma}^{2}}{2mc^{2}} + E_{\gamma} \frac{v}{c} \cos \theta \quad , \qquad (2.79)$$

wobei θ der Winkel zwischen \mathbf{p}_{γ} und \mathbf{p} ist (Abb. 2.24) und v die Geschwindigkeit des Atomkerns im Anfangszustand. Da sowohl $E_{\gamma}/mc^2 \ll 1$ als auch $v/c \ll 1$, sind die letzten zwei Terme in (2.79) kleine Korrekturen zu E_{γ} . Der Term $E_{\gamma}^{2}/2mc^{2}$ heißt Rückstoßenergie und $E_{\gamma}(v/c)\cos\theta$ ist der Dopplereffekt. Die Energie E_{γ} des γ -Quants ist also nach (2.79) (für $v \ll c$) dominiert durch die Anregungsenergie $(E_{a} - E_{g})$ des Atomkerns.

Wir stellen nun die Frage: Können wir mit dem im Emissionsprozess der Abb. 2.24 entstandenen γ -Quant den Prozess der *Kernresonanzfluoreszenz* auslösen? Die Resonanzfluoreszenzreaktion ist in Abb. 2.25 dargestellt.



Abb. 2.25. Kernresonanzstreuung. 1 Anfangszustand; 2 Zwischenzustand; 3 Endzustand

Wir "bestrahlen" mit dem γ -Quant einen identischen Atomkern eines Absorbers (A), der sich im Grundzustand befindet. Kann das γ -Quant von diesem Atomkern absorbiert werden (Prozess $1 \rightarrow 2$ in Abb. 2.25)? Anschließend würde der Atomkern wieder spontan ein γ -Quant (γ') emittieren (Prozess $2 \rightarrow 3$ in Abb. 2.25). Die Antwort auf die Frage lautet: Im Allgemeinen findet der Prozess der Kernresonanzfluoreszenz nicht statt, weil die Resonanzbedingung in der Energie, als Folge der Rückstoßenergie und des Dopplereffekts, nicht erfüllt ist. Für v = 0 in (2.79), d.h. für $\mathbf{p} = 0$ des emittierenden Atomkerns (Abb. 2.24) ist die Energie E_{γ} zu klein – wegen der Rückstoßenergie –, um die Resonanzbedingung zu erfüllen. (In diesem Fall fehlt die *doppelte* Rückstoßenergie, denn beim Absorptionsprozess $1 \rightarrow$ 2 (Abb. 2.25) entsteht wiederum Rückstoßenergie, die durch die Energie E_{γ} des einlaufenden Quants zusätzlich aufgebracht werden muss.) Eine Möglichkeit, den Prozess der Kernresonanzfluoreszenz auszulösen, besteht darin, dem Atomkern der Quelle $k \ddot{u} nst lich$ eine sehr hohe Geschwindikeit v in Richtung der γ -Emission ($\theta = 0$ in Abb. 2.24) zu erteilen, um damit die Resonanzbedingung zu erfüllen⁸. Nach (2.79) bedeutet dies

$$\frac{v}{c} = \frac{E_{\gamma}}{mc^2} \quad . \tag{2.80}$$

Diese Methode wurde experimentell beispielsweise dadurch realisiert, dass man die Quelle auf der Peripherie einer Ultrazentrifuge montiert hat und die tangential zur Zentrifuge emittierten γ -Quanten ausnutzte.

Eine viel elegantere Methode besteht darin, dafür zu sorgen, dass die Masse m in (2.79) "unendlich" wird, um *damit* den Effekt der Rückstoßenergie zum Verschwinden zu bringen. – Das ist die Methode des *Mössbauer-Effekts*! Mössbauer hat gefunden, dass für ein in einem Kristall eingebautes Atom⁹ unter gewissen Bedingungen die γ -Emission ohne Änderung des Kristallzustandes erfolgt. Für solche γ -Zerfälle (genannt Mössbauer-Effekt) wird der

⁸ Im Resonanzfluoreszenzprozess der Atome (Abschn. 1.4) ist die Rückstoßenergie vollkommen vernachlässigbar.

 $^{^9}$ Die Elektronen des Atoms sind am Mössbauer-Effekt nicht beteiligt.

Rückstoß nicht mehr vom Atom, sondern vom ganzen Kristall aufgenommen. Das bedeutet, dass m in (2.79) durch die Masse des ganzen Kristalls ersetzt werden muss ($m_{Atom} \rightarrow M_{Kristall}$) und damit wird die Rückstoßenergie vollkommen vernachlässigbar. Dasselbe Phänomen kann auch bei der Absorption auftreten (Prozess $\mathbf{1} \rightarrow \mathbf{2}$ in Abb. 2.25); wir sprechen von Mössbauer-*Emission*, bzw. Mössbauer-*Absorption*.

Welche Bedingungen müssen erfüllt sein, damit der Mössbauer-Effekt auftritt? Wir geben hier eine stark vereinfachte Theorie des Mössbauer-Effekts auf der Basis des Einstein-Modells der Gitterschwingungen [siehe z.B. KP-2-14.3]. Das radioaktive Atom einer Mössbauer-Quelle sei als linearer Oszillator an den entsprechenden Gitterplatz im Kristall gebunden (Abb. 2.26).



Abb. 2.26. Radioaktives Atom im Kristallgitter

Wir betrachten γ -Quanten, die in einer festen Richtung emittiert werden. Das Atom verhält sich bezüglich dieser Richtung als linearer, harmonischer Oszillator der Eigenfrequenz $\omega_0 = \sqrt{f/m_{Atom}}$, wobei f die Federkonstante einer (fiktiven) Kopplung ist. *Planck* hat gefunden (Abschn. 1.2), dass die Energiezustände des harmonischen Oszillators äquidistante Energieniveaus haben, deren Abstand gegeben ist durch

$$\Delta E = \hbar \omega_0 \quad . \tag{2.81}$$

Die Temperatur des Kristalls sei so tief, dass die Bedingung

$$kT \ll \hbar\omega_0 \tag{2.82}$$

(k: Boltzmannsche Konstante) erfüllt ist. Unter dieser Bedingung befinden sich die Atome des Kristalls vorwiegend im Grundzustand der Oszillatoren. Ferner nehmen wir an, die Zerfallsenergie $(E_a - E_g)$ sei so klein, dass die freie Rückstoßenergie

$$\frac{E_{\gamma}^2}{2mc^2} \ll \hbar \omega_0 \quad ; \quad m = m_{Atom} \quad . \tag{2.83}$$



Abb. 2.27. Energiemessung mit Mössbauer-Absorption; Anordnung des Demonstrationsexperiments

Unter der Bedingung (2.83) kann man erwarten, dass das radioaktive Atom nach der γ -Emission im Grundzustand des Oszillators verharrt (der Rückstoß ist zu klein, um das Atom in einen angeregten Zustand zu befördern). Deshalb bleibt der *Kristallzustand unverändert* und der Rückstoß wird vom ganzen Kristall aufgenommen. Entsprechendes gilt natürlich auch für den Prozess der Mössbauer-*Absorption* (Abb. 2.25). Unsere einfachen Überlegungen zeigen, dass der Mössbauer-Effekt groß sein sollte, falls:

- ω_0 groß (harte Bindung der Atome im Kristall);
- T klein (kleine freie thermische Energie);
- E_{γ} klein (kleine Rückstoßenergie);
- m_{Atom} groß (kleine freie Rückstoßenergie).

Die experimentellen Ergebnisse bestätigen diese Resultate¹⁰.

2. Experiment: Energiemessung

Nun haben wir das Rüstzeug, um das 2. Experiment am angeregten Zustand *a* (Abb. 2.22(b)) in Angriff zu nehmen. Zunächst erklären wir das *Prinzip* des Experiments anhand der Abb. 2.27.

Wir verwenden eine Mössbauer-Quelle (MQ), d.h. wir setzen voraus, dass die Bedingungen (2.82) und (2.83) soweit erfüllt sind, dass ein signifikanter Teil der spontanen γ -Emission "rückstoßfrei" erfolgt (die Bezeichnung γ entspricht γ_2 der Abb. 2.22(a)). Ferner verwenden wir einen Mössbauer-Absorber (MA), den wir zwischen die Quelle und einen NaI(Tl)- γ -Detektor plazieren (Abb. 2.27). Der Absorber besteht aus denselben Atomkernen im

¹⁰ Für mehr Einzelheiten zum Mössbauer-Effekt verweisen wir auf G.K. Wertheim, Mössbauer-Effekt: Principles and Applications, Academic Press (1965).

Grundzustand, wobei wiederum die Bedingungen (2.82) und (2.83) soweit erfüllt sind, dass ein signifikanter Teil der auf den Absorber auftreffenden γ -Quanten "Mössbauer-Streuung" (MS) auslöst. Der Zähler misst die Anzahl der in einer festen Messzeit im NaI(Tl)-Detektor registrierten γ -Quanten (Transmissionshäufigkeit). Das Experiment besteht nun darin, die *Transmis*sionshäufigkeit als Funktion der Geschwindigkeit v der Mössbauer-Quelle (in Richtung des Detektors) zu messen. Mit der Geschwindigkeit v variieren wir, mittels Dopplereffekt (siehe (2.79)), die Energie des γ -Quants (massenunabhängig) um

$$\Delta E_D = \hbar \omega_0 \frac{v}{c} \quad , \tag{2.84}$$

wobei $\hbar\omega_0$ die mittlere Anregungsenergie $(E_a - E_q)$ darstellt.

Die *Mössbauer-Quelle* im nachfolgenden Demonstrationsexperiment besteht aus den Atomkernen $^{57}_{27}$ Co, welche durch den Prozess des Elektroneneinfangs (EC: "Electron Capture"; siehe Abb. 2.28)

$$e^{-} + {}^{57}_{27}\text{Co} \to {}^{57}_{26}\text{Fe}^{*} + \nu_{e}$$
 (2.85)

in einen angeregten Zustand (Anregungsenergie 137 keV) von $\frac{56}{27}$ Fe übergehen. Das Elektron (e^-) in (2.85) ist ein im Coulomb-Feld des Kerns $\frac{57}{27}$ Co stark gebundenes Elektron der Atomhülle, ein sog. K-Elektron, das den Kern stark durchdringt. (Der Elektroneneinfang ist ein Prozess der schwachen Wechselwirkung: Elektron + Proton \rightarrow Neutron + Neutrino.) Der angeregte Zustand von 57 Fe zerfällt unter Emission eines γ -Quants von 123 keV in den angeregten Zustand von 14.4 keV, welcher mit einer mittleren Lebensdauer von $\tau_a = 1.4 \times 10^{-7}$ s in den Grundzustand übergeht. Die 57 Co-Atome sind in einem Rhodiumkristall implantiert.

Der *Mössbauer-Absorber* ist eine Folie aus Edelstahl, deren Eisenatome teilweise (etwa zu 2%) aus dem Isotop ${}^{57}_{26}$ Fe bestehen.



Abb. 2.28. Zerfallsschema von ⁵⁷Co

Demonstrationsexperiment 8: Mössbauer-Effekt I. Die Mössbauer-Quelle ist auf einer in Detektorrichtung vibrierenden Lautsprechermembran montiert (Abb. 2.27). Die Membran wird periodisch bewegt (Periode $T \approx 1$ s), beispielsweise in Parabelbogen (Abb. 2.29), sodass eine sägezahnförmige, lineare Geschwindigkeitsverteilung v(t) resultiert. Für Messzeiten, die viel größer sind als T, kommen alle Geschwindigkeitswerte gleich häufig vor. Der Zeitpunkt eines im Detektor registrierten γ -Quants von 14 keV (z.B. relativ zum Periodenanfang der Schwingung) bestimmt dann die entsprechende momentane Geschwindigkeit v der Quelle und damit die exakte Energie des γ -Quants. In einem Vielkanalanalysator wird die Häufigkeit der Ereignisse, als Funktion von v, in Form eines Histogramms dargestellt. Dieses Histogramm entspricht der Transmissionshäufigkeit der γ -Quanten als Funktion ihrer Energie (auch "Mössbauer-Absorptionsspektrum" genannt).

Nach einer Messzeit von ca. 10 Minuten wird das in Abb. 2.30 dargestellte Mössbauer-Absorptionsspektrum gemessen.



Abb. 2.29. Bewegung (s) und Geschwindigkeit (v) der Mössbauer-Quelle

Aus dem Spektrum der Abb. 2.30 (siehe auch Abb. 2.22(b)) ziehen wir folgende Schlüsse. Bei $v \approx 0$ misst man die kleinste Transmissionsrate: Die Mössbauer-Streuung (MS in Abb. 2.27) ist maximal, weil hier die Resonanzbedingung exakt erfüllt ist. Für genügend große Beträge der Geschwindigkeiten ist die Transmissionsrate konstant; in diesem Bereich findet offenbar keine Mössbauer-Streuung mehr statt, weil die Resonanzbedingung energetisch verletzt ist. Die erstaunliche Beobachtung ist die, dass das Absorptionsspektrum der Abb. 2.30 eine endliche Breite aufweist ($v_M \neq 0$). Wir werden immer wieder sehen, dass bei Energiemessungen von γ -Quanten für jedes



Abb. 2.30. Mössbauer-Absorptionsspektrum des Demonstrationsexperiments

individuell gemessene γ -Quantum ein scharfer – der Genauigkeit des Messgeräts entsprechender – Energiewert gefunden wird. In unserem Fall sind die Energiewerte aber nicht für alle 14.4 keV-Quanten exakt gleich groß, so dass wir ein Energie*spektrum* messen. Wegen der Energieerhaltung für den Einzelprozess der Emission (Abb. 2.28) bedeutet dies, dass auch der *angeregte* Zustand a von ⁵⁷Fe ein Spektrum von Energien aufweisen muss. (Dasselbe gilt für den angeregten Zustand a im Absorber (Abb. 2.25).)

Wir können das gemessene Mössbauer-Absorptionsspektrum (Abb. 2.30) im Detail folgendermaßen verstehen. Wir betrachten zunächst eine feste Energie E_{γ} des γ -Quants, das auf den Absorber auftrifft und fragen nach dem Wirkungsquerschnitt für Mössbauer-Absorption (Prozess $\mathbf{1} \rightarrow \mathbf{2}$ in Abb. 2.25), als Funktion der Energie E_{γ} . Man findet:

$$\sigma_{MA}(E_{\gamma}) = \sigma_0 \, \frac{(\Gamma/2)^2}{(E_{\gamma} - \hbar\omega_0)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad . \tag{2.86}$$

(Herleitung nach der klassischen Theorie im Abschn. 6.1.2.) Der Wirkungsquerschnitt (2.86) als Funktion von E_{γ} ist eine Lorentz-Verteilung, deren Breite auf halber Höhe den Wert des Parameters Γ hat. Im Mössbauer-Experiment (Abb. 2.27) haben die von der Mössbauer-Quelle emittierten γ -Quanten eine kontinuierliche Energieverteilung $N_{MQ}(E_{\gamma})$, die wiederum durch eine Lorentz-Verteilung gegeben ist (Herleitung Abschn. 6.1.1):

$$N_{MQ}(E_{\gamma}) \propto \frac{(\Gamma/2)^2}{(E_{\gamma} - \hbar\omega_0)^2 + (\Gamma/2)^2}$$
 (2.87)

Der Breitenparameter Γ des Emissionsspektrums (2.87) ist theoretisch identisch mit dem Parameter des Absorptionsspektrums (2.86); Γ charakterisiert die spektrale Energiebreite des angeregten Zustandes a und heißt natürliche Linienbreite. Sie ist definiert als die Breite der Energieverteilung auf halber Höhe des Maximalwerts. Durch eine Faltung des Emissionsspektrums $N_{MQ}(E_{\gamma})$ mit dem Wirkungsquerschnitt $\sigma_{MA}(E_{\gamma})$ erhalten wir schließlich die theoretische Form $N_{MA}(v)$ des Mössbauer-Absorptionsspektrums (vgl. Aufgabe 17). Die Faltung zweier Lorentz-Kurven ist wiederum eine Lorentz-Kurve, deren Breite gleich der Summe der Breiten der einzelnen Lorentz-Verteilungen ist. In unserem Fall ist also das Mössbauer-Absorptionsspektrum eine Lorentz-Verteilung, deren Breite wir charakterisieren wollen durch die Geschwindigkeit v_M (Abb. 2.22(b) und Abb. 2.30): v_M ist die halbe Breite auf halber "Höhe" der (negativen) Resonanzkurve. Für die Geschwindigkeit v_M der Mössbauer-Quelle ist nach (2.84) die Energieverschiebung der einlaufenden γ -Quanten durch Dopplereffekt

$$\Delta E_D = \hbar \omega_0 \frac{v_M}{c} \quad , \tag{2.88}$$

wobei $\hbar\omega_0$ die mittlere Zerfallsenergie ist (es ist immer $\Delta E_D \ll \hbar\omega_0$). Wegen der Verbreiterung durch die Faltung entspricht die Energie (2.88) der natürlichen Linienbreite Γ , also gilt

$$\hbar\omega_0 \frac{v_M}{c} = \Gamma \quad . \tag{2.89}$$

Das 2. Experiment liefert somit (im Prinzip) eine Messung der natürlichen Linienbreite Γ .

Die Energie-Zeit-Relation

Mit diesen Erkenntnissen kehren wir zurück zur Heisenbergschen Ungleichung (2.68), die wir bereits mit Hilfe der Zeitmessung (1. Experiment) in die Form (2.74) gebracht hatten:

$$\Delta E \cdot \tau \stackrel{>}{\sim} \hbar \quad . \tag{2.90}$$

Hier ist τ die mittlere Lebensdauer des angeregten Zustandes. In unserer Situation eines metastabilen angeregten Zustandes *a* können wir der spektralen Energiebreite ΔE in (2.90) eine präzise Bedeutung geben; wir müssen sie identifizieren mit der natürlichen Linienbreite Γ (vgl. Aufgabe 17). Wir können die Ungleichung (2.90) in diesem Fall sogar als Gleichung formulieren. Es zeigt sich nämlich – experimentell *und* theoretisch – dass die natürliche Linienbreite Γ und die mittlere Lebensdauer τ *irgendeines* metastabilen Zustandes eines (beliebigen) Systems verknüpft sind durch die Relation

$$\Gamma \cdot \tau = \hbar \tag{2.91}$$

– falls das System sich selber überlassen ist, d. h. genügend isoliert ist von seiner materiellen Umgebung. Wir nennen (2.91) die *Energie-Zeit-Relation*;

sie gilt nicht nur für den Zerfallsprozess der spontanen γ -Emission, sondern für *beliebige* quantenphysikalische Umwandlungen.

Es drängt sich auf, die Relation (2.91) mit Hilfe unserer beiden Experimente zu prüfen. Ein γ - γ -Koinzidenzexperiment (Abb. 2.23) liefert die mittlere Lebensdauer des 14.4 keV-Zustandes von ⁵⁶Fe (Abb. 2.28)

$$\tau_a = 1.4 \times 10^{-7} \,\mathrm{s}$$
 (2.92)

Aus (2.92) folgt mit (2.91) die natürliche Linienbreite

$$\Gamma = \frac{1.05 \times 10^{-34}}{1.4 \times 10^{-7}} = 7.5 \times 10^{-28} \,\mathrm{J} = 4.7 \times 10^{-9} \,\mathrm{eV} \quad . \tag{2.93}$$

Andererseits entnehmen wir der Messung von Abb. 2.30 die Geschwindigkeit bei halber Tiefe der Resonanzlinie

$$v_M \approx 0.27 \,\mathrm{mm/s} \quad . \tag{2.94}$$

Mit (2.94) folgt aus (2.89)

$$\Gamma \approx 13 \times 10^{-9} \,\mathrm{eV}$$
 . (2.95)

Der Wert (2.95) ist offensichtlich zu groß, verglichen mit der natürlichen Linienbreite (2.93).

Der Grund dafür, dass ein Mössbauer-Experiment eine "verbreiterte" Absorptionslinie liefert (Abb. 2.30), ist darin zu suchen, dass entweder in der Mössbauer-Quelle oder im Mössbauer-Absorber (oder in beiden) eine Wechselwirkung vorliegt (zusätzlich zur Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld; *Kap. 6*), welche eine Energieänderung der Atomkernzustände bewirkt. Es handelt sich um die sog. *Hyperfeinwechselwirkung*: Die Elektronen der Atomhülle erzeugen elektromagnetische Felder am Ort des Kerns, welche die Energien der Kernzustände (*a* und *g* in Abb. 2.22) aufspalten oder verschieben. Die Hüllenelektronen werden durch die umliegenden Atome des Kristalls beeinflusst, so dass auch die Kristallfelder indirekt auf die Energien der Kernzustände einwirken. Im vorliegenden Fall sind es hauptsächlich die unterschiedlichen Kristallumgebungen der einzelnen ⁵⁷Fe-Atome im Edelstahl-Absorber, welche Energieverschiebungen für die einzelnen Kerne zur Folge haben. Daraus resultiert die zusätzliche Verbreiterung der Absorptionslinie.

Eine wichtige Folgerung aus der Energie-Zeit-Relation (2.91) betrifft die **Stationarität**:

Ein quantenphysikalisches System ist genau dann stationär $(\tau \to \infty)$, wenn seine Energie einen scharfen Wert hat $(\Gamma \to 0)$.

(2.96)

Die Delta-Resonanz

Die Energie-Zeit-Relation (2.91) ist von großer Bedeutung in praktisch allen Bereichen der Physik. Wir diskutieren ein zusätzliches Beispiel aus der Teilchenphysik.

Lenken wir einen Strahl von Pionen geeigneter Energie auf Materie, dann bildet sich aus einem Pion (π) und einem Nukleon (N: Proton (p) oder Neutron (n)) ein instabiles Teilchen, das Delta (Δ), welches nach sehr kurzer Zeit ($\sim 10^{-23}$ s!) wieder in ein Nukleon (N') und ein Pion (π') zerfällt:

$$\pi + N \to \Delta \to N' + \pi'$$
 . (2.97)

Das Pion kommt in drei Zuständen elektrischer Ladung vor (π^+, π^0, π^-) , das Nukleon in zwei (p, n) und das Delta hat vier Ladungszustände $(\Delta^{++}, \Delta^+, \Delta^0, \Delta^-)$. In jedem Teilschritt der Reaktion (2.97) muss die elektrische Ladung erhalten sein, z. B. ist $\pi^- + p \rightarrow \Delta^0 \rightarrow n + \pi^0$ ein möglicher Prozess.

Die Reaktion (2.97) hat genau die Struktur der Kernresonanzfluoreszenzreaktion der Abb. 2.25: Die Pionen spielen die Rolle der γ -Quanten, das Nukleon entspricht dem Kern im Grundzustand und das Delta ist der angeregte Zustand des Nukleons. Man bezeichnet den Prozess (2.97) deshalb auch als Anregung der Delta-Resonanz des Nukleons. Die geeignete Energie zur Auslösung der Reaktion (2.97) ist diejenige (totale) Energie, welche im Schwerpunktsystem von Pion und Nukleon gerade der Ruheenergie des Delta entspricht, $m_{\Delta}c^2 = 1232 \text{ MeV}$ (1 MeV = 10⁶ eV). Die Ruheenergie des Delta $m_{\Delta}c^2$ ist die mittlere Anregungsenergie (genant $\hbar\omega_0$ im Fall der Kernresonanzfluoreszenz). Die natürliche Linienbreite des Delta beträgt $\Gamma \approx 120 \text{ MeV}$ und daraus folgt die mittlere Lebensdauer $\tau = \hbar/\Gamma \approx 5.5 \times 10^{-24} \text{ s.}$

Experimentell untersucht man die Resonanzanregung des Nukleons, indem man beispielsweise positive Pionen (π^+) an Protonen streut und das Pion im Endzustand misst. In diesem Fall wird die Δ^{++} -Resonanz angeregt, die nur in (p, π^+) zerfallen kann:

$$\pi^+ + p \to \Delta^{++} \to p + \pi^+ \quad . \tag{2.98}$$

Wir bezeichnen den Gesamtprozess (2.98) auch als (π^+, p) elastische Streuung. Der gemessene totale Wirkungsquerschnitt der elastischen Streuung (2.98) ist in Abb. 2.31 dargestellt als Funktion der kinetischen Energie des Pions (im Laborsystem; untere Skala) bzw. der Gesamtenergie von Proton und π^+ im Schwerpunktsystem (obere Skala). Aus dieser Messung bestimmt man die Masse und und die natürliche Linienbreite des Δ^{++} .

Auf analoge Weise wurde die (π^-, p) Streuung (oder Resonanzanregung) untersucht:

$$\pi^{-} + p \to \Delta^{0} \to p + \pi^{-} \quad \text{oder}$$
$$\Delta^{0} \to n + \pi^{0} \quad . \tag{2.99}$$



Abb. 2.31. Wirkungsquerschnitt der elastischen π^+ -Protonstreuung als Funktion der kinetischen Energie T_{π^+} des Pions $(1 \text{ mb} = 10^{-27} \text{ cm}^2)$. $E(p, \pi^+)$: Energie im Schwerpunktsystem. [*D.H. Perkins*, Introduction to High Energy Physics, Addison-Wesley (1982), p. 145.] (Die Abweichung der Kurve von der Lorentz-Verteilung bei den höheren Energien wird durch zusätzliche Reaktionen verursacht)

In diesem Fall hat das Δ^0 zwei mögliche Zerfallskanäle, nämlich den elastischen Kanal (p, π^-) und den Ladungsaustauschkanal (n, π^0) . Aus experimentellen Gründen ist es zweckmäßig, den totalen Wirkungsquerschnitt der elastischen Reaktion (als Funktion der Energie des einlaufenden π^-) zu messen; es resultiert wieder eine Resonanzkurve ähnlich derjenigen der Abb. 2.31. Die Masse des Δ^0 ist praktisch gleich der Masse des Δ^{++} , sodass wir von einer mittleren Δ -Masse sprechen können: $m_{\Delta} = 1232 \,\mathrm{MeV}$.

Messung von Zeit und Energie

Wir verlassen die Energie-Zeit-Relation (2.91) und wenden uns der allgemeinen Heisenbergschen Ungleichung (2.68) zu. Als grundlegendes Beispiel betrachten wir wiederum den Mössbauer-Effekt von ⁵⁷Fe (Abb. 2.28), wobei nun aber eine kombinierte Zeit- *und* Energiemessung vorgenommen wird. Wir behandeln das Experiment von Wu und Mitarbeitern¹¹.

Das Demonstrationsexperiment (Abb. 2.27) war im Prinzip eine Vermessung der Energieverteilung des ersten angeregten Zustandes von 57 Fe, wobei das effektiv gemessene Mössbauer-Absorptionsspektrum (Abb. 2.30) eine Kombination (Faltung) der Energieverteilungen von Quelle und Absorber ist. In Abwesenheit von zusätzlichen Verbreiterungseffekten bestimmen wir

¹¹ C.S. Wu, Y.K. Lee, N. Benczer-Koller and P. Simms, Phys. Rev. Letters 5 (1960) 432.

aus dem Absorptionsspektrum die natürliche Linienbreite Γ des angeregten Zustandes. Aus diesem Experiment wissen wir nichts über die individuellen Lebenszeiten t der angeregten Zustände in der Mössbauer-Quelle. Wir können sagen: Das Experiment hat eine Zeitauflösung Δt , die größer ist als die mittlere Lebensdauer τ des angeregten Zustandes.

Das zitierte Experiment beantwortet nun die Frage: Hängt das Absorptionsspektrum von der Lebenszeit t der angeregten Zustände in der Mössbauer-Quelle ab? Mit anderen Worten: ist die Energieverteilung des angeregten Zustandes abhängig von der Lebenszeit t des Zustandes? Es handelt sich zunächst um ein Mössbauer-Absorptionsexperiment vom Typ der Abb. 2.27, wobei aber zusätzlich eine Auswahl der Ereignisse des Geschwindigkeitsspektrums getroffen wird: Man wählt diejenigen Ereignisse aus, für welche der angeregte Zustand der Quelle eine feste Zeit t gelebt hat. Diese Auswahl wird mittels eines zusätzlichen NaI(Tl)-Detektors getroffen, der das 123 keV γ -Quant misst (Abb. 2.28); das γ -Quant von 123 keV zeigt die Geburt des angeregten Zustandes von 14.4 keV an. Im Experiment von Wu und Mitarbeitern werden diejenigen Ereignisse ausgewählt, für welche das 14.4 keV-Detektorsignal (Abb. 2.29) mit dem um t verzögerten 123 keV-Signal in Koinzidenz ist. Die resultierenden Geschwindigkeitsspektren für drei verschiedene Lebenszeiten t des 14.4 keV-Zustandes sind in Abb. 2.32 dargestellt.



Abb. 2.32. Mössbauer-Absorptionsspektrum von 57 Fe für verschiedene mittlere Lebenszeiten \overline{t} des angeregten Zustandes

Das Absorptionsspektrum (a) entspricht Lebenszeiten 125 ns < t < 175ns $(1 \text{ ns} = 10^{-9} \text{ s})$; es ist ähnlich demjenigen der Abb. 2.30. Das Spektrum (b) entspricht Lebenszeiten 69 ns < t < 119 ns und das Spektrum (c) 10 ns< t < 60 ns. Aus der Abb. 2.32 ist klar ersichtlich, dass das Absorptionsspektrum abhängig ist von der Lebenszeit t, d. h. die Energieverteilung des angeregten Zustandes hängt ab von der Lebenszeit t des Zustandes! Das ist ein äußerst erstaunliches Resultat, denn es bedeutet, dass eine physikalische Eigenschaft des Systems (nämlich dessen Energie) durch das Experiment wesentlich bestimmt ist; es kommt darauf an, was (und ob etwas) zusätzlich gemessen wird.

Zunächst wollen wir zeigen, dass die Resultate der Abb. 2.32 im Einklang stehen mit der Heisenbergschen Ungleichung (2.68). Die charakteristische Zeit Δt bedeutet hier die mittlere Lebenszeit des angeregten Zustandes. Im 2. Experiment (Abb. 2.27) ist Δt gleich der mittleren Lebensdauer τ (= 140 ns) des 14.4 keV-Zustandes. Im Experiment (a) ist zwar die Zeitverteilung wesentlich verschieden von der Exponentialfunktion (2.69); die *mittlere* Lebenszeit \bar{t} ist aber praktisch gleich. Deshalb sind die Absorptionsspektren in Abb. 2.30 und Abb. 2.32(a) ähnlich. Die Eperimente (b) und (c) der Abb. 2.32 unterscheiden sich dadurch, dass die mittlere Lebenszeit "künstlich" *reduziert* ist gegenüber der mittleren Lebensdauer τ . Nach der Heisenbergschen Ungleichung können deshalb die entsprechenden spektralen Breiten ΔE der Energie größer sein als die natürliche Linienbreite Γ , und genau dieses wird im Experiment von Wu und Mitarbeitern beobachtet.

Das Beispiel zeigt, dass das Experiment in der Quantenphysik einen ganz anderen Stellenwert hat als in der klassischen Physik. In der klassischen Physik stellen wir uns objektive (von einer Messung unabhängige) Abläufe des Naturgeschehens vor: das Experiment dient lediglich dazu, diesen Ablauf festzuhalten. (Wir denken: Der Mond bleibt gleich, unabhängig davon, ob wir ihn anschauen oder nicht.) In der Quantenphysik sind wir gezwungen, diese uns vertraute Vorstellung aufzugeben, denn das Experiment, das in unserem Fall die mittlere Lebenszeit Δt des angeregten Zustandes festlegt, bestimmt offensichtlich die spektrale Energieverteilung des Zustandes. Wir können verallgemeinernd sagen: Das Experiment präpariert den Zustand des quantenphysikalischen Systems, dessen Eigenschaften gemessen werden. Es ist damit offensichtlich, dass das Experiment eine zentrale Rolle spielen muss in jeder umfassenden Darstellung der Quantenphysik. Da die klassische Physik als Grenzfall der Quantenphysik erscheint, werden hier grundlegende Fragen der physikalischen Erkenntnis und der physikalischen Realität berührt.

Wir fassen die fundamentalen Resultate dieses Abschnitts und die daraus folgenden, neuen Begriffsbildungen und Definitionen folgendermaßen zusammen.

- Die physikalische Größe (Observable) Energie¹² eines quantenphysikalischen Systems hat im allgemeinen ein Spektrum von Werten (Energieverteilung) – im krassen Gegensatz zur klassischen Mechanik.
- Ein Zustand fester Energie heißt *Eigenzustand der Energie* (E); der entsprechende Energiewert E heißt *Eigenwert der Energie*.
- Jeder Eigenzustand der Energie ist *stationär*. Beispiel: Der Grundzustand jedes (isolierten) Systems ist ein Eigenzustand der Energie und somit stationär.
- Wir können den Inhalt der Heisenbergschen Ungleichung in Energie und Zeit folgendermaßen formulieren. Hat ein System ein Spektrum von Energien mit einer typischen Breite ΔE der Energieverteilung, dann ändern sich seine Eigenschaften im Allgemeinen innerhalb der charakteristischen

Zeit $\Delta t \gtrsim \hbar/\Delta E$ we sentlich. Ein (prominentes) Beispiel dafür ist die spontane γ -Emission ($\Delta t = \tau = \hbar/\Gamma$): Die Eigenschaften von Anfangs- und Endzustand sind im Allgemeinen sehr verschieden; das System ändert sich also innerhalb der mittleren Lebensdauer τ we sentlich.

• Die spektrale Energieverteilung eines Systems ist abhängig vom *Experiment*, mit welchem die Energie gemessen wird; das konkrete Experiment *bedingt* (präpariert) den quantenphysikalischen Zustand, dessen Energie zu messen ist!

Der anhand der physikalischen Größe Energie hier eingeführte Zustandsbegriff wird in den folgenden Abschnitten und Kapiteln schrittweise erweitert und vertieft. Anhang C enthält die abstrakt-mathematische Darstellung des Zustandes eines quantenphysikalischen Systems.

2.3.3 Impuls und Ort

Genau so wie wir aus der Planck-Einstein-Beziehung und der zeitlichen spektralen Ungleichung die Heisenbergsche Ungleichung in Energie und Zeit (2.68) erhalten hatten, gewinnen wir aus der De-Broglie-Beziehung (2.16), kombiniert mit den räumlichen spektralen Ungleichungen (2.60), Heisenbergsche Ungleichungen im Impuls und Ort. Ausgangspunkt der Betrachtung ist wiederum ein allgemeines klassisches Wellenpaket, das durch ein Spektrum von Wellenvektoren $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ bestimmt ist. Die Verteilung der x-Komponenten k_x beispielsweise können wir charakterisieren durch einen Mittelwert ($\overline{k_x}$) und eine spektrale Breite Δk_x (definiert durch die mittlere quadratische Abweichung vom Mittelwert). Andererseits gilt für ein Quanton mit festem Impuls $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ die De-Broglie-Beziehung (2.16). In Komponenten geschrieben bedeutet (2.16) beispielsweise

¹² Wir bezeichnen im Folgenden das *Symbol* der physikalischen Größe (Observable) mit dem fettgedruckten Buchstaben, z.B. E für Energie. Die Vektorgrößen werden zusätzlich mit einem Pfeil versehen, z.B. $\vec{\mathbf{J}} = (J_x, J_y, J_z)$ für Drehimpuls. Die Symbole der physikalischen Vektorgrößen gehorchen den geometrischen Vektorrelationen.

$$p_x = \hbar k_x \quad , \tag{2.100}$$

wobei k_x eine entsprechende (klassische) Komponente des Wellenvektors ist. Die Beziehungen vom Typ (2.100) legen es nahe, dem Quanton in einem allgemeinen Zustand ein Spektrum von Impulskomponenten $\vec{\mathbf{p}} = (p_x, p_y, p_z)$ zuzuschreiben, wobei die spektralen Breiten der Impulskomponenten gegeben sind durch

$$\Delta p_x = \hbar \,\Delta k_x \quad ; \quad \Delta p_y = \hbar \,\Delta k_y \quad ; \quad \Delta p_z = \hbar \,\Delta k_z \quad . \tag{2.101}$$

Wir setzen die Relationen (2.101) in den räumlichen spektralen Ungleichungen (2.60) ein und erhalten die drei **Heisenbergschen Ungleichungen im** Impuls und Ort

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \stackrel{>}{\sim} \hbar \quad ; \quad \Delta p_y \cdot \Delta y \stackrel{>}{\sim} \hbar \quad ; \quad \Delta p_z \cdot \Delta z \stackrel{>}{\sim} \hbar \tag{2.102}$$

wobei $\vec{\mathbf{r}} = (x, y, z)$ der Ortsvektor für das Quanton ist. Im letzten Schritt wurde wiederum angenommen (wie schon im Fall der Heisenbergschen Ungleichung in Energie und Zeit), dass die (klassischen) spektralen Ungleichungen auch im Quantenbereich gültig bleiben.

Wir stellen einige generelle Bemerkungen und Verallgemeinerungen von Begriffen an den Anfang.

Die Ungleichungen (2.102) machen allgemeine Aussagen über die Komponenten des Impulses $\vec{\mathbf{p}}$ und über die Komponenten des Ortes $\vec{\mathbf{r}}$ eines Quantons. Alle Komponenten sind *Observable* (physikalische Größen), die wir in geeignet angelegten Experimenten messen können. Denken wir etwa an das CCD-Bild (Abb. 2.3), welches die Ortsmessung von Photonen zeigt. Genau so wie die Energie (Abschn. 2.3.2) haben Orts- und Impulskomponenten eines physikalischen Systems im Allgemeinen *ein Spektrum von Werten* (zu jeder festen Zeit *t*). Diese Verteilungen lassen sich charakterisieren durch *Mittelwert* und *spektrale Breite*. Im Folgenden bezeichnen wir den Mittelwert einer physikalischen Größe \mathbf{X} (in der Regel) mit $\langle X \rangle$ und die spektrale Breite mit $\Delta X \equiv \sqrt{\langle (x - \langle X \rangle)^2 \rangle}$.

Es gibt einen grundlegenden Unterschied zwischen der Heisenbergschen Ungleichung in Energie und Zeit (2.68) und den Ungleichungen im Impuls und Ort: Im Gegensatz zu Energie, Impuls und Ort ist die Zeit keine Observable. Die Zeit spielt in der Quantenphysik die Rolle eines Parameters (– wie in der klassischen Mechanik), welcher den zeitlichen Ablauf des Geschehens beschreibt; die Observablen sind im Allgemeinen Funktionen der Zeit.

Den Begriff des *Eigenzustandes* (Abschn. 2.3.2) verwenden wir für eine *beliebige* physikalische Größe (Observable). Hat die Observable X für ein System den festen Wert X ($\langle X \rangle = X$; $\langle \Delta X \rangle = 0$), dann sagen wir: Das System

ist in einem Eigenzustand bezüglich der Größe X und X heißt Eigenwert bezüglich der Größe X.

Wesentlich für alle Heisenbergschen Ungleichungen ist die Tatsache, dass für das entsprechende Produkt eine *untere Schranke* existiert, welche von der Größenordnung \hbar ist. Wir werden später (im Abschn. 4.2.3) die präzisen Schranken der Ungleichungen (2.102) angeben.

Nun wollen wir aus den Heisenbergschen Ungleichungen (2.102) eine Reihe von Schlussfolgerungen ziehen.

• Der Begriff des Massenpunkts, der das Grundkonzept der klassischen Mechanik ausmacht, hat in der Quantenmechanik keine Daseinsberechtigung mehr. Denn Massenpunkt bedeutet Lokalisierung ($\Delta \mathbf{r} = 0$) und gleichzeitig fester Impuls ($\Delta \mathbf{p} = 0$), was nach (2.102) ausgeschlossen ist. Dies bedeutet u.a., dass der Ausgangspunkt zum Bohrschen Atommodell (Abschn. 1.4), nämlich die Annahme einer lokalisierten Kreisbahn für das Elektron inkorrekt ist und deshalb aufgegeben werden muss. Die Orte

Elektron, inkorrekt ist und deshalb aufgegeben werden muss. Die Ortsund Impulskomponenten eines Quantons haben im Allgemeinen ein Spektrum von Werten; die Objekte sind delokalisiert sowohl im Ort als auch im Impuls. (Ein Modellfall ist eben das klassische Wellenpaket!)

- Aus der ersten Ungleichung (2.102) folgt: Es existiert kein Zustand irgendeines quantenphysikalischen Systems, der gleichzeitig Eigenzustand von p_x ($\Delta p_x = 0$) und x ($\Delta x = 0$) wäre; solche Größen nennen wir "unverträglich". Die Komponenten von $\vec{\mathbf{P}}$ und $\vec{\mathbf{r}}$, die zur gleichen Koordinatenachse gehören, sind unverträgliche physikalische Größen.
- Aus der ersten Ungleichung (2.102) folgt: Falls ein System in einem *Eigenzustand von* p_x ist ($\Delta p_x = 0$), dann gilt $\Delta x \to \infty$, d. h. das System ist vollständig delokalisiert in x. Umgekehrt kann ein System in einem *Eigenzustand von* x sein ($\Delta x = 0$; $\langle x \rangle = x_0$), d. h. das Quanton ist bei x_0 lokalisiert. Aus der ersten Ungleichung (2.102) folgt für diesen Fall $\Delta p_x \to \infty$, d.h. p_x -Werte im ganzen Bereich kommen vor (vollständige Delokalisierung in p_x). Entsprechendes gilt für die übrigen Komponenten von $\overrightarrow{\mathbf{P}}$ und $\overrightarrow{\mathbf{r}}$.

Wir werden später die Delokalisierung unverträglicher Größen genauer untersuchen; wesentlich ist hier, dass uns die Heisenbergschen Ungleichungen zwangsläufig und direkt auf die neuartigen Begriffe der Quantenphysik führen: Die Spektren der Observablen, Eigenzustände, unverträgliche Größen etc.

Wir können zeigen, dass auch für die Beträge des Impulses $p \equiv |\vec{\mathbf{p}}|$ und des Ortsvektors $r \equiv |\vec{\mathbf{r}}|$ eine Heisenbergsche Ungleichung gilt. Wir definieren die spektralen Breiten der Beträge durch die spektralen Breiten ihrer Komponenten als

$$\Delta p \equiv \sqrt{(\Delta p_x)^2 + (\Delta p_y)^2 + (\Delta p_z)^2}$$

$$\Delta r \equiv \sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2} \quad . \tag{2.103}$$

Aus (2.103) folgt

$$(\Delta p)^2 (\Delta x)^2 > (\Delta p_x)^2 (\Delta x)^2 + (\Delta p_y)^2 (\Delta y)^2 + (\Delta p_z)^2 (\Delta z)^2$$

$$\gtrsim 3\hbar^2 \quad , \tag{2.104}$$

wobei wir im letzten Schritt (2.102) verwendet haben. Aus (2.104) folgt

$$\Delta p \cdot \Delta r \stackrel{>}{\sim} \hbar \tag{2.105}$$

Die Heisenbergsche Ungleichung (2.105) sagt aus, dass die Beträge von \boldsymbol{p} und \boldsymbol{r} unverträgliche physikalische Größen sind, denn Δp und Δr können nicht gleichzeitig verschwinden. Im Bohrschen Atommodell beispielsweise ist für die Kreisbahn des Elektrons $\Delta r = 0$. Aus (2.105) folgt dann $\Delta p \to \infty$, d.h. der Impulsbetrag \boldsymbol{p} ist vollständig delokalisiert (alle Werte von p = 0 bis $p \to \infty$ kommen vor). Dasselbe gilt, falls wir die Elektronenbahn auf der Kugeloberfläche isotrop ausgeschmiert denken. Umgekehrt ist ein Eigenzustand von \boldsymbol{p} ($\Delta p = 0$) räumlich vollkommen delokalisiert ($\Delta r \to \infty$).

Wir wollen am **Beispiel** des Wasserstoffatoms zeigen, dass *die Stabilität der Materie*, d. h. die endliche Größe der Atome, als eine Folge der Heisenbergschen Ungleichung (2.105) angesehen werden kann.

Für *klassische* Kreisbahnen des Elektrons ist die totale Energie (Abschn. 1.4)

$$E = T + U = \frac{p^2}{2m} - \alpha \frac{\hbar c}{r} \quad . \tag{2.106}$$

(T, U sind die kinetische und potentielle Energie des Elektrons.) Es gilt die Beziehung (1.28)

$$\frac{p^2}{m} = \alpha \frac{\hbar c}{r} \quad . \tag{2.107}$$

Aus (2.106) folgt mit (2.107)

$$E = -\frac{p^2}{2m} = -\frac{\alpha}{2}\frac{\hbar c}{r} \quad . \tag{2.108}$$

Der *Grundzustand* ist der Zustand kleinster Energie. Klassisch folgt aus (2.108) für den Grundzustand $r \to 0$ bzw. $p \to \infty$: Das Atom fällt zusammen in einen Punkt am Ort des Protons.

Wir zeigen nun, dass die Heisenbergsche Ungleichung (2.105) diesen Kollaps verhindert und eine Abschätzung der Größe des Wasserstoffatoms liefert.

Da die Größen r und p im Allgemeinen ein Spektrum von Werten haben, müssen wir die entsprechenden Größen in (2.106) durch ihre Mittelwerte ersetzen:

83

$$E = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} - \alpha \frac{\hbar c}{\langle r \rangle} \quad . \tag{2.109}$$

Wir wollen zunächst die Behauptung

$$\langle p^2 \rangle = (\Delta p)^2 \tag{2.110}$$

beweisen. Es gilt

$$\langle p^2 \rangle = \langle p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \rangle = \langle p_x^2 \rangle + \langle p_y^2 \rangle + \langle p_z^2 \rangle \quad . \tag{2.111}$$

Die spektrale Breite Δp_x beispielsweise ist definiert als

$$\Delta p_x \equiv \sqrt{\langle (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \rangle} \quad . \tag{2.112}$$

Aus Symmetriegründen ist $\langle p_x \rangle = 0$, sodass aus (2.112) folgt

$$(\Delta p_x)^2 = \langle p_x^2 \rangle \quad etc. \tag{2.113}$$

Aus (2.111) folgt mit (2.113)

$$\langle p^2 \rangle = (\Delta p_x)^2 + (\Delta p_y)^2 + (\Delta p_z)^2 \quad ,$$
 (2.114)

und damit erhalten wir aus (2.103) die Behauptung (2.110).

Wir gehen davon aus, dass der Grundzustand durch kleine Werte r (r ist positiv) charakterisiert ist, in Analogie zum klassischen Fall. Dann können wir näherungsweise schreiben

$$\langle r \rangle \approx \Delta r$$
 . (2.115)

Schließlich schreiben wir (2.105) größenordnungsmäßig als

$$\Delta r \approx \frac{\hbar}{\Delta p} \quad . \tag{2.116}$$

Wir setzen nun (2.110) und (2.115), unter Berücksichtigung von (2.116), in (2.109) ein und erhalten

$$E(\Delta p) \approx \frac{(\Delta p)^2}{2m} - \alpha c \,\Delta p$$
 . (2.117)

Der Grundzustand ist charakterisiert durch ein Minimum des Ausdrucks (2.117) bezüglich Δp , d. h. durch

$$(\Delta p)_0 \approx \alpha mc$$
 . (2.118)

Aus (2.116) folgt damit

$$(\Delta r)_0 \approx \frac{\hbar}{(\Delta p)_0} = \frac{1}{\alpha} \frac{\hbar}{mc} = a_0 = 0.53 \times 10^{-10} \,\mathrm{m}$$
 (2.119)

Dieses Resultat stimmt zunächst überein mit denjenigen des Bohrschen Atommodells (1.42). Der Fortschritt liegt darin, dass (2.119) *ohne* die (inkorrekte) Lokalisierungsannahme des Bohrschen Modells gewonnen wurde. Die exakte quantenmechanische Behandlung des Wasserstoffatoms (Abschn. 5.2.7) wird das Resultat (2.119) bestätigen.

85

2.3.4 Drehimpuls und Winkel

Zum dritten Mal wollen wir eine Teilchen-Wellen-Symmetrierelation mit einer (klassischen) spektralen Ungleichung kombinieren, um daraus eine Heisenbergsche Ungleichung zu gewinnen. Wir betrachten das allgemeine klassische (skalare) Wellenpaket eines bezüglich einer z-Achse rotationssymmetrischen Problems, ausgedrückt durch die dem Problem angepassten Zylinderkoordinaten (r, ϕ, z) . Ein in ϕ -Richtung fortlaufendes Wellenpaket (z und r konstant) ist charakterisiert durch ein Spektrum von azimutalen Quantenzahlen m, dessen spektrale Breite Δm der azimutalen spektralen Ungleichung (2.66)

$$\Delta m \cdot \Delta \phi \stackrel{>}{\sim} 1 \tag{2.120}$$

gehorcht, wobei die Winkelbreite $\Delta \phi$ die räumliche Ausdehnung des Wellenpakets beschreibt ($\Delta \phi \leq 2\pi$). Andererseits gilt die Teilchen-Wellen-Symmetrierelation (2.33)

$$J_z = \hbar m \quad . \tag{2.121}$$

Damit ist es naheliegend, einem Quanton in einem allgemeinen Zustand ein Spektrum von Drehimpulswerten J_z zuzuschreiben, dessen spektrale Breite gegeben ist durch

$$\Delta J_z = \hbar \,\Delta m \quad . \tag{2.122}$$

Wir setzen Δm aus (2.122) in (2.120) und erhalten die Heisenbergsche Ungleichung im Drehimpuls und Winkel:

$$\Delta J_z \cdot \Delta \phi \stackrel{>}{\sim} \hbar \tag{2.123}$$

Da die Drehimpulskomponente J_z quantisiert ist (2.121), ist in der formalen Verwendung der Ungleichung (2.123) eine gewisse Vorsicht geboten. Der "kleinste" Wert ΔJ_z entspricht physikalisch der Realisierung eines Eigenzustandes von J_z . Da sich die Drehimpulse benachbarter Zustände um \hbar unterscheiden, ist der Eigenzustand realisiert für eine "Breite ΔJ_z der Verteilungsfunktion"

$$\Delta J_z \ll \hbar \quad . \tag{2.124}$$

Damit folgt aus (2.123)

$$\Delta \phi \gg 1 \quad . \tag{2.125}$$

Diese Situation entspricht der vollständigen örtlichen *Delokalisierung* im Azimutwinkel ϕ (Rotationssymmetrie!). Der formale Grenzfall $\Delta J_z \rightarrow 0$, der nach (2.123) $\Delta \phi \rightarrow \infty$ zur Folge hat, macht keinen Sinn, da $\phi \leq 2\pi$. Trotzdem wollen wir im Folgenden – der Einfachheit halber – die Bedingung (2.124) für den Eigenzustand schreiben als " $\Delta J_z \rightarrow 0$ ". (Wir werden später die örtliche Delokalisierung der Eigenzustände von J_z quantitativ studieren.)

Umgekehrt bedeutet die vollständige örtliche Lokalisierung

$$\Delta \phi \ll 1 \quad . \tag{2.126}$$

Aus (2.126) folgt dann mit (2.123)

$$\Delta J_z \gg \hbar \quad , \tag{2.127}$$

d.h. es müssen sehr viele Drehimpulszustände J_z beitragen. Da aber die Zahl (2j + 1) der Eigenzustände von J_z endlich ist, ist eine vollständige Lokalisierung des Quantons in ϕ nicht möglich.

Die Vektorungleichungen

Der Drehimpuls $\overrightarrow{\mathbf{J}}$ eines vollständig rotationssymmetrischen Systems (d.h. es existiert keine ausgezeichnete Richtung) hat die Eigenschaft, dass je zwei seiner kartesischen Komponenten, z.B. J_x und J_y , unverträgliche physikalische Größen sind. Um diese und eine Reihe von anderen wichtigen Drehimpulseigenschaften zu finden, betrachten wir eine beliebige physikalische *Vektorgröße* $\overrightarrow{\mathbf{A}}$ (steht für $\overrightarrow{\mathbf{r}}$, $\overrightarrow{\mathbf{p}}$, $\overrightarrow{\mathbf{J}}$, etc.) und untersuchen ihre Eigenschaften unter *infinitesimalen Rotationen*.

Die Werte der Observablen $\overrightarrow{\mathbf{A}}$, für einen beliebigen Zustand eines quantenphysikalischen Systems, seien charakterisiert durch die Mittelwerte und die spektralen Breiten ihrer Komponenten

$$\begin{array}{rcl} \text{Mittelwerte} & : & \langle A_x \rangle & , & \langle A_y \rangle & , & \langle A_z \rangle \\ \text{spektrale Breiten} & : & \Delta A_x & , & \Delta A_y & , & \Delta A_z \end{array}$$

Die möglichen Werte von $\overrightarrow{\mathbf{A}}$ sind in Abb. 2.33(a) (schematisch) als Punktehaufen im $\overrightarrow{\mathbf{A}}$ -Raum dargestellt (Projektion in die A_x - A_y -Ebene).

Ein Vektor ist eine Größe, die sich unter Rotationen (und Translationen) transformiert wie der Ortsvektor [siehe KP-1-2.3 und Anhang A]. Deshalb entspricht jeder Rotation im Ortsraum (Abb. 2.33(b)) dieselbe Rotation im \overrightarrow{A} -Raum (Abb. 2.33(a)). Dies gilt insbesondere für die in Abb. 2.33 dargestellte infinitesimale Rotation um die z-Achse des Schwerpunktsystems, mit dem Drehwinkel $\delta \phi (\ll 1)$. Die Mittelwerte der Komponenten von \overrightarrow{A} bezüglich des gedrehten Systems (x', y', z') sind gegeben durch

$$\langle A_{x'} \rangle = \langle A_x \rangle \cos \delta \phi + \langle A_y \rangle \sin \delta \phi \approx \langle A_x \rangle + \langle A_y \rangle \cdot \delta \phi$$
 (2.128)

Die infinitesimalen Änderungen der Mittelwerte sind nach (2.128) und (2.129)



Abb. 2.33. Infinitesimale Rotation um die z-Achse

$$\delta \langle A_x \rangle = \delta \phi \cdot \langle A_y \rangle \quad ; \quad \delta \langle A_y \rangle = -\delta \phi \cdot \langle A_x \rangle \quad , \tag{2.130}$$

und

$$\delta \langle A_z \rangle = 0 \tag{2.131}$$

(die Werte von A_z bleiben unverändert). Wegen der Rotationssymmetrie bezüglich der z-Achse müssen wir fordern, dass sich die Eigenschaften des Systems – als Folge der Rotation $\delta \phi$ – nicht (merklich) ändern. Bedingungen dafür sind

$$|\delta\langle A_x\rangle| \stackrel{<}{\sim} \Delta A_x \quad ; \quad |\delta\langle A_y\rangle| \stackrel{<}{\sim} \Delta A_y \tag{2.132}$$

$$\delta \langle A_z \rangle \stackrel{<}{\sim} \Delta A_z \quad . \tag{2.133}$$

(Die spektralen Breiten sind – grob gesagt – die "Breiten der Verteilungsfunktionen".) Wegen (2.131) ist (2.133) trivialerweise erfüllt. Mit (2.130) können wir die Bedingungen (2.132) schreiben als

$$\delta \Phi \left| \langle A_y \rangle \right| \stackrel{<}{\sim} \Delta A_x \quad ; \tag{2.134}$$

$$\delta \Phi \left| \langle A_x \rangle \right| \stackrel{<}{\sim} \Delta A_y \quad . \tag{2.135}$$

In den Ungleichungen (2.134) und (2.135) ist $\delta \Phi$ der Drehwinkel, für welchen sich die Eigenschaften des Systems unmerklich ändern.

Nun verwenden wir die Heisenbergsche Ungleichung (2.123):

$$\Delta J_z \cdot \Delta \phi \stackrel{>}{\sim} \hbar \quad . \tag{2.136}$$

Darin bedeutet die spektrale Breite $\Delta \phi$ die "Unschärfe" des Azimutwinkels ϕ , z.B. für den in Abb. 2.33 dargestellten Zustand des Systems. Wir betrachten Zustände mit $\Delta \phi$ klein ($\Delta \phi \ll 2\pi$). Der Maximalwert des Drehwinkels $\delta \phi$ in (2.134) und (2.135) muss identifiziert werden mit der spektralen Breite $\Delta \phi$.

87

Wir multiplizieren (2.136) mit $|\langle A_y \rangle|$

$$\Delta J_z \cdot \Delta \phi \left| \langle A_y \rangle \right| \stackrel{>}{\sim} \hbar \left| \langle A_y \rangle \right| \quad , \tag{2.137}$$

identifizieren $\delta \Phi$ in (2.134) mit $\Delta \phi$

$$\Delta \phi \cdot |\langle A_y \rangle| \stackrel{<}{\sim} \Delta A_x \tag{2.138}$$

und vergrößern die linke Seite von (2.137), indem wir die Ungleichung (2.138)einsetzen:

$$\Delta J_z \cdot \Delta A_x \stackrel{>}{\sim} \hbar \left| \langle A_y \rangle \right| \tag{2.139}$$

Dies ist die erste der gesuchten Vektorungleichungen.

Auf analoge Weise erhalten wir aus (2.135) eine zweite Ungleichung

$$\Delta J_z \cdot \Delta A_y \stackrel{>}{\sim} \hbar \left| \langle A_x \rangle \right| \tag{2.140}$$

Für das vollständig rotationssymmetrische Problem lassen sich die gleichen Betrachtungen auch für die x- und y-Achse durchführen, und wir erhalten insgesamt die sechs Vektorungleichungen (aus (2.139) und (2.140) durch zyklische Vertauschung der Indizes):

$$\Delta J_z \cdot \Delta A_x \gtrsim \hbar |\langle A_y \rangle| \quad \mathbf{I} \quad ; \quad \Delta J_z \cdot \Delta A_y \gtrsim \hbar |\langle A_x \rangle| \quad \mathbf{II}$$

$$\Delta J_x \cdot \Delta A_y \gtrsim \hbar |\langle A_z \rangle| \quad \mathbf{III} \quad ; \quad \Delta J_x \cdot \Delta A_z \gtrsim \hbar |\langle A_y \rangle| \quad \mathbf{IV}$$

$$\Delta J_y \cdot \Delta A_z \gtrsim \hbar |\langle A_x \rangle| \quad \mathbf{V} \quad ; \quad \Delta J_y \cdot \Delta A_x \gtrsim \hbar |\langle A_z \rangle| \quad \mathbf{VI} \quad (2.141)$$

Zusammenfassend halten wir fest, dass die Ungleichungen (2.141) aus sehr allgemeinen Gesetzmäßigkeiten hervorgegangen sind. Von der Vektorgröße $\vec{\mathbf{A}}$ haben wir ausschließlich ihre Transformationseigenschaften unter Rotationen benützt sowie die Rotationsinvarianz des Systems. Zudem wurde die Heisenbergsche Ungleichung im Drehimpuls und Winkel verwendet. Die Vektorungleichungen (2.141) sind somit gültig für beliebige rotationssymmetrischequantenphysikalische Systeme (und beliebige Vektorgrößen $\overrightarrow{\mathbf{A}}$).

Zunächst wollen wir den Spezialfall diskutieren, dass die Vektorgröße $\overrightarrow{\mathbf{A}}$ identisch mit dem Drehimpuls $\vec{\mathbf{J}}$ ist. Für diesen Fall folgen aus (2.141) die drei wichtigen Drehimpulsungleichungen

$$\begin{aligned} \Delta J_x \cdot \Delta J_y &\gtrsim \hbar |\langle J_z \rangle| & \mathrm{I} \\ \Delta J_y \cdot \Delta J_z &\gtrsim \hbar |\langle J_x \rangle| & \mathrm{II} \\ \Delta J_z \cdot \Delta J_x &\gtrsim \hbar |\langle J_y \rangle| & \mathrm{III} & . \end{aligned}$$
(2.142)

88

Befindet sich ein Quanton in einem Eigenzustand einer Komponente des Drehimpulses, z. B. von J_z ($\Delta J_z \rightarrow 0$), dann folgt aus (2.142 II,III)

$$\langle J_x \rangle \to 0 \quad ; \quad \langle J_y \rangle \to 0 \tag{2.143}$$

 $(\Delta J_y \text{ bzw. } \Delta J_x \text{ sind endlich})$. Wir formulieren diese Eigenschaft als

<u>1. Satz</u>: Falls ein Quanton in einem Eigenzustand einer seiner Drehimpulskomponenten ist, dann verschwinden die Mittelwerte der andern beiden Komponenten.

Befindet sich ein Quanton gleichzeitig in Eigenzuständen von zwei Komponenten des Drehimpulses, z.B. von J_x und J_y ($\Delta J_x \to 0$; $\Delta J_y \to 0$), dann folgt aus (2.142), dass die Mittelwerte *aller* Komponenten des Drehimpulses verschwinden müssen:

$$\langle J_x \rangle \to 0 \quad ; \quad \langle J_y \rangle \to 0 \quad ; \quad \langle J_z \rangle \to 0 \quad .$$
 (2.144)

Insbesondere bedeutet dies

$$J_x = 0 \quad ; \quad J_y = 0 \tag{2.145}$$

(Mittelwert und spektrale Breite verschwinden!). Nach (2.53) ist

$$\langle J_z^2 \rangle \le j^2 \hbar^2 \quad . \tag{2.146}$$

Mit (2.145) folgt aus (2.45) und (2.50) and ererseits

$$\mathbf{J}^{2} = \langle J_{z}^{2} \rangle = j(j+1)\hbar^{2} \quad . \tag{2.147}$$

Die Ausdrücke (2.146) und (2.147) sind nur verträglich für j = 0, d. h. für Spin Null des Quantons. Somit gilt der

<u>2. Satz</u>: Ein Quanton mit Drehimpulsquantenzahl $j \neq 0$ (Spin $\mathbf{J} \neq 0$) kann niemals gleichzeitig in Eigenzuständen zweier seiner Drehimpulskomponenten sein.

Die scheinbar komplizierten Eigenschaften des Drehimpulses eines Quantons wollen wir für eine oft realisierte Situation räumlich-graphisch darstellen mit Hilfe des *Vektormodells*. Das Quanton befinde sich in einem Zustand, der Eigenzustand einer Komponente seines Drehimpulses ist, z. B. von J_z . Dies bedeutet nach (2.33)

$$J_z = m\hbar \quad , \tag{2.148}$$

wobei m ein fester Wert der magnetischen Quantenzahl ist ($|m| \leq j$; j Drehimpulsquantenzahl). Das Quanton ist gleichzeitig in einem Eigenzustand von

$$\overset{\rightarrow}{\mathbf{J}}^{2} \equiv J_{x}^{2} + J_{y}^{2} + J_{z}^{2} \quad . \tag{2.149}$$

Nach (2.50) ist der Eigenwert¹³

$$J^2 = j(j+1)\hbar^2 \quad . \tag{2.150}$$

Das System ist wegen (2.148) auch in einem Eigenzustand von ${J_z}^2$ mit Eigenwert

$$J_z^2 = m^2 \hbar^2 \quad . \tag{2.151}$$

Aus (2.149), (2.150) und (2.151) folgt, dass sich das Quanton überdies in einem Eigenzustand von

$$\overrightarrow{\mathbf{J}}_{\perp}^{\mathbf{2}} \equiv J_{\mathbf{x}}^{\mathbf{2}} + J_{\mathbf{y}}^{\mathbf{2}} \quad , \qquad (2.152)$$

mit Eigenwert

$$J_{\perp}^2 = j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 \tag{2.153}$$

befindet; J_z , $\vec{\mathbf{J}}^2$ und $\vec{\mathbf{J}}_{\perp}^2$ sind also *verträgliche* physikalische Größen. Dieser Zustand – charakterisiert durch die Quantenzahlen (j,m) – ist in Abb. 2.34 graphisch dargestellt.



Abb. 2.34. Darstellung des Drehimpulszustandes (j, m) im Vektormodell

Die möglichen Werte der Vektorgröße \vec{J} sind die auf der Mantelfläche eines Kreiskegels, dessen Spitze im Ursprung liegt, gleichmäßig ausgeschmierten klassischen Vektoren. Die Projektion des Vektors in die z-Achse entspricht der z-Komponente (2.148) und die Länge des Vektors ist nach (2.150)

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar \quad . \tag{2.154}$$

Die Projektion in die x-y-Ebene ist

$$J_{\perp} = \sqrt{[j(j+1) - m^2]} \hbar \quad . \tag{2.155}$$

¹³ Wir bezeichnen den *Eigenwert* einer physikalischen Größe mit dem entsprechenden klassischen Symbol, im Einklang mit Abschn. 2.2.3.

Der Abb. 2.34 entnehmen wir, dass die Mittelwerte von J_x und J_y verschwinden ($\langle J_x \rangle = 0$; $\langle J_y \rangle = 0$), wie es der 1. Satz verlangt. Zudem ist die Aussage des 2. Satzes dargestellt, nämlich dass keine zwei Komponenten des Drehimpulses scharfe Werte haben ($\Delta J_x \neq 0$; $\Delta J_y \neq 0$), d.h je zwei Komponenten des Drehimpulses sind unverträgliche Größen.

Es ist wichtig zu realisieren, dass die Abb. 2.34 nicht eine Gesamtheit von Quantonen darstellt, sondern die Eigenschaften *eines* Quantons im Zustand (j, m). Die Figur ist eine "memotechnische" Veranschaulichung von Drehimpulseigenschaften.

Schließlich kehren wir nochmals zum allgemeinen Fall einer beliebigen Vektorgröße $\overrightarrow{\mathbf{A}}$ zurück. Die spektrale Breite jeder Komponente des Drehimpulses kommt in zwei Drehimpulsungleichungen (2.141) vor, jeweils multipliziert mit der spektralen Breite einer der beiden *anderen* Komponenten von $\overrightarrow{\mathbf{A}}$ (für ΔJ_z beispielsweise sind es die Gleichungen I und II). Deshalb können wir folgende Aussage machen.

<u>3. Satz</u>: Für ein Quanton ist jede Komponente des Drehimpulses im Allgemeinen mit einer *anderen* Komponente *irgendeiner* Vektorgröße unverträglich.

Die Einschränkung "im Allgemeinen" bedeutet, dass die entsprechenden Mittelwerte auf der anderen Seite der Ungleichungen (2.141) für den betreffenden Zustand ungleich null sein müssen.

Das Parallelitätsgesetz

Eine beliebige physikalische Vektorgrösse $\vec{\mathbf{A}}$ und der Drehimpuls $\vec{\mathbf{J}}$ eines Quantons – bezogen auf den Schwerpunkt des Systems – sind aufs Engste miteinander verknüpft. Betrachten wir als *Beispiel* einer Vektorgröße $\vec{\mathbf{A}}$ das **magnetische Moment** $\vec{\mu}$ des Quantons. Es gilt die Relation

$$\vec{\mu} = konst. \vec{\mathbf{J}} = k_{\mu} \vec{\mathbf{J}}$$
(2.156)

wobei die Konstante k_{μ} die gesamten magnetischen Eigenschaften des Quantons beschreibt – falls wir die Eigenschaften von $\overrightarrow{\mathbf{J}}$ kennen; wir sagen:

"magnetisches Moment und Drehimpuls sind parallel".

Das Parallelitätsgesetz gilt für ein quantenphysikalisches System, das sich in einem *einzigen, wohl definierten inneren Zustand* befindet (z.B. in einem Eigenzustand von $\overrightarrow{\mathbf{J}}^2$, J_z und E).

Was bedeutet das Parallelitätsgesetz (2.156)? Die Eigenschaften von $\vec{\mathbf{J}}$ sind die Spektren der Werte seiner drei Komponenten (J_x, J_y, J_z) für den betreffenden Zustand des Quantons. Falls diese Spektren bekannt sind, dann

erhalten wir die entsprechenden Spektren der Komponenten (μ_x, μ_y, μ_z) durch Multiplikation aller Spektren mit k_{μ} . (Multiplikation eines Spektrums mit k_{μ} bedeutet eine entsprechende Streckung aller Werte.) Insbesondere bedeutet dies, dass eine Multiplikation der *Mittelwerte* und der *spektralen Breiten* von $\vec{\mathbf{J}}$ die entsprechenden Größen von $\vec{\mu}$ ergeben müssen, d.h.

$$k_{\mu}\langle J_{x}\rangle = \langle \mu_{x}\rangle \quad ; \quad k_{\mu}\Delta J_{x} = \Delta \mu_{x}$$

$$k_{\mu}\langle J_{y}\rangle = \langle \mu_{y}\rangle \quad ; \quad k_{\mu}\Delta J_{y} = \Delta \mu_{y}$$

$$k_{\mu}\langle J_{z}\rangle = \langle \mu_{z}\rangle \quad ; \quad k_{\mu}\Delta J_{z} = \Delta \mu_{z} \quad .$$
(2.157)

Dies bedeutet auch, dass der 1. und 2. Satz über die Eigenschaften von $\vec{\mathbf{J}}$ auch für das magnetische Moment $\vec{\boldsymbol{\mu}}$ des Quantons gelten muss. Es bedeutet überdies, dass aus der Quantisierung des Drehimpulses ($J_z = \hbar m$) auch die *Quantisierung des magnetischen Moments* folgt ($\mu_z = k_\mu m \hbar$). Das Parallelitätsgesetz beinhaltet zudem die Aussage, dass für ein Quanton mit Spin Null *alle* Vektorgrößen verschwinden.

Die allgemeine Gültigkeit des Parallelitätsgesetzes (2.156) ist bemerkenswert. Die magnetischen Eigenschaften jedes Quantons sind durch *eine* Konstante k_{μ} , genannt gyromagnetisches Verhältnis, vollständig bestimmt; der Wert von k_{μ} ist abhängig von der inneren Struktur des Quantons.

Unter den Vektorgrößen, welche die Eigenschaften eines Quantons beschreiben, spielt der Drehimpuls also eine ausgezeichnete Rolle. Dies ist auch aus der Struktur der Vektorungleichungen (2.141) ersichtlich. Wir können leicht zeigen, dass das Parallelitätsgesetz mit den Vektorungleichungen verträglich ist. Dazu schreiben wir die Ungleichungen (2.141) auf für $\vec{\mathbf{A}} \equiv \vec{\boldsymbol{\mu}}$:

$$\Delta J_z \cdot \Delta \mu_x \gtrsim \hbar |\langle \mu_y \rangle| \quad \mathbf{I} \quad ; \quad \Delta J_z \cdot \Delta \mu_y \gtrsim \hbar |\langle \mu_x \rangle| \quad \mathbf{II}$$

$$\Delta J_x \cdot \Delta \mu_y \gtrsim \hbar |\langle \mu_z \rangle| \quad \mathbf{III} \quad ; \quad \Delta J_x \cdot \Delta \mu_z \gtrsim \hbar |\langle \mu_y \rangle| \quad \mathbf{IV}$$

$$\Delta J_y \cdot \Delta \mu_z \gtrsim \hbar |\langle \mu_x \rangle| \quad \mathbf{V} \quad ; \quad \Delta J_y \cdot \Delta \mu_x \gtrsim \hbar |\langle \mu_z \rangle| \quad \mathbf{VI} \quad (2.158)$$

Setzen wir in (2.158) das Parallelitätsgesetz in Form der Relationen (2.157) ein, dann erhalten wir die Drehimpulsungleichungen (2.142).

Wir betrachten zunächst die Gesamtheit der <u>elektronischen Systeme</u>. Dazu gehören das *Elektron* selbst und alle *Atome*. Es ist sinnvoll, die magnetischen Eigenschaften jedes dieser Quantonen durch eine *dimensionslose Zahl* zu charakterisieren.

Die Größenordnung (oder Dimension) des gyromagnetischen Verhältnisses für Atome erhalten wir aus dem *klassischen* Kreisbahnmodell des Wasserstoffs (Abb. 2.35).

Der Drehimpuls \mathbf{J} des Elektrons steht senkrecht zur Ebene der Kreisbahn und hat den Betrag

$$J = rm_e v \quad , \tag{2.159}$$



Abb. 2.35. Klassisches Kreisbahnmodell des Wasserstoffatoms

wobei m_e die Masse des Elektrons ist. Das magnetische Moment μ des Elektrons hat den Betrag (Fläche×mittlerer Strom)

$$\mu = \pi r^2 \frac{v}{2\pi r} e = \frac{r}{2} v e \tag{2.160}$$

und ist antiparallel zu **J**. Aus (2.160) und (2.159) folgt also die Vektorgleichung

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \mathbf{J} \tag{2.161}$$

(e: Elementarladung).

Aufgrund des (klassischen) Resultats (2.161) definieren wir den (dimensionslosen) *g-Faktor* eines beliebigen (elektronischen) Quantons mittels Parallelitätsgesetz (2.156) in der Form

$$\vec{\mu} = -g \, \frac{e}{2m_e} \, \vec{\mathbf{J}} \qquad (e > 0) \quad . \tag{2.162}$$

(Im klassischen Kreisbahnmodell ist also g = 1.)

Das *Elektron* selbst hat den g-Faktor g = 2.00 und $j \equiv s = 1/2$.

Nach (2.162) ist die natürliche Einheit des magnetischen Moments elektronischer Systeme das *Bohrsche Magneton*

$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.274 \times 10^{-24} \,\mathrm{A}\,\mathrm{m}^2 \quad . \tag{2.163}$$

Für die Gesamtheit der baryonischen Systeme (Abschn. 8.2), d.h. die Nukleonen, die Atomkerne und alle Baryonen, definieren wir den g-Faktor, indem wir das Parallelitätsgesetz (2.156) schreiben als

93

$$\vec{\mu} = g \, \frac{e}{2m_p} \, \vec{\mathbf{J}} \tag{2.164}$$

wobei m_p die Protonenmasse ist.

Die g-Faktoren der Nukleonen (Spin 1/2) sind

Proton:
$$g = 5.58$$

Neutron: $g = -3.83$. (2.165)

Die "krummen" Werte (2.165) sind darauf zurückzuführen, dass die Nukleonen komplizierte, aus Quarks zusammengesetzte Systeme sind.

Nach (2.164) ist die natürliche Einheit des magnetischen Moments baryonischer Systeme das Kernmagneton

$$\mu_N \equiv \frac{e\hbar}{2m_p} = 5.051 \times 10^{-27} \,\mathrm{A}\,\mathrm{m}^2 \quad . \tag{2.166}$$

Da das Parallelitätsgesetz für eine *beliebige* Vektorgröße gilt, können wir als weiteres *Beispiel* die Relation festhalten:

$$\vec{\mathbf{p}} = k_p \vec{\mathbf{J}} \quad , \tag{2.167}$$

wobei $\overrightarrow{\mathbf{p}}$ das **elektrische Dipolmoment** des Quantons ist und $\overrightarrow{\mathbf{J}}$ dessen Drehimpuls. (Im klassischen Kreisbahnmodell der Abb. 2.35 wäre $\mathbf{p} = -e$ \mathbf{r} .) Da in (2.167) auf der linken Seite ein *polarer* und rechts ein *achsialer* Vektor steht, ist die Symmetrie bezüglich einer räumlichen Inversion (der Paritätsoperation) verletzt [siehe z. B. KP-1-2.3]. Für paritätssymmetrische Systeme muss deshalb k_p in (2.167) identisch verschwinden. Damit haben wir gezeigt:

Das elektrische Dipolmoment paritätssymmetrischer Quantonen ist null.

(Im (speziellen) klassischen Kreisbahnmodell ist der zeitliche Mittelwert von \mathbf{p} gleich null!)

Der Zeeman-Effekt

Nachdem wir eine ganze Reihe von theoretischen Resultaten über Eigenschaften des Drehimpulses gewonnen haben, ist es an der Zeit, diese durch harte experimentelle Fakten zu überprüfen. Dies soll geschehen mit Hilfe eines Demonstrationsexperiments zum Zeeman-Effekt und im anschließenden Abschnitt mit dem Stern-Gerlach-Experiment.

Wir betrachten ein quantenphysikalisches System (z.B. einen Atomkern) im äußeren, homogenen Magnetfeld $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Das System befinde sich in einem Eigenzustand der Drehimpulsquantenzahl j. Die potentielle Energie ist (klassisch) gegeben durch¹⁴

$$U = -\vec{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\mu_{z}B \quad , \qquad (2.168)$$

wobei nach (2.164)

$$\vec{\mu} = g \, \frac{e}{2m_p} \, \vec{\mathbf{J}} \tag{2.169}$$

das magetische Moment im stationären Zustand ist. Da J_z (und damit auch μ_z) quantisiert ist, wird die Energie des stationären Zustandes durch das Magnetfeld aufgespalten in *diskrete Energiewerte* E_m , die durch die magnetische Quantenzahl m charakterisiert sind¹⁵. Aus (2.168) folgt mit (2.169)

$$E_m = -g \frac{e\hbar}{2m_p} mB = -g\mu_N Bm \quad . \tag{2.170}$$

In (2.170) ist g der g-Faktor des stationären Zustandes und μ_N das Kernmagneton (2.166); wir haben die Quantisierung des Drehimpulses ($J_z = m\hbar$) verwendet. Das **B**-Feld spaltet also einen stationären Zustand in (2j + 1) Zustände diskreter, äquidistanter Energien auf. Dieses Phänomen nennt man Zeeman-Effekt¹⁶.

Wir wollen versuchen, den Zeeman-Effekt mit Hilfe des Mössbauer-Effekts zu demonstrieren. Abb. 2.36 zeigt die nach (2.170) zu erwartenden Energieaufspaltungen des 14.4 keV angeregten Zustandes a (j = 3/2) von ⁵⁷Fe und des Grundzustandes g (j = 1/2). (Der g-Faktor des Grundzustandes ist positiv, derjenige des angeregten Zustandes negativ.)

Am Ort des ⁵⁷Fe-Atomkerns des Mössbauer-Absorbers (Abb. 2.27) befinde sich ein konstantes Magnetfeld *B*. Falls die Linienbreite Γ_Q der Mössbauer-Quelle klein ist gegenüber den Energiedifferenzen benachbarter Zustände des Zeeman-Effekts (Abb. 2.36), sollte es möglich sein, durch geeignete Wahl der Geschwindigkeit der Mössbauer-Quelle (via Dopplereffekt) Resonanzfluoreszenzübergänge zwischen einzelnen Zeeman-Komponenten im Absorber zu erzeugen.

Demonstrationsexperiment 9: *Mössbauer-Effekt II*. Wie schon im Demonstrationsexperiment im Abschn. 2.3.2 sind die radioaktiven 57 Co-Atome der Mössbauer-Quelle in einem Rhodiumkristall implantiert. Das *B*-Feld am Ort der 57 Fe-Kerne im Mössbauer-Absorber ist nicht ein äußeres **B**-Feld, sondern stammt von den Fe-Atomen des ferromagnetischen

¹⁴ Der Ausdruck (2.168) setzt voraus, dass das B-Feld klein genug ist, sodass die innere Struktur des Quantons nicht verändert wird.

 $^{^{15}}$ Daher stammt der Name der Quantenzahlm.

¹⁶ Die Aufspaltung im Magnetfeld wurde erstmals durch Pieter Zeeman (1896) an Spektrallinien von Atomen beobachtet.



Abb. 2.36. Energieaufspaltung des Grundzustandes g und des angeregten Zustandes a von ⁵⁷Fe im Magnetfeld (*Zeeman-Effekt*)



Abb. 2.37. Mössbauer-Absorptionsspektrum mit metallischem Fe-Absorber; Demonstrationsexperiment

Eisens (Hyperfeinwechselwirkung). Der Mössbauer-Absorber besteht einfach aus einer *metallischen Eisenfolie*. Die Mössbauer-Quelle ist wiederum auf der Membran des vibrierenden Lautsprechers (Abb. 2.27) montiert. Abbildung 2.37 zeigt das resultierende Mössbauer-Absorptionsspektrum. Es sind deutlich *sechs individuelle Absorptionslinien* sichtbar; es sind die in Abb. 2.36 eingezeichneten Übergänge. (Man würde zunächst acht Übergänge erwarten zwischen den zwei Komponenten des Grundzustandes und den vier Komponenten des angeregten Zustandes. Es existieren aber so genannte "Auswahlregeln" für Strahlungsübergänge (siehe Abschn. 6.2.1); die Übergänge mit Änderung der magnetischen Quantenzahl um zwei Einheiten sind unterdrückt.) Das Experiment ist eine klare Demonstration des Zeeman-Effekts und damit eine Manifestation des Parallelitätsgesetzes und der Quantisierung des Drehimpulses.

Ist der g-Faktor des Grundzustandes bekannt, dann lässt sich aus dem Absorptionsspektrum der Abb. 2.37 der g-Faktor des angeregten Zustandes und das Magnetfeld B am Ort des ⁵⁷Fe-Atomkerns bestimmen (vgl. Aufgabe 23).

2.4 Das Stern-Gerlach-Experiment (1922)

Das Stern-Gerlach-Experiment ist von fundamentaler Bedeutung für die Quantenphysik. Historisch gesehen war es die erste Demonstration der räumlichen *Quantisierung des Drehimpulses*. Zudem dient es noch heute als Modellfall zur Diskussion der *Messung physikalischer Größen* an Quantensystemen. Und drittens hat es eine Reihe von *Messmethoden* zur Bestimmung der Drehimpulse und der magnetischen Momente (g-Faktoren) von Atomzuständen begründet.

Otto Stern und Walter Gerlach haben sich eine Methode ausgedacht, mit welcher die Quantisierung der Drehimpulszustände von Atomen räumlich nachgewiesen werden kann. Gegenstand der Untersuchungen war ein eng kollimierter Atomstrahl aus elektrisch neutralen Silberatomen. Sie stellten sich die Frage: Wie kann man die Atome des Strahls, deren magnetische Momente $\vec{\mu}$ verschiedene räumliche Orientierungen aufweisen, unterschiedlich ablenken?

Wir orientieren uns zunächst wieder am *klassischen Kreisbahnmodell* des Wasserstoffatoms (Abb. 2.35), dessen Elektron im zeitlichen Mittel den Kreisstrom

$$I = \frac{v}{2\pi r} e \tag{2.171}$$

darstellt. In einem Magnetfeld **B** wirkt auf jedes Element dl des Kreisstromes die Biot-Savart-Kraft [KP-2-10.5]

$$d\mathbf{F} = I \, d\mathbf{l} \times \mathbf{B} \quad . \tag{2.172}$$

Eine Gesamtkraft **F** auf das Atom resultiert aber nur, wenn das **B**-Feld *inhomogen* ist. Befindet sich der kleine Kreisstrom beispielsweise in einem achsialsymmetrischen **B**-Feld, dessen Symmetrieachse (z-Achse) mit dem magnetischen Moment μ (Abb. 2.35) zusammenfällt, dann lässt sich die resultierende Biot-Savart-Kraft ausdrücken als [KP-2-11.3.1]

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad , \tag{2.173}$$

wobei $\frac{\partial B_z}{\partial z}$ die Änderung der z-Komponente des **B**-Feldes im Zentrum des Kreisstroms beschreibt. Atome, deren magnetische Momente μ in negativer z-Richtung orientiert sind ($\mu \rightarrow -\mu$), erfahren nach (2.173) eine Kraft
$F_z(-\boldsymbol{\mu}) = -F_z(\boldsymbol{\mu}).$ Dieser Effekt ist im Stern-Gerlach-Experiment ausgenutzt.

Die Anordnung des Experiments ist in Abb. 2.38 dargestellt.

Abbildung 2.38(a) zeigt die Gesamtübersicht. Die Quelle des Atomstrahls ist ein Ofen, in welchem Silber verdampft wird. Die durch eine kleine Öffnung austretenden Atome werden mittels Blende zu einem Strahl formiert. Zur Vermeidung der Streuung der Ag-Atome an den Luftmolekülen muss der ganze Außenraum des Ofens evakuiert werden. Der Strahl durchquert einen Elektromagneten mit speziell geformten Polschuhen (Abb. 2.38(b)) und wird auf einem Detektor aufgefangen. Der Detektor besteht aus einer Glasplatte, auf welcher die Atome einen sichtbaren Niederschlag erzeugen.

Wir interessieren uns in erster Linie für diejenigen Atome des Strahls, die den Magneten in der Umgebung der y-z-Ebene durchqueren (Abb. 2.38(b)). Die Polschuhe sind so geformt, dass für diese Atome $\frac{\partial B_z}{\partial z}$ groß (und praktisch konstant) ist. Die auf das magnetische Moment μ eines Atoms ausgeübte Kraft können wir allgemein ausdrücken als

$$\mathbf{F} = -\operatorname{\mathbf{grad}} U \quad , \tag{2.174}$$

wobei die potentielle Energie U des magnetischen Moments im B-Feld gegeben ist durch

$$U = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad . \tag{2.175}$$

Wir setzen (2.175) in (2.174) ein und berücksichtigen, dass $B_y \equiv 0$ ist¹⁷:

$$\mathbf{F} = \mathbf{grad}(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{grad}(\mu_x B_x(x.z) + \mu_z B_z(x,z)) \quad . \tag{2.176}$$

(Das **B**-Feld ist unabhängig von y.) Wegen $B_y \equiv 0$ ist also auch die Kraft in Strahlrichtung $F_y \equiv 0$, und aus (2.176) folgt

$$F_x = \mu_x \frac{\partial B_x}{\partial x} + \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial x}$$
(2.177)

$$F_z = \mu_x \frac{\partial B_x}{\partial z} + \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad . \tag{2.178}$$

Aus Symmetriegründen gilt in der y-z-Ebene $\frac{\partial B_z}{\partial x} \equiv 0$, sodass wir (2.177) ausdrücken können als

$$F_x = \mu_x \frac{\partial B_x}{\partial x} \quad . \tag{2.179}$$

Nach dem Satz von Larmor [KP-2-11.3.2] führt ein beliebig orientiertes atomares magnetisches Moment μ eine Präzessionsbewegung um die Richtung des **B**-Feldes (in unserem Fall die z-Richtung) aus. Dabei bleibt der Winkel zwischen μ - und z-Richtung erhalten ($\mu_z = \text{konst.}$) und der zeitliche

 $^{^{17}}$ Die Ausdehnung d des Magneten in Strahlrichtung ist viel größer als der Polabstand, so dass Randeffekte vernachlässigbar sind.



Abb. 2.38. *Stern-Gerlach-Experiment.* (a) Gesamtübersicht; (b) Schnitt durch Elektromagnet (senkrecht zum Atomstrahl); (c) Aufspaltung des Strahls

Mittelwert der anderen beiden Komponenten verschwindet (die Periode der Larmor-Präzession ist viel kleiner als die mittlere Zeit, die ein Atom im Magnetfeld verbringt). Insbesondere gilt

$$\langle \mu_x \rangle = 0 \quad . \tag{2.180}$$

Mit (2.180) folgt aus (2.179) $F_x = 0$ und aus (2.178)

$$\underline{F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}} \quad . \tag{2.181}$$

Die resultierende Kraft ist also in z-Richtung, proportional zu μ_z und unabhängig von der Geschwindigkeit der Atome. (Der Ausdruck (2.181) ist formal identisch mit der Kraft auf den Kreisstrom im achsialsymmetrischen B-Feld (2.173).)

Das Resultat des Stern-Gerlach-Experiments ist in Abb. 2.38(c) dargestellt: Der Atomstrahl (insbesondere in der Umgebung der y-z-Ebene) wird in zwei Teilstrahlen aufgespalten. Dieses Resultat steht in krassem Widerspruch zu dem, was wir aufgrund der klassischen Vorstellung erwarten würden. Eine räumlich isotrope Verteilung der atomaren magnetischen Momente μ würde nämlich die "Äquatorregion" der Kugel (d. h. $\mu_z \approx 0$) stärker gewichten als die Region der Pole (d. h. $\mu_z \approx \pm \mu_z^{max}$). Man würde also ein Maximum in der Dichte der Ag-Atome am Ort des nicht aufgespaltenen Strahls erwarten (Abb. 2.38(c)) – gerade dort, wo man im Experiment keine Atome findet!

Wir beobachten hier die *Quantisierung* von μ_z ; die Atome werden im Stern-Gerlach-Experiment offenbar nur an zwei Orten nachgewiesen, die zwei diskreten Werten von μ_z entsprechen. Wegen der Parallelität von $\vec{\mu}$ und \vec{J} ist damit auch die Komponente J_z des *Drehimpulses* quantisiert.

Aus der Tatsache, dass *zwei* Teilchenstrahlen auftreten, schließen wir auf die Drehimpulsquantenzahl des Ag-Atoms: j = 1/2. (Die Zahl der Drehimpulszustände ist allgemein (2j + 1).) Aus den Daten des Experiments $(\frac{\partial B}{\partial z},$ mittlere Geschwindigkeit, Längenverhältnisse in Strahlrichtung) und der beobachteten Aufspaltung der beiden Teilstrahlen kann man auch den *g*-Faktor des Ag-Atoms bestimmen (vgl. Aufgabe 24). Man findet g = 2 – denselben Wert wie beim freien Elektron.

Es ist kein Zufall, dass Drehimpuls und magnetisches Moment im Grundzustand des Silberatoms gleich sind wie beim freien Elektron. Der Drehimpuls eines Atoms setzt sich im Allgemeinen in komplizierter Weise zusammen aus den Bahndrehimpulsen der einzelnen Atomelektronen und deren Eigendrehimpulsen (Spins). Die Grundlagen zum Verständnis der Struktur der Atome sind einerseits die Quantenphysik des Wasserstoffatoms (Abschn. 5.2.7) und andererseits das Pauli-Prinzip (Abschn. 7.3). Die Struktur der 47 Elektronen des Silberatoms ist insofern besonders einfach, als der Drehimpuls des Gesamtsystems durch das unpaarige ("letzte") Elektron vollständig bestimmt wird. Drehimpuls und Spin der übrigen 46 Elektronen addieren sich nämlich zum Gesamtdrehimpuls Null, sodass das 47. Elektron allein den Drehimpuls des Ag-Atoms festlegt. Dieses Elektron befindet sich in einem räumlich vollkommen kugelsymmetrischen Zustand, dessen Bahndrehimpuls verschwindet, sodass der *Gesamtdrehimpuls des Silberatoms gleich dem Spin des Elektrons* ist.

Da das Atom neutral ist, können wir sagen: Das Silberatom im Stern-Gerlach-Experiment verhält sich wie ein Elektron ohne Ladung. Auf dieser Tatsache beruht die Bedeutung des Stern-Gerlach-Experiments zur Erörterung des Messvorgangs an Quantensystemen (siehe Abschn. 3.2). Da der Spin des Elektrons (genauer s_z) nur zwei Eigenzustände hat, bietet sich das System als Modellfall zur Behandlung konzeptioneller Probleme der Quantenphysik an.

In der gesamten Betrachtung des Stern-Gerlach-Experiments haben wir die Atom*kerne* der Ag-Atome ignoriert. Silber hat zwei (stabile) Isotope, $^{107}_{47}$ Ag und $^{109}_{47}$ Ag; beide Atomkerne haben Spin und magnetisches Moment. Ihre Effekte sind (größenordnungsmäßig) vernachlässigbar, weil das Kernmagneton (2.166) um den Faktor

$$\frac{m_p}{m_e} = 1836$$
 (2.182)

kleiner ist als das Bohrsche Magneton (2.163).

2.5 Die Eigenschaften des Quantons (Zusammenfassung)

Der Ausdruck **Quanton** in der allgemeinsten Form bezeichnet ein beliebiges quantenphysikalisches System. Dies kann ein so genanntes "*Elementarteilchen*" sein, d. h. ein (aus heutiger Erkenntnis) nicht aus anderen Objekten zusammengesetztes System. Beispiele sind: Photon, Elektron, Myon, Neutrinos etc. (vgl. Abschn. 8.2). Oder aber, es kann ein aus anderen Objekten zusammengesetztes System sein. Beispiele dafür sind: Atom (Atomkern, Elektronen), Proton (drei Quarks), Neutron (drei Quarks), Pion (Quark, Antiquark), Atomkern (Protonen, Neutronen) etc.

Zunächst betrachten wir ein beliebiges Quanton zu einer **festen Zeit**. Es hat folgende fundamentale Eigenschaften.

- Ein beliebiger Zustand des Quantons ist gegeben durch die Spektren der Werte (im Allgemeinen) mehrerer physikalischer Größen (Observablen). Die Spektren können kontinuierlich oder diskret sein.
- 2. Ein beliebiges **Spektrum** der physikalischen Größe X lässt sich charaterisieren durch den *Mittelwert* $\langle X \rangle$ und die *spektrale Breite* ΔX .
- 3. Hat die physikalische Größe X den festen Wert X (d.h. $\langle X \rangle = X$ und $\Delta X = 0$), dann sagen wir: Das Quanton ist in einem **Eigenzustand** bezüglich der Größe X; X heißt **Eigenwert** der entsprechenden physikalischen Größe.

102 2 Das Quanton und die Heisenbergschen Ungleichungen

4. Sind die spektralen Breiten zweier physikalischer Größen durch eine Heisenbergsche (oder Vektor-) Ungleichung¹⁸ verknüpft, dann existiert kein Zustand (irgendeines Quantons!), der gleichzeitig Eigenzustand beider Größen ist: Die beiden physikalischen Größen heissen **unverträglich**.

Die bis jetzt erwähnten Eigenschaften des Quantons beziehen sich auf eine feste Zeit t. Die Eigenschaften des Quantons im **Zeitverlauf** (nichtstationäres Verhalten) werden im Kap. 4 systematisch behandelt. Die Heisenbergsche Ungleichung in Energie und Zeit (2.68), die sich von den andern Heisenbergschen Ungleichungen wesentlich unterscheidet, macht eine fundamentale Aussage über die zeitliche Änderung der Eigenschaften des Quantons. Sie verknüpft die typische Breite ΔE des Energiespektrums mit einer charakteristischen Zeit

$$\Delta t_c \equiv \frac{\hbar}{\Delta E} \quad , \tag{2.183}$$

welche folgende Eigenschaften hat:

- 1. In einem Zeitintervall $(t t_0)$, welches *klein* ist gegenüber der charakteristischen Zeit Δt_c , ändern sich die Mittelwerte der physikalischen Größen des Quantons wenig, bezogen auf den Zustand z. Zt. t_0 .
- 2. In einem Zeitintervall $(t t_0)$, welches $gro\beta$ ist gegenüber der charakteristischen Zeit Δt_c , ändern sich die Mittelwerte der physikalischen Größen wesentlich.
- 3. Ist das Quanton in einem Eigenzustand der Energie (d.h. $\Delta E = 0$), dann gilt für die charakteristische Zeit $\Delta t_c \to \infty$, d.h. das Quanton ist stationär.

Wir können uns diese Eigenschaften nochmals veranschaulichen am quasistationären, gebundenen Zustand irgendeines zusammengesetzten Quantons (Modellbeispiel: angeregter Zustand von ⁵⁷Fe). In diesem Fall ist ΔE gleich der natürlichen Linienbreite Γ und die charakteristische Zeit Δt_c ist gleich der mittleren Lebensdauer τ . Die obigen Aussagen 1 und 2 gehen aber über diese Situation hinaus. Die Experimente zum Mössbauer-Effekt haben gezeigt, dass wir die charakteristische Zeit Δt_c "künstlich" manipulieren können, indem wir im Experiment Zerfallsereignisse auswählen, deren mittlere Lebensdauer verschieden von τ ist. Dadurch variieren wir die Zeit, nach welcher sich das System ändert, und damit nach (2.183) auch ΔE . In diesem Fall ist die typische Breite der Energieverteilung also verschieden von Γ .

Fazit: In der Quantenphysik spielt das **Experiment** eine *aktive* Rolle; es *präpariert* den Zustand des Quantons, dessen Eigenschaften gemessen werden – im krassen Gegensatz zu den Vorstellungen der klassischen Physik.

Ausgangspunkt von Kap. 2 waren Experimente, die uns inspiriert haben, das Quantonprinzip zu formulieren. Die Teilchen-Wellen-Symmetrie-

¹⁸ Die Aussage in Bezug auf die Vektorungleichungen impliziert nicht verschwindende Mittelwerte in (2.139) und (2.140).

relationen haben dann auf heuristischem Weg zu den fundamentalen *Heisenbergschen Ungleichungen* geführt, welche uns eine Reihe von allgemeinen Eigenschaften der Quantenphysik eröffnen – ohne auf die innere Struktur der Quantonen überhaupt eingehen zu müssen (wir kennen diese Strukturen noch nicht). Das ist der faszinierende Teil dieses Kapitels; er demonstriert die Stärke von Symmetrieüberlegungen.

Diese Betrachtungen haben uns bis jetzt noch nicht in die Lage versetzt, die physikalischen Eigenschaften der Quantonen systematisch zu berechnen. Der Weg dahin ist aber vorgezeigt. In den folgenden Kapiteln sollen die *quantenphysikalischen Gesetze* schrittweise entwickelt werden (immer im engsten Kontakt mit den Experimenten). Sie werden uns in zunehmendem Maß befähigen, konkrete physikalische Probleme mathematisch zu lösen. Dabei sollen die hier gewonnenen allgemeinen Einsichten laufend überprüft und illustriert werden.

Wir schließen das Kapitel ab mit einigen historisch-didaktischen Bemerkungen.

Zunächst zum Begriff der Heisenbergschen Ungleichungen. Diese werden meistens als "Heisenbergsche Unschärferelationen" bezeichnet, gelegentlich als "Unsicherheitsprinzip" ("Uncertainty Principle") oder als "Unbestimmtheitsprinzip". Um die präzise Art der Aussage zu betonen und den Eindruck von Ungenauigkeit der Begriffe zu vermeiden, benutzen wir den sachlichen Ausdruck "Ungleichungen".

In diesem Lehrgang basiert der Zugang zu den Heisenbergschen Ungleichungen auf den Symmetrieprinzipien und den klassischen spektralen Ungleichungen.

Heisenbergs fundamentaler Beitrag zur Quantenphysik resultierte (historisch) aus einer scharfsinnigen Analyse zur Genauigkeit von Experimenten unter der Berücksichtigung der von der Quantentheorie implizierten Begrenzungen. Die Entdeckung der Ungleichungen durch Heisenberg war für Bohr eine entscheidende Einsicht in seinen langjährigen Bemühungen um das Verständnis der neuen Physik, die schließlich in seiner Formulierung des Komplementaritätsprinzips gipfelten (Fußnote 3).

Das *Quantonprinzip*, der Ausgangspunkt der vorliegenden Darstellung, enthält das wesentliche Element des Komplementaritätsprinzips von *Bohr*.

Aufgabe 6 Beugung von Licht am Spalt (klassisch). Eine monochromatische, ebene Lichtwelle (Wellenlänge λ , Wellenvektor k) trifft senkrecht auf einen Schirm, der einen rechteckigen Spalt der Breite a und der Höhe h (in z-Richtung) aufweist (Abb. 2.39). Das Licht sei in z-Richtung linear polarisiert.



Abb. 2.39. Beugung von Licht am Spalt (klassisch)

1. Berechne die Intensitätsverteilung $I(\theta)$ des Lichts auf dem zylindrischen Schirm in der x-y-Ebene, für $R \gg a, h$.

Hinweis: Man verwende das Huygensche Prinzip¹⁹ bezüglich der Spaltfläche.

2. Drücke das Resultat von 1. durch den Parameter

$$\beta \equiv \frac{ka}{2}\sin\theta$$

aus und stelle $I(\beta)/I(0)$ graphisch dar.

3. Welche Bedingung muss erfüllt sein, damit man aus der Intensitätsverteilung auf dem Schirm die Spaltbreite a bestimmen kann?

Aufgabe 7 Elastische Streuung von Teilchen an Kugeln (klassisch). Ein Teilchenstrahl, bestehend aus kleinen harten Kugeln der Masse m und Geschwindigkeit \mathbf{v} , wird an großen harten Kugeln (Radius R, Masse $M \ll m$) gestreut (Abb. 2.40).

Berechne den differentiellen Wirkungsquerschnitt $\frac{d \sigma}{d \Omega}(\Theta)$ sowie den totalen Wirkungsquerschnitt σ .

Aufgabe 8 \hbar -Regel. Monochromatisches Licht der Wellenlänge λ und der Intensität I (Energie pro Flächen- und Zeiteinheit) fällt während der Zeit T senkrecht auf einen Schirm, der eine kreisförmige Öffnung der Fläche F aufweist (siehe z. B. Abb. 2.39). Das Beugungsbild wird mit einem Detektorsystem gemessen.

Bestimme aus den (klassischen) Größen I, F, T, λ und c (Lichtgeschwindigkeit) die charakteristische Wirkung A dieses Prozesses. Zeige – mit Hilfe der \hbar -Regel – dass der klassische Grenzfall realisiert ist, falls

$$N \gg 1$$

¹⁹ Huygensches Prinzip: Jeder hindernisfreie Punkt einer Wellenfront wird als kohärente Quelle einer sekundären Kugelwelle (mit der Frequenz der Primärwelle) aufgefasst. Die elektromagnetische Welle in jedem Punkt außerhalb ("rechts") der Wellenfront ist dann gleich der Superposition aller sekundären Kugelwellen.



Abb. 2.40. Elastische Streuung von Teilchen an Kugeln (klassisch)

wobe
iN die während des Experiments durch die Schirmöffnung hindurchgetretene Gesamtzahl der Photonen ist.

Aufgabe 9 Interferenz. Zwei kohärente, identische, punktförmige Lichtquellen im Abstand d emittieren monochromatische Wellen (siehe Abb. 2.17). (Wir können uns zwei atomare harmonische Oszillatoren vorstellen, die senkrecht zur Zeichenebene in Phase schwingen.)

Berechne die auf einem Schirm im Abstand R ($R \gg d$) gemessene Intensitätsverteilung $I(\theta)$ als Funktion von d und der Wellenlänge λ . (Nach dem Huygenschen Prinzip (siehe Aufgabe 6) ist die Intensitätsverteilung $I(\theta)$ identisch derjenigen eines Beugungsexperiments mit zwei kleinen kreisförmigen Schirmöffnungen im Abstand d.)

Aufgabe 10 Compton-Effekt (siehe Abb. 2.13).

1. Berechne die Wellenlängenänderung $(\lambda' - \lambda)$ zwischen der "Compton-gestreuten" elektromagnetischen Strahlung (λ') und der einlaufenden Strahlung (λ) als Funktion des Streuwinkels θ und drücke das Resultat durch die Compton-Wellenlänge des Elektrons

$$\lambda_C \equiv \frac{h}{mc} \tag{2.184}$$

aus (m: Elektronenmasse).

2. Berechne die kinetische Energie T des Elektrons als Funktion der Enegie E des einlaufenden Photons und des Streuwinkels θ des Photons.

Aufgabe 11 Annihilation von Positronium. Das Positron (e^+) ist das Antiteilchen des Elektrons; die Massen sind gleich $(m_{e^+} = m_{e^-} = m = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg})$ und die Ladung des Positrons ist +e (Elementarladung). Wird ein Positron (erzeugt z.B. im radioaktiven Zerfall der Atomkerne) in Materie abgebremst, dann kann es sich mit einem Elektron zu einem gebundenen, instabilen System vereinigen, dem sog. Positronium. (Positronium ist ein "Wasserstoffatom", dessen Proton durch ein Positron ersetzt ist.) Positronium zerfällt durch Annihilation, d. h. vollständige Umwandlung in elektromagnetische Strahlung. Der dominante Prozess ist die Annihilation in zwei γ -Quanten.

106 2 Das Quanton und die Heisenbergschen Ungleichungen

Berechne die Energien der γ -Quanten in der Zwei-Quanten-Annihilation von Positronium (in keV; 1 keV = 10³ eV).

Aufgabe 12 Dispersions relationen. Die Funktion $\omega = \omega(k)$ (ω : Frequenz; k: Wellenzahl) eines Wellenfeldes heißt Dispersions relation.

Berechne die Dispersionsrelation für

- 1. ein nicht-relativistisches (freies) Quanton der Masse m;
- 2. das elektromagnetische Strahlungsfeld (im Vakuum).

Hinweis: Verwende Teilchen-Wellen-Symmetrierelationen.

Aufgabe 13 De-Broglie-Wellenlänge.

1. Berechne die De-Broglie-Wellenlänge λ eines Quantons der Masse m als Funktion seiner kinetischen Energie $T = E - mc^2$ (E: totale Energie) und drücke das Resultat aus durch die Compton-Wellenlänge des Quantons

$$\lambda_C \equiv \frac{h}{mc}$$

Spezialisiere den allgemeinen Ausdruck für

- 2. nicht-relativistische Quantonen;
- 3. hoch relativistische Quantonen.

Aufgabe 14 Elektromagnetische Wellen in zylindersymmetrischer Kavität. Ein Hohlzylinder und ein Vollzylinder (beide der Höhe $h \to \infty$) bestehen aus idealem Leitermaterial und bilden ein zylindersymmetrisches Doppelleitersystem [KP-2-12.2] (siehe Abb. 2.41).



Abb. 2.41. Zylindersymmetrisches Doppelleitersystem

Wir betrachten zwischen den Leitern (im Vakuum) monochromatische, fortlaufende elektromagnetische Wellen, die sich in *s*-Richtung fortbewegen (Wellenvektor **k** parallel zur x-y-Ebene). Die Dimensionen des Systems sind so gewählt, dass der Spaltabstand $d \ll 2\pi r_0$ (r_0 : mittlerer Radius). Die Amplitude des **E**-Vektors der fortlaufenden Welle sei E_0 .

- Berechne das E- und B-Feld der fortlaufenden Welle. *Hinweis*: Man kann die Lösung aus der fortlaufenden Welle in einem zugeordneten (aufgerollten) Zweiplatten-Doppelleitersystem konstruieren (siehe [KP-2-12.2]).
- 2. Ersetze die Ortsvariable s der Welle (Abb. 2.41) durch den Azimutwinkel ϕ und bestimme die möglichen Werte der azimutalen Wellenzahl m, definiert als

$$m \equiv r_0 k$$
 .

Aufgabe 15 Eigendrehimpuls. Zeige, dass aus

$$\langle J_z^2 \rangle = \frac{1}{2j+1} \sum_{m=-j}^{m=+j} (m\hbar)^2$$

(Abschn. 2.2.3) mit

$$\mathbf{J}^2 = 3\langle J_z^2 \rangle$$

folgt

$$\mathbf{J}^2 = j(j+1)\hbar^2$$

für ganzzahlige und halbzahlige Spinquantenzahlen j.

Hinweis:

$$\sum_{k=1}^{n} k^2 = 1^2 + 2^2 + 3^2 + \dots + n^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}$$
$$\sum_{k=1}^{n} (2k-1)^2 = 1^2 + 3^2 + \dots + (2n-1)^2 = \frac{n(2n-1)(2n+1)}{3}$$

Aufgabe 16 Paramagnetisches Gas. Der Grundzustand des Natriumatoms (Z = 11) hat die Drehimpulsquantenzahl j = 1/2 und den g-Faktor g = 2. (Dies sind die Eigenschaften des freien, unpaarigen Elektrons; vgl. Atombau, Abschn. 7.3.1.)

Das Na-Gas befinde sich in einem homogenen Magnetfeld B, das in z-Richtung angelegt sei.

- 1. Berechne \mathbf{J}^2 und J_\perp und stelle die
 $m\text{-}\mathrm{Zustände}$ des Na-Atoms im Vektormodel dar.
- 2. Berechne die Energien E_m der Zeeman-Zustände (in eV) für B = 1 T.
- 3. Berechne die Magnetisierung **M** (mittleres magnetisches Moment pro Volumeneinheit) des Na-Gases im thermischen Gleichgewicht der Temperatur T, als Funktion von B und der Teilchenzahldichte n (mittlere Anzahl Atome pro Volumeneinheit). Man drücke das Resultat aus durch den Parameter

$$b \equiv \frac{\mu_B B}{kT}$$

wobei μ_B das Bohrsche Magneton ist und k die Boltzmann-Konstante. Hinweis: Die mittlere Besetzungszahl eines *m*-Zustandes ist proportional zu $e^{-E_m/kT}$ (Boltzmann-Faktor).

108 2 Das Quanton und die Heisenbergschen Ungleichungen

4. Spezialisiere das Resultat von 3., einerseits für $kT \ll \mu_B B$ und andererseits für $kT \gg \mu_B B$.

Aufgabe 17 Mössbauer-Effekt. Die von einer ruhenden Mössbauer-Quelle emittierten γ -Quanten (Energie E_{γ}) (Abb. 2.27) haben die Energieverteilung

$$N(E_{\gamma}) = N_0 \frac{(\Gamma/2)^2}{(E_{\gamma} - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}$$

wobei $E_0 (= E_a - E_g)$ die mittlere Energie des angeregten Zustandes ist und Γ die natürliche Linienbreite. N_0 ist die Zahl der γ -Quanten der Energie E_0 (pro Energieeinheit), die pro Zeiteinheit auf den Detektor auftreffen, in Abwesenheit eines Mössbauer-Absorbers.

Die Quelle wird nun mit konstanter Geschwindigkeit \boldsymbol{v} in Richtung des Detektors bewegt.

1. Bestimme die Energieverteilung $N(E_{\gamma}, v)$ der auf den Detektor auftreffenden γ -Quanten (in Abwesenheit eines Mössbauer-Absorbers).

Wir schieben einen dünnen Mössbauer-Absorber unmittelbar vor den Detektor (Abb. 2.27). Der Absorber enthält n Atomkerne im Grundzustand pro Volumeneinheit und weist eine Dicke d (in Strahlrichtung) auf; es gilt $dn\sigma_0 \ll 1$ (σ_0 : Wirkungsquerschnitt für Mössbauer-Absorption eines γ -Quants der Energie E_0).

2. Berechne die aus dem Strahl pro Zeiteinheit durch Mössbauer-Effekt absorbierten Quanten R(v) als Funktion der Geschwindigkeit v der Quelle; stelle R(v)als Integral dar²⁰.

Hinweis: Der Wirkungsquerschnitt für Mössbauer-Absorption beträgt

$$\sigma(E_{\gamma}) = \sigma_0 \frac{(\Gamma/2)^2}{(E_{\gamma} - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad ,$$

Aufgabe 18 Breite von Spektrallinien. Ein quasistationärer Zustand 1 eines quantenphysikalischen Systems (Atom, Atomkern, etc.) zerfällt durch Emission eines Photons (γ -Quants) der mittleren Energie E_0 in einen quasistationären Zustand 2. Die natürliche Linienbreite des Zustandes 1 sei Γ_1 , diejenige des Zustandes 2 Γ_2 .

Das System befinde sich im Zustand 1.

- 1. Berechne die Verteilungsfunktion $N_1(E_1)$ der Energie (Wahrscheinlichkeit pro Energieeinheit) des Zustandes 1.
- 2. Drücke die Verteilungsfunktion N(E) der Energie des Photons (Wahrscheinlichkeit pro Energieeinheit) durch $N_1(E_1)$ und die Verteilungsfunktion $N_2(E_2)$ des Zustandes 2 aus; stelle N(E) als Integral dar.
- 3. Wie groß ist die Linienbreite Γ des Photonenübergangs (Breite der Veteilungsfunktion N(E) auf halber Höhe)?

²⁰ Die Auswertung des Integrals führt auf eine Lorentz-Verteilung, deren Breite auf halber Höhe gegeben ist durch $\Delta v = \frac{2\Gamma}{E_0} c$.

Aufgabe 19 Mittlere Lebensdauer und natürliche Linienbreite I. Ein quasistationärer Zustand eines quantenphysikalischen Systems zerfällt durch zwei unabhängige Reaktionskanäle. (Beispiele: Ein Atomzustand zerfällt durch Photonemission in zwei verschiedene Endzustände; der Δ^0 -Zerfall (2.99).) Die Zerfallskonstante des ersten Kanals sei λ_1 , diejenige des zweiten Kanals λ_2 .

1. Wie groß ist die mittlere Lebensdauer τ des Zustandes und seine natürliche Linienbreite $\varGamma?$

Wir betrachten speziell den 14.4 keV-Zustand von ⁵⁷Fe (Abb. 2.28). Der dominante Übergang in den Grundzustand geschieht durch den Prozess der sog. *Inneren Konversion*: Die Änderung der Ladungsverteilung des Kerns zwischen angeregtem Zustand und Grundzustand bewirkt eine Änderung der Coulomb-Energie der Elektronen. Als Folge davon kann ein kernnahes Elektron aus dem Atomverband abgelöst werden; seine kinetische Energie ist dann gleich der Zerfallsenergie E_0 minus der Bindungsenergie des Elektrons. Der Prozess der inneren Konversion ist also ein strahlungsloser Übergang.

Das Verhältnis der Zerfallskonstanten für innere Konversion und $\gamma\text{-Emission}$ des 14.4 keV-Zustandes beträgt

$$\frac{\lambda_{IK}}{\lambda_{\gamma}} = 9.7$$

wobei $\lambda_{\gamma} = 6.68 \times 10^5 \, \text{s}^{-1}$.

2. Berechne die mittlere Lebensdauer τ und die natürliche Linienbreite Γ (in eV) des 14.4 keV-Zustandes von ⁵⁷Fe.

Aufgabe 20 Mittlere Lebensdauer und natürliche Linienbreite II. Wir betrachten einen quasistationären Zustand eines quantenphysikalischen Systems (Atom, Atomkern, Hadron, etc.).

- 1. Berechne den Mittelwert $\langle t\rangle$ und die spektrale Breite $\varDelta t$ der Lebenszeit (t) des Zustandes.
- 2. Berechne den Mittelwert $\langle E \rangle$ und die spektrale Breite ΔE der Anregungsenergie (E) des Zustandes.

Aufgabe 21 Zerfallszeit. Ein ⁵⁷Fe-Atomkern sei im 14.4 keV angeregten Zustand *a*. Wie lange dauert der Übergang des ⁵⁷Fe-Kerns vom Zustand *a* in den Grundzustand *g* mindestens? (Wir fragen nach der Zerfallszeit $\Delta \tau$ (Zeit eines einzelnen Übergangs) – nicht zu verwechseln mit der mittleren Lebensdauer τ !)

Hinweis: Man muss feststellen können, dass das System im Grundzustand ist, z. B. durch eine Energiemessung.

Aufgabe 22 Linearer harmonischer Oszillator.

Verwende die Heisenbergsche Ungleichung im Ort und Impuls, um die Energie (E_0) und die räumliche Ausdehnung (spektrale Breite Δx_0) des Grundzustandes des harmonischen, linearen Oszillator abzuschätzen.

Hinweis: Als Ausgangspunkt dient der klassische Ausdruck der Energie

110 2 Das Quanton und die Heisenbergschen Ungleichungen

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$$
; $\omega_0 = \sqrt{\frac{f}{m}}$, f : Federkonstante

Aufgabe 23 Magnetfeld im Eisen. Im Mössbauer-Absorptionsspektrum von Eisen (Abb. 2.37) wird die äußerste Absoptionslinie rechts bei einer Geschwindigkeit von v = +5.0 mm/s gemessen, und die äußerste Linie links bei v = -5.6 mm/s. Der g-Faktor des Grundzustandes von ⁵⁷Fe ist $g_g = 0.181$, und derjenige des angeregten Zustandes bei 14.4 keV beträgt $g_a = -0.102$.

Berechne das Magnetfeld B am Ort des ⁵⁷Fe-Atomkerns.

Aufgabe 24 Stern-Gerlach-Experiment (Abb. 2.38). Der Atomstrahl tritt längs der y-Achse in das Magnetfeldgebiet (Ausdehnung *d* in y-Richtung) ein. Auf die Silberatome (Masse *M*, Spin 1/2) wirkt die Kraft F_z in z-Richtung. Im Abstand *D* vom Magneten fällt der Atomstrahl auf die Glasplatte (Detektor). Atome der Geschwindigkeit $\mathbf{v} = (0, v_y, 0)$ treten ins Magnetfeldgebiet ein.

1. Berechne die Ablenkung z des Atomstrahls am Ort des Detektors als Funktion von d, D und F_z . (Man denke sich das Koordinatensystem der Abb. 2.38(a) nach links verschoben, sodass sein Ursprung an den Anfang des Magnetfeldgebietes zu liegen kommt.)

Wir betrachten ein Stern-Gerlach-Experiment unter folgenden Bedingungen:

- Of entemperatur T = 400 K;
- Magnetfeldgradient $\frac{\partial B_z}{\partial z} = 0.17 \text{ T/cm};$
- Magnetausdehnung d = 12.5 cm;
- Abstand Magnet Detektor D = 50 cm.

Der mittlere Abstand der beiden Strahlkomponenten in der y-z-Ebene am Ort des Detektors beträgt

$$2\overline{z} = 3.8 \,\mathrm{mm}$$

2. Berechne den g-Faktor des Ag-Atoms und vergleiche den Wert mit dem g-Faktor des Elektrons (Atommasse $M = 106.9 \,\mathrm{u}$; $1 \,\mathrm{u} = 1.6605 \times 10^{-27} \,\mathrm{kg}$). Hinweis: Das mittlere Quadrat der Geschwindigkeit der Atome in y-Richtung ist [KP-2-14]

$$\langle v_y^2 \rangle = \frac{kT}{M}$$

3 Wahrscheinlichkeit und Quantenamplitude

Inhalt: Um die quantenphysikalischen Gesetze zu finden, bietet sich als Studienobjekt das (monochromatische) Photon mit festem Impuls an. Erstens sind die physikalischen Eigenschaften dieses Quantons besonders einfach (es sind die Polarisationseigenschaften) und zweitens kennen wir das Verhalten des Systems im klassischen Grenzfall, aus der klassischen Elektrodynamik. Eingangs erläutern wir die Polarisationseigenschaften und -experimente von klassischem (monochromatischem) Licht. Die Durchführung von Polarisationsexperimenten im Quantenbereich führt uns dann auf den Begriff der Projektionswahrscheinlichkeit, der direkt mit der Messung physikalischer Größen verbunden ist.

Das Quanteninterferenzexperiment als Schlüsselexperiment zeigt, dass wir den fundamentalen Begriff der *Quantenamplitude* einführen müssen; ihr Betragsquadrat ist gleich der Projektionswahrscheinlichkeit. Für die Quantenamplitude gilt das *Superpositionsprinzip der Amplituden* sowie das *Prinzip der sequentiellen Faktorisierung*. Daraus entwickeln wir die Gesetzmäßigkeiten, denen die Quantenamplituden unterworfen sind.

Die meisten Resultate dieses Kapitels beziehen sich zunächst auf die physikalischen Größen "Polarisation zur Basis (x,y)" und "Polarisation zur Basis (R,L)" des Photons. Sie folgen im Wesentlichen aus dem Quanteninterferenzexperiment und dem (bekannten) klassischen Grenzfall. Wir postulieren dann die allgemeine Gültigkeit dieser Resultate (der Prinzipien und Gesetze) für *irgendwelche* physikalische Größen *beliebiger* Quantonen. Letzteres ist eine direkte Folge des *Quantonprinzips* (die quantenphysikalischen Gesetze sind universell).

3.1 Polarisationsexperimente mit Licht (klassisch)

3.1.1 Lineare Polarisation

In diesem Abschnitt stellen wir die experimentellen Werkzeuge zusammen, die wir anschließend zur Ergründung der Quantenphysik benötigen. Die Phänomene werden in der Sprache der klassischen Elektrodynamik dargestellt [siehe KP-2-11,12].

Wir betrachten ebene, monochromatische elektromagnetische Wellen, die in z-Richtung fortschreiten. Die Felder $\mathbf{E}(z,t)$, $\mathbf{B}(z,t)$ seien von der Form

$$E_x(z,t) = -E_0 \cos(kz - \omega t) \quad ; \quad E_y \equiv 0 \quad ; \quad E_z \equiv 0$$
$$B_y(z,t) = -\frac{E_0}{c} \cos(kz - \omega t) \quad ; \quad B_x \equiv 0 \quad ; \quad B_z \equiv 0 \quad , \qquad (3.1)$$

wobei die Wellenzahl k mit der Frequenz ω verknüpft ist durch $\omega/k = c$ (c: Lichtgeschwindigkeit). Die Wellen (3.1) sind Lösungen der Maxwellschen Gleichungen [KP-2-11.4]; sie sind in Abb. 3.1 dargestellt.



Abb. 3.1. Linear polarisierte, monochromatische elektromagnetische Welle

Die Vektoren **E**, **B**, **k** (**k**: Wellenvektor) bilden in dieser Reihenfolge ein Rechtssystem; **E**- und **B**-Feld schwingen in Phase. Wir nennen die Lösung (3.1) eine *linear polarisierte* Welle, weil der **E**- und **B**-Vektor je in einer festen Richtung schwingen (in unserem Fall in x- bzw. y-Richtung). Die Richtung des **E**-Vektors heißt *Polarisationsrichtung*.

Um mit einer natürlichen Lichtquelle linear polarisiertes Licht zu erzeugen, brauchen wir einen **Polarisator**, z.B. in Form einer *Polaroidfolie*, welche die Eigenschaft hat, dass Licht, das *nicht* in einer festen Richtung linear polarisiert ist, in der Folie absorbiert wird. Mit Hilfe eines **Analysators**, bestehend aus einer zweiten (idealen) Polaroidfolie, können wir den Zustand der linearen Polarisation der austretenden Welle nachweisen. Sei Θ die Winkeldifferenz der Stellungen der Durchlassrichtungen der beiden Polaroidfolien. Dann folgt aus dem zeitlich gemittelten Wert des Poynting-Vektors [KP-2-12.3] für die aus dem Analysator austretende Lichtintensität (mittlere Energie pro Flächeneinheit und Zeiteinheit; Aufgabe 25)

$$I(\Theta) = \frac{1}{2\mu_0} \frac{E_0^2}{c} \cos^2 \Theta = I(0) \cos^2 \Theta \quad .$$
 (3.2)

Die Intensitätsverteilung (3.2) heißt *Malussches Gesetz*; es ist ein klassisches Resultat.

Neben der Polaroidfolie brauchen wir einen Apparat, der einen linear polarisierten Lichtstrahl *gleichzeitig* in zwei senkrecht zueinander linear polarisierte Komponenten zerlegt. Dies wird bewerkstelligt durch einen *doppelbrechenden Kalkspat* (CaCO₃)-*Einkristall* (Kalziumkarbonat; siehe Abb. 3.2).



Abb. 3.2. Doppelbrechung von linear polarisiertem Licht im Kalkspatkristall

Genauso wie die Polaroidfolie ist auch dieser Kristall optisch anisotrop: Die Eigenfrequenzen der atomaren Oszillatoren (d. h. ihre "Ferderkonstanten") sind verschieden, je nach dem ob der **E**-Vektor der Lichtwelle senkrecht oder parallel zur optischen Achse (kristallographische Hauptachse) schwingt. Daraus resultiert eine Anisotropie des Brechungsindex, und daraus folgen unterschiedliche Wellengeschwindigkeiten für die beiden Fälle. Darauf basiert folgende bemerkenswerte Eigenschaft des (durchsichtigen) Kalkspatkristalls: Bei geeigneter Orientierung des Kristalls¹ wird ein linear polarisierter Strahl, der senkrecht auf eine Kristallfläche auftrifft, in einen *ordentlichen Strahl* (gradlinig) und einen *außerordentlichen Strahl* (verlässt den Kristall parallel verschoben zum ordentlichen Strahl) aufgespalten. Der ordentliche und der außerordentliche Strahl sind *senkrecht zueinander linear polarisiert*. Schaut man durch den Kristall, dann sieht man zwei parallel zueinander verschobene Bilder des Gegenstandes hinter dem Kristall als Resultat der beiden Strahlen! (*Demonstration*)

¹ siehe z.B. *E. Hecht*, Optics, Addison-Wesley (1987), p. 282 ff.

114 3 Wahrscheinlichkeit und Quantenamplitude

Ist die Polarisationsrichtung des einlaufenden Strahls senkrecht zur Zeichenebene der Abb. 3.2, dann existiert nur der ordentliche Strahl; liegt sie in der Zeichenebene, dann gibt es nur den außerordentlichen Strahl.

3.1.2 Zirkulare Polarisation

Andere Lösungen der Maxwellschen Gleichungen im Vakuum [KP-2-12.1] sind *zirkular* polarisierte Wellen.

Hat der \mathbf{E} -Vektor einer monochromatischen elektromagnetischen Welle die Komponenten

$$E_x(z,t) = E_0 \cos(kz - \omega t)$$
; $E_y(z,t) = E_0 \sin(kz - \omega t)$; $E_z \equiv 0$,
(3.3)

dann sprechen wir von einer *rechtszirkular polarisierten* Welle. Der **E**-Vektor (3.3) definiert auch den zugehörigen **B**-Vektor, denn die elektromagnetischen Wellen sind *transversal*: Die Vektoren **E**, **B** stehen senkrecht zur Fortpflanzungsrichtung der Welle und bilden mit ihr ein Rechtssystem. Zudem ist die Amplitude des **B**-Vektors 1/c mal der Amplitude des **E**-Vektors.

Aus (3.3) folgt

$$\mathbf{E}_{R}^{2}(z,t) = E_{x}^{2}(z,t) + E_{y}^{2}(z,t) = E_{0}^{2} \quad .$$
(3.4)

Der \mathbf{E}_R -Vektor hat also einen konstanten Betrag (E_0) und dreht sich am festen Ort z als Funktion von t mit der Winkelgeschwindigkeit ω (siehe Abb. 3.3).



Abb. 3.3. Rechtszirkular polarisierte Welle

Der \mathbf{E}_R -Vektor dreht sich im *Uhrzeigersinn*, wenn wir in Richtung der Quelle schauen (Abb. 3.3). Für die feste Zeit t dreht sich der \mathbf{E}_R -Vektor, als Funktion von z, im Gegenuhrzeigersinn.

Eine linkszirkular polarisierte Welle können wir schreiben als

$$E_x(z,t) = E_0 \cos(kz - \omega t)$$
; $E_y(z,t) = -E_0 \sin(kz - \omega t)$; $E_z \equiv 0$.
(3.5)

Der Drehsinn des \mathbf{E}_L -Vektors (3.5) ist umgekehrt zum Drehsinn der rechtszirkular polarisierten Welle (sowohl als Funktion von t als auch von z).

Zur Erzeugung einer zirkular polarisierten Welle können wir aus einem Kalkspatkristall ein Plättchen herausschneiden, sodass die optische Achse (Abb. 3.2) in der Ebene der Plättchenfläche liegt. Falls wir eine linear polarisierte Welle senkrecht auf die Plättchenfläche auftreffen lassen, dann ist der Brechungsindex im Innern des Plättchens verschieden, je nachdem ob die Polarisationsrichtung der einlaufenden Welle parallel oder senkrecht zur optischen Achse orientiert ist $(n_{\parallel} \neq n_{\perp})$. Für eine beliebige Richtung des E-Vektors der einlaufenden Welle denken wir uns diesen zerlegt in eine Komponente parallel bzw. senkrecht zur optischen Achse. Die Propagation der Welle im Innern des Plättchens können wir dann als eine Superposition dieser beiden Komponenten auffassen. Im Argument der ebenen Welle (3.1) im Vakuum müssen wir k durch nk (n: Brechungsindex) ersetzen. Falls das Plättchen die Dicke d (in Strahlrichtung) hat, dann entwickelt sich eine Phasendifferenz zwischen den beiden Komponenten an der Austrittsfläche von

$$\Delta \phi = kd|n_{\perp} - n_{\parallel}| \quad , \tag{3.6}$$

wobei k die Wellenzahl im Vakuum ist. (Die beiden Teilwellen haben eine unterschiedliche Phasengeschwindigkeit.) Wir können nun die Plättchendichte d so wählen, dass (für eine feste Wellenlänge) die Phasendifferenz (3.6) einen vorgegebenen Wert hat. Beim " λ /4-Plättchen" wählen wir d so, dass $\Delta \phi = \pi/2$. Falls nun die Polarisationsrichtung der einlaufenden, linear polarisierten Welle unter einem Winkel von 45⁰ zur optischen Achse steht, dann sind die Amplituden beider Teilwellen gleich und am Austritt des Plättchens entsteht eine zirkular polarisierte Welle: An jedem Ort rotiert der E-Vektor (von konstantem Betrag) mit der Winkelgeschwindigkeit ω in einer Ebene senkrecht zur Fortpflanzungsrichtung der Welle. Ob wir dabei eine rechtsoder linkszirkular polarisierte Welle erzeugen, hängt ab von der Eintrittsfläche des Plättchens (siehe Aufgabe 30).

Schließlich werden wir einen Apparat benötigen, der eine linear polarisierte Welle gleichzeitig in eine rechts- und linkszirkular polarisierte Welle zerlegt (siehe Abb. 3.4).

Man bedient sich des Phänomens der **optischen Aktivität**. In optisch aktiven Substanzen wird die Polarisationsrichtung von linear polarisiertem Licht kontinuierlich gedreht. Ein Beispiel ist rechts- und linkshändiger Quarz

116 3 Wahrscheinlichkeit und Quantenamplitude



Abb. 3.4. Fresnelsches Prisma (Strahlteiler), bestehend aus Rechts(R)- und Links(L)-Quarz

(SiO₂). Der Effekt beruht auf einer schraubenförmigen Anordnung der Atome im Kristall oder auf Molekülen mit Drehsinn, z.B. in Lösungen. Die optische Aktivität kann man phänomenologisch beschreiben, indem man sich die linear polarisierte Welle als Superposition einer rechts- und einer linkszirkular polarisierten Welle vorstellt und den beiden Komponenten unterschiedliche Brechungsindizes zuordnet $(n_r \neq n_l)$. Die Phasengeschwindigkeiten der beiden Komponenten sind dann unterschiedlich, sodass sich zwischen den beiden Komponenten eine Phasenverschiebung ausbildet, die den E-Vektor ihrer Superposition langsam dreht. Wenn man zudem die unterschiedliche Brechung der Teilwellen an nicht senkrecht zum Strahl stehenden Flächen ausnutzt, dann kann man in einem aus "Rechts"- und "Links"-Quarz zusammengesetzten Prisma die beiden rechts- bzw. linkszirkular polarisierten Strahlen räumlich trennen (Fresnelsches Prisma; siehe Referenz in Fussnote 1, p. 309 ff]). Das Fresnelsche Prisma zerlegt also einen linear polarisierten Lichtstrahl in zwei Strahlen, die links- bzw. rechtszirkular polarisiert sind. Der Kalkspatkristall (Abb. 3.2) und das Fresnelsche Prisma sind beides Strahlteiler.

Eine Alternative zum Fresnelschen Prisma (für die Zerlegung von linear polarisiertem Licht in rechts- und linkszirkular polarisierte Strahlen) besteht darin, nach dem Kalkspatstrahlteiler der Abb. 3.2(b) ein $\lambda/4$ -Plättchen einzuschieben, welches von beiden Ausgangsstrahlen getroffen wird. Ist die optische Achse des Plättchens unter 45⁰ zu den Schwingungsrichtungen der **E**-Vektoren beider linear polarisierten Strahlen orientiert, dann werden beide Strahlen in zirkular polarisierte Wellen verwandelt, deren Drehrichtungen unterschiedlich sind (verifiziere!).

3.2 Projektionswahrscheinlichkeit und die Messung physikalischer Größen

3.2.1 Polarisation zur Basis (x,y)

Als **1. Beispiel** studieren wir das in Abb. 3.5 schematisch dargestellte *De*monstrationsexperiment, das wir zunächst erklären wollen. Das Experiment wird uns schließlich auf den neuen Begriff der *Projektionswahrscheinlichkeit* führen.



Abb. 3.5. Zerlegung von linear polarisiertem Licht in zwei – senkrecht zueinander – linear polarisierte Strahlen (schematisch)

Monochromatisches Licht der Frequenz ω , das in *i*-Richtung linear polarisiert ist, wird mit Hilfe eines (idealen) Kalkspateinkristalls (Abschn. 3.1.1) in zwei senkrecht zueinander linear polarisierte Strahlen *a* und *b* (Polarisationsrichtungen x bzw. y) zerlegt. Die Intensität des auf den Kalkspatkristall auftreffenden Lichtstrahls (Querschnittsfläche *f*) sei *I* (mittlere Energie pro Flächeneinheit und pro Zeiteinheit). Die Detektoren D_a und D_b können als Photomultiplier ausgebildet sein (Abb. 2.2); in diesem Fall registrieren sie die (mittlere) Zahl der Photonen Z_a bzw. Z_b der Teilstrahlen *a* und *b* während der Expositionszeit *t*. Das Ziel des Experiments ist es, die Intensitäten (bzw. Zählraten) der Teilstrahlen – relativ zum einlaufenden Strahl – als Funktion des Winkels θ zwischen den Polarisationsrichtungen des ordentlichen und des einlaufenden Strahls zu bestimmen.

Wir stellen zuerst die interessante Frage: Können wir dieses Experiment mit der klassischen Elektrodynamik behandeln – oder nicht? Um die Frage zu beantworten, müssen wir – im Sinne der \hbar -Regel (Abschn. 1.5) – die *charakteristische Wirkung A* bestimmen. Die wesentlichen (klassischen) Größen dieses Experiments sind: die Frequenz ω , die Strahlfläche f, die Strahlintensität I, sowie die Expositionszeit t. Aus einer Dimensionsbetrachtung folgt aus diesen Größen die charakteristische Wirkung

$$A \approx \frac{Itf}{\omega} \quad . \tag{3.7}$$

Eine klassische Behandlung des Problems ist dann zulässig, wenn $A \gg \hbar$. Um \hbar ins Spiel zu bringen, schreiben wir die Intensität I in (3.7) als

$$I = N\hbar\omega \quad , \tag{3.8}$$

wobei N die mittlere Zahl der Photonen des Strahls pro Zeiteinheit und pro Flächeneinheit (senkrecht zur Strahlrichtung) ist. Mit (3.8) folgt aus (3.7)

$$A \approx N t f \hbar = Z \hbar \quad , \tag{3.9}$$

wobei Z die Gesamtzahl der im Experiment registrierten Photonen ist, d. h.

$$Z = Z_a + Z_b \quad . \tag{3.10}$$

Die Bedingung für den klassischen Grenzfall lautet also

$$Z_a + Z_b \gg 1 \quad , \tag{3.11}$$

d.h. die Gesamtzahl der im Experiment registrierten Photonen muss sehr groß sein.

Wir untersuchen im nachfolgenden Demonstrationsexperiment sowohl den klassischen Grenzfall (3.11) als auch den quantenphysikalischen Bereich

$$Z_a + Z_b \stackrel{>}{\sim} 1 \quad . \tag{3.12}$$

Als Nächstes betrachten wir den klassischen Grenzfall und wollen das Resultat des Demonstrationsexperiments vorhersagen. In diesem Fall messen die Detektoren D_a und D_b (Abb. 3.5) ein Signal, das proportional ist zur Intensität I_a bzw. I_b (mittlere Energie pro Flächen- und Zeiteinheit) des entsprechenden Teilstrahls. Die Intensität einer elektromagnetischen Welle lässt sich berechnen aus dem Betrag des *Poynting-Vektors* (Energie pro Flächenund Zeiteinheit) [KP-2-12.3]

$$S(z,t) = \frac{1}{\mu_0} E(z,t) B(z,t) = \frac{1}{\mu_0 c} E^2(z,t) \quad , \tag{3.13}$$

wobei E, B die Beträge von **E**- und **B**-Vektor sind. (Der letzte Ausdruck in (3.13) gilt für alle fortlaufenden Wellen.)

Die Intensität ist der zeitliche Mittelwert von (3.13). Für den einfallenden, linear polarisierten Strahl ist die Intensität (Aufgabe 25)

$$I = \frac{1}{2\mu_0 c} E_0^2 \quad , \tag{3.14}$$

wobei E_0 die Amplitude des **E**-Vektors ist (3.1). Wie groß sind die Intensitäten der austretenden Teilstrahlen als Funktion des Winkels θ zwischen den Polarisationsrichtungen des ordentlichen und des einlaufenden Strahls (Abb. 3.5)? Wir denken uns den **E**-Vektor des einlaufenden Strahls auf die x- bzw. y-Richtung projiziert und finden unter Verwendung von (3.14)

$$I_a(\theta) = \frac{1}{2\mu_0 c} E_0^2 \cos^2\theta \tag{3.15}$$

und

$$I_b(\theta) = \frac{1}{2\mu_0 c} (E_0 \cos(\pi/2 - \theta))^2 = \frac{1}{2\mu_0 c} E_0^2 \sin^2 \theta \quad . \tag{3.16}$$

Aus (3.15) und (3.16) folgt mit (3.14)

$$\frac{I_a(\theta)}{I} = \cos^2 \theta \quad ; \quad \frac{I_b(\theta)}{I} = \sin^2 \theta \quad , \tag{3.17}$$

und daraus

$$\frac{I_a(\theta)}{I} + \frac{I_b(\theta)}{I} = 1 \quad . \tag{3.18}$$

Das Resultat (3.17) ist in den Kurven der Abb. 3.7 dargestellt.

Demonstrationsexperiment 10: Projectionswahrscheinlichkeit². Die Abb. 3.6 zeigt die wirkliche Anordnung des in Abb. 3.5 (schematisch) dargestellten Experiments. Der experimentelle Aufbau ist Teil des Quanteninterferenzexperiments (Abschn. 3.3.1). Aus didaktischen und technischen Gründen wird die Strahlführung symmetrisch ausgelegt. Der Strahlteiler der Abb. 3.5 ist ersetzt durch ein Wollaston-Prisma [Referenz in Fußnote 1, p. 292], dessen austretende Strahlen a und b unter 45° zur Vertikalen (senkrecht zueinander) linear polarisiert sind. Als Lichtquelle dient ein Argonionenlaser (Leistung ~1W) der Wellenlänge $\lambda = 514.5 \,\mathrm{nm}$ (1 nm = 10^{-9} m), dessen Strahl in vertikaler Richtung linear polarisiert ist. Damit der auf den Strahlteiler auftreffende Strahl eine von der (variablen) Orientierung des Polarisators unabhängige Intensität aufweist, wird der linear polarisierte Laserstrahl mittels $\lambda/4$ -Plättchen zirkular polarisiert. Als Polarisator dient ein Glan-Foucault-Prisma [Referenz in Fußnote 1, p. 291], dessen Abweichungen vom idealen Polarisatorverhalten viel kleiner sind als bei der Polaroidfolie. Aus konstruktiven Gründen werden die beiden linear

² Sowohl dieses Experiment, als auch das Quanteninterferenzexperiment (Abschn. 3.3.1), wurden konzipiert und realisiert von *Paul P. Herrmann*, Riedhoferrain 20, 8049 Zürich.

120 3 Wahrscheinlichkeit und Quantenamplitude

polarisierten Strahlen *a*, *b* mit Hilfe einer Linse zurück zur Horizontalen (z-Achse) geführt (Linsendurchmesser viel kleiner als Länge der Kammer). Das Experiment wird sowohl im *klassischen Bereich* als auch im *quantenphysikalischen Bereich* ("single-photon counting") durchgeführt. Im Letzteren ist die Abschirmung der Strahlführung gegenüber Streulicht wesentlich. Dies wird mittels (schliessbarer) lichtdichter Kammer realisiert (siehe CD-ROM).

a) Klassischer Bereich. Der bewegliche Detektor besteht aus einer Photodiode, deren Signal proportional zur Intensität des Lichtstrahls ist. Die Intensitäten I_a , I_b der Strahlen a und b werden als Funktion der Richtung ides Polarisators (Winkel θ) gemessen (für feste Position des Strahlteilers). Das Maß der Intensität I des auf den Strahlteiler auftreffenden Strahls ist $I = I_a(\theta = 0^0)$. Durch diese Festlegung werden kleine Abweichungen vom idealen Verhalten des Strahlteilers (Absorbtionseffekte) in erster Ordnung korrigiert.

Die Resultate des Experiments bestätigen voll und ganz die theoretische Vorhersage (3.17) (siehe Kurven der Abb. 3.7).

b) Quantenphysikalischer Bereich. Der Strahlabschwächer, bestehend aus einer wählbaren Anzahl von Graufiltern (Abschwächung pro Graufilter um ca. Faktor 500), wird in den Laserstrahl eingeschoben. Der Photodiodendetektor wird ersetzt durch einen Photomultiplierdetektor (Abb. 2.2) und die lichtdichte Kammer geschlossen. Die elektrischen Detektorsignale – ausgelöst durch einzelne Photonen – werden einerseits gezählt und andererseits (mittels Lautsprecher) hörbar gemacht ("Knatterbox"). Das Experiment b) besteht wiederum darin, die Detektorsignale der Strahlen a, b (diesmal sind es die Zahl der Ereignisse Z'_a , Z'_b der während einer festen Zeit t registrierten Photonen) als Funktion der Orientierung θ des Polarisators (bei fester Position des Strahlteilers) zu messen.

Eine erste Orientierung liefert uns das einfache Anhören der Knatterbox. Bei genügend kleinen Zählraten ist wohl das zeitlich-unregelmäßige (stastistisch-zufällige) Auftreten der Ereignisse das dominante Charakteristikum. Wählen wir beispielsweise die Polarisatororientierung $\theta = 30^{\circ}$, dann hören wir in der Detektorposition a eine mittlere Zählrate, die klar höher ist als diejenige der Position b. Blenden wir den Strahl vollständig aus, dann zählt der Detektor munter weiter, allerdings mit einer kleinen Zählrate von typisch 3 - 4 Ereignissen pro sec. Dies sind Untergrundereignisse des Detektors ("Dunkelzählrate"), die herrühren von thermoelektrischen Effekten, natürlicher Radioaktivität des Detektormaterials und kosmischer Strahlung. Ferner gilt es zu beachten, dass der Photomultiplier nicht jedes Photon des einfallenden Strahls registriert, weil nicht jedes in der Photokathode erzeugte Photoelektron die erste Dynode erreicht: Streuung der Photoelektronen im Kathodenmaterial, verbunden mit Richtungsänderung, Energieverlust und endlicher Austrittsarbeit sind die Ursachen.

Ein quantitatives Studium erfordert die Messung der Zählraten Z'_a , Z'_b – relativ zur Zählrate im einlaufenden Strahl – als Funktion des Winkels θ . Typische Resultate sind in Tabelle 3.1 für $\theta = 30^0$ dargestellt. Jede der drei Zeilen der Tabelle entspricht einer Messung mit je einer Messzeit von t = 25 s. Als Maß der mittleren Zahl Z von Photonen des auf den Strahlteiler

3.2 Projektionswahrscheinlichkeit und die Messung physikalischer Größen 121

einlaufenden Strahls nehmen wir wiederum die Zählrate $Z' \equiv Z'_a(\theta = 0^0)$ (1. Spalte der Tabelle 3.1). Die 4. Spalte enthält die Dunkelzählrate Z_{dunkel} des Photomultipliers, gemessen in der Detektorposition a mit $\theta = 90^0$. Die mittleren Photonzahlen in den Strahlen a, b, relativ zur mittleren Photonenzahl im Eingangsstrahl sind also gegeben durch

$$\frac{Z_a}{Z} = \frac{Z'_a - Z_{\text{dunkel}}}{Z' - Z_{\text{dunkel}}} \quad ; \quad \frac{Z_b}{Z} = \frac{Z'_b - Z_{\text{dunkel}}}{Z' - Z_{\text{dunkel}}} \quad . \tag{3.19}$$

(In der Quotientenbildung fällt die (reduzierte) Ansprechwahrscheinlichkeit des Detektors heraus!) Diese Verhältnisse sind in den letzten beiden Spalten der Tabelle 3.1 eingetragen. Die letzte Zeile der Tabelle enthält (zum Vergleich) die entsprechenden (berechneten) klassischen Verhältnisse I_a/I , I_b/I (3.17).

Tabelle 3.1. Relative Zählraten Z_a/Z , Z_b/Z im quantenphysikalischen Bereich für $\theta = 30^0$, im Vergleich zum klassischen Grenzfall

Z'	Z'_a	Z'_b	$Z_{\rm dunkel}$	Z_a/Z	Z_b/Z
6001	4496	1557	79	0.746	0.250
				± 0.015	± 0.008
6014	4459	1568	76	0.738	0.251
5976	4568	1515	92	0.761	0.242
klassischer Grenzfall				0.750	0.250

Wir wollen nun die in Tabelle 3.1 zusammengestellten Resultate diskutieren.

Zunächst fällt auf, dass die drei unter *identischen* Bedingungen durchgeführten Experimente verschiedene Resultate (Zählraten) ergeben. Vom Standpunkt der klassischen Physik aus betrachtet, kommt dies einer Katastrophe gleich. Im quantenphysikalischen Bereich dagegen sind die Zählraten statistischen Schwankungen unterworfen; scheinbar identische experimentelle Bedingungen führen nicht zu identischen Resultaten. Dieses Phänomen war uns bereits in den Experimenten von Kap. 2 begegnet. Wenn wir eine Zählung von Ereignissen mehrmals wiederholen, erhalten wir (in der Regel) jedesmal ein anderes Resultat. Die Resultate sind aber nicht beliebig, sie enthalten eine gewisse Gesetzmäßigkeit, die wir hier (speziell für unsere Situation) ergründen wollen.

Die drei Messungen der Tabelle 3.1 (die letzten beiden Spalten) sind als Punkte in Abb. 3.7 dargestellt. Die drei Punkte sind zwar unter sich verschieden, aber sie sind alle *in der Nähe des klassischen Resultates* (klassischer Grenzfall). Erhöhen wir die Messzeit (oder die Intensität des einlaufenden Strahls), dann kommen wir den Werten des klassischen Resultats immer näher. Dies ist nicht erstaunlich, denn damit erfüllen wir die Bedingung (3.11) immer besser. Interessanter ist die Reduktion der Messzeit (bzw.



Abb. 3.6. Zerlegung von linear polarisiertem Licht in zwei – senkrecht zueinander – linear polarisierte Strahlen (experimentelle Anordnung)

der Strahlintensität). In diesem Fall werden die statistischen Schwankungen der Einzelmessungen immer größer. Gibt es in diesem Bereich immer noch eine Gesetzmäßigkeit, oder führen die statistischen Schwankungen zu beliebigen Resultaten? Die Gesetzmäßigkeit bleibt grundsätzlich *die gleiche*, wie das folgende Argument zeigt. Wenn wir nämlich eine Messung mit reduzier-



Abb. 3.7. Intensitätsverhältnisse I_a/I , I_b/I (klassisch) als Funktion der Position θ des Polarisators (Kurven) und Zählratenverhältnisse Z_a/Z , Z_b/Z für $\theta = 30^0$

ter Stoßrate genügend oft wiederholen und alle Messungen zusammenfassen, dann ist das Resultat äquvalent zu dem einer einzigen Messung mit hoher Stoßrate, für welche die Bedingung (3.11) des klassischen Grenzfalls erfüllt ist. Die Aussagekraft der Einzelmessung ist allerdings viel kleiner, weil ihr *"statistischer Fehler"* (siehe Anhang A) viel größer ist. Für sehr kleine Stoßraten schließlich ($Z \approx 1$) nimmt die Aussagekraft einer Einzelmessung stetig ab.

Die statistischen Fehler der drei Messungen von Tabelle 3.1 sind nach den im *Anhang A* entwickelten Gesetzen der Fehlerfortpflanzung statistischer Fehler berechnet und in der 1. Zeile der Tabelle 3.1 eingetragen, ebenso in Abb. 3.7. Die Fehler sind gleich für alle drei Messungen.

Die Interpretation des Demonstrationsexperiments (Abb. 3.6) führt uns zu folgender Erkenntnis: Das Schicksal des einzelnen Photons im einlaufenden Strahl (Abb. 3.5) kann nicht vorhergesagt werden; wir können nur eine Wahrscheinlichkeitsaussage machen. Das Photon hat die Wahrscheinlichkeit P_a , den Strahlteiler im Strahl a zu verlassen, und die Wahrscheinlichkeit P_b , in den Strahl b zu gehen. Diese Wahrscheinlichkeiten sind gegeben durch die klassischen Intensitätsverhältnisse (3.17), also

$$P_a(\theta) = \cos^2 \theta \quad ; \quad P_b(\theta) = \sin^2 \theta \quad .$$
 (3.20)

Es gilt (idealer Strahlteiler!)

$$P_a(\theta) + P_b(\theta) = 1 \quad . \tag{3.21}$$

Diese Resultate sind unabhängig von der physikalischen Beschaffenheit des Strahlteilers; ob es sich beispielsweise um einen Kalkspatkristall oder um ein Wollaston-Prisma handelt, ändert das Resultat nicht. Wir können deshalb den Strahlteiler als eine "Black Box" betrachten und folgenden Abstraktionsschritt vornehmen. Das Photon befindet sich generell in einem Eigenzustand des Impulses $\mathbf{p} = (0,0,E/c)$. Der Anfangszustand ist zudem ein Zustand der Polarisation in *i*-Richtung, und die beiden Endzustände sind Polarisationszustände in x- bzw. y-Richtung (Abb. 3.5). Wir können nun P_a interpretieren als eine Eigenschaft des Photons im Zustand *i*: P_a bezeichnet den Anteil der Eigenschaft "Polarisation in x-Richtung" des Photons. Entsprechend steht P_b für den Anteil der Eigenschaft "Polarisation in y-Richtung". Da diese Eigenschaften für das einzelne Photon nicht vorhersagbar sind, müssen wir diese Anteile als Wahrscheinlichkeiten interpretieren; wir nennen sie **Projek-**tionswahrscheinlichkeiten. Um diesen Sachverhalt auszudrücken, wählen wir die Schreibweise

$$P_a \equiv P(x \leftarrow i) = \cos^2 \theta \quad ; \quad P_b \equiv P(y \leftarrow i) = \sin^2 \theta \quad . \tag{3.22}$$

Der Ausgangszustand wird gewissermaßen auf den Endzustand "projiziert". (Konventionell schreibt man den Ausgangszustand rechts und den Endzustand links.) Der Winkel θ in (3.22) definiert den Zustand *i* bezüglich des (x, y)-Systems der Basiszustände der (linearen) Polarisation (Abb. 3.5). Die Projektionswahrscheinlichkeiten $P(x \leftarrow i), P(y \leftarrow i)$ sind innere Eigenschaften des Photons, unabhängig vom Experiment.

Das Demonstrationsexperiment ist eine Messung der Projektionswahrscheinlichkeiten der Polarisation $P(x \leftarrow i)$ und $P(y \leftarrow i)$. Das Experiment besteht darin, das Photon in den Polarisationszuständen x, y zu präparieren und die relative Häufigkeit dieser Zustände zu messen.

Das Demonstrationsexperiment ist eine Messung der physikalischen Größe **Polarisation zur Basis** (x,y) am Photon des Ausgangszustandes.

Die Projektionswahrscheinlichkeit – mit ihren allgemeinen Eigenschaften – ist ein *fundamentaler Begriff der Quantenphysik*. Wichtige Eigenschaften der Projektionswahrscheinlichkeit können wir bereits an unserem Beispiel ablesen:

• Vollständigkeitsrelation. Aus (3.22) folgt

$$P(x \leftarrow i) + P(y \leftarrow i) = 1 \quad . \tag{3.23}$$

In Worten: Die Projektionswahrscheinlichkeiten eines Ausgangszustandes, summiert über alle Basiszustände der Polarisation, sind eins.

Es wird sich gleich herausstellen, dass diese Aussage für beliebige Ausgangszustände der Polarisation gilt.

• Orthogonalitätsrelationen. Aus (3.22) folgt

$$P(x \leftarrow x) = 1 \quad ; \quad P(x \leftarrow y) = 0$$

$$P(y \leftarrow x) = 0 \quad ; \quad P(y \leftarrow y) = 1 \quad . \tag{3.24}$$

In Worten: Ist der Ausgangszustand ein Basiszustand der Polarisation, dann ist die Projektionswahrscheinlichkeit mit gleichem Endzustand eins; sind die beiden Zustände verschieden, verschwindet die Projektionswahrscheinlichkeit.

Wenn wir uns die entsprechende Messung vorstellen, dann ist der erste Teil der Aussage eine Selbstvertständlichkeit: die Messung des Zustandes, in dem sich das Photon bereits befindet, liefert mit Sicherheit diesen Zustand. Der zweite Teil der Aussage folgt dann aus dem ersten Teil, zusammen mit (3.23).

Anschließend erläutern wir den wichtigen, allgemeinen Begriff der Projektionswahrscheinlichkeit an zwei weiteren Beispielen. Doch vorher erwähnen wir noch eine interessante Variante des Demonstrationsexperiments (Abb. 3.6).

Wir könnten das Experiment mit Photonen *beliebiger* (elliptischer) Polarisation durchführen. Auch in diesem Fall würde man die Vollständigkeitsrelation

$$P(x \leftarrow p) + P(y \leftarrow p) = 1 \tag{3.25}$$

finden, wobei hier p einen beliebigen Zustand der Polarisation des Photons bezeichnet – eines Photons im Impulseigenzustand p. Dies bringt zum Ausdruck, dass (x, y) eine **vollständige Basis** der Polarisation ist. Man kann tatsächlich auch *theoretisch* zeigen, dass ein (beliebiger) Zustand elliptischer Polarisaton (klassisch) vollständig dargestellt wird durch die Zustände x, y(vgl. Aufgabe 27).

Die Vollständigkeitsrelation (3.25) demonstriert die Erhaltung der Photonenzahl zwischen dem einlaufenden Strahl und den beiden Ausgangsstrahlen.

3.2.2 Die z-Komponente des Drehimpulses

Das **2. Beispiel** zur Projektionswahrscheinlichkeit basiert auf dem *Stern-Gerlach-Experiment* (Abschn. 2.4). Wir können die Apparatur des Stern-Gerlach-Experiments als *Polarisator* der Ag-Atome verwenden, indem wir einen der beiden austretenden Stahlen ausblenden (siehe Abb. 3.8).

Die Atome sowohl des durchgehenden als auch des ausgeblendeten Strahls sind je in einem Eigenzustand des Drehimpulses $J_{z'}$ bezüglich der z'-Achse, entweder mit Eigenwert $J_{z'} = +\frac{1}{2}\hbar$ oder $J_{z'} = -\frac{1}{2}\hbar$. Wir können die Eigenzustände charakterisieren durch die magnetische Quantenzahl $m_i = \pm 1/2$ (bezüglich der z'-Achse). Der durchgehende Strahl fällt auf eine zweite Stern-Gerlach-Apparatur ein, welche – relativ zur Strahlrichtung – um den Winkel θ rotiert ist (Abb. 3.8); die Symmetrieachse senkrecht zum Strahl ist die z-Achse. Der zweite Apparat wirkt als *Strahlteiler*; die Atome der austretenden Strahlen befinden sich in Eigenzuständen des Drehimpulses J_z bezüglich der z-Achse. Im einen Strahl haben die Atome den Eigenwert $J_z = +\frac{1}{2}\hbar$ (magnetische Quantenzahl m = +1/2), im anderen $J_z = -\frac{1}{2}\hbar$ (m = -1/2). Die Zahl 126 3 Wahrscheinlichkeit und Quantenamplitude



Abb. 3.8. Messung des Drehimpulses J_z eines Ag-Atoms, das sich in einem Eigenzustand von J_{z^\prime} befindet

der Atome dieser beiden Teilstrahlen werden im Detektor gemessen, relativ zur Zahl der Atome im einlaufenden Strahl.

Dieses Experiment wird bestimmt durch die Projektionswahrscheinlichkeiten $P(m \leftarrow m_i)$ mit $m = \pm 1/2$ und $m_i = \pm 1/2$. Die Projektionswahrscheinlichkeiten sind vom Winkel θ (Abb. 3.8) abhängig. Wir finden (experimentell) auch hier die Gültigkeit der Vollständigkeitsrelation

$$P\left(\frac{1}{2}\leftarrow m_i\right) + P\left(-\frac{1}{2}\leftarrow m_i\right) = 1 \quad , \tag{3.26}$$

für beide Zustände $m_i = \pm 1/2$ und beliebige Winkel θ .

Wählen wir die speziellen Winkel $\theta = 0^0$ bzw. 180⁰, dann sind die Atome des einlaufenden Strahls in einem Eigenzustand von J_z und ihre Drehimpulszustände lassen sich charakterisieren durch die Quantenzahlen $m' = \pm 1/2$ (bezüglich der z-Achse!). Für diesen Fall finden wir die Orthogonalitätsrelationen der Projektionswahrscheinlichkeiten

$$P(m \leftarrow m') = \delta_{mm'} \tag{3.27}$$

 $(\delta = 1 \text{ für } m, m' \text{ gleich}; \delta = 0 \text{ für } m, m' \text{ verschieden}).$

Ein interessanter Spezialfall ist der Winkel $\theta = 90^{0}$. Welches ist die Wahrscheinlichkeit dafür, beispielsweise den Drehimpuls $J_{z} = +\frac{1}{2}\hbar$ zu messen an einem Atom, das sich in einem Eigenzustand m_{i} von $J_{z'}$ befindet (z'-Achse senkrecht zur z-Achse)? Aus Symmetriegründen muss gelten

$$P\left(\frac{1}{2} \leftarrow m_i\right) = P\left(-\frac{1}{2} \leftarrow m_i\right) \quad . \tag{3.28}$$

3.2 Projektionswahrscheinlichkeit und die Messung physikalischer Größen 127

Zusammen mit der Vollständigkeitsrelation (3.26) folgt

$$P\left(\frac{1}{2}\leftarrow m_i\right) = P\left(-\frac{1}{2}\leftarrow m_i\right) = 1/2 \quad . \tag{3.29}$$

Das Atom ist also zu je 50% im Zustand m = +1/2 bzw. m = -1/2, für beide Zustände m_i .

Wir können das Experiment der Abb. 3.8 auch mit einem *unpolarisierten* Strahl von Ag-Atomen betreiben. Dies ist genau das ursprüngliche Stern-Gerlach-Experiment (Abschn. 2.4; Abb. 2.38)! Auch in diesem Fall findet man (experimentell) die Gültigkeit der Vollständigkeitsrelation. Dies ist ein starker Hinweis darauf, dass die Relation allgemein gilt, in der Form

$$P\left(\frac{1}{2}\leftarrow u\right) + P\left(-\frac{1}{2}\leftarrow u\right) = 1 \quad , \tag{3.30}$$

wobei u ein *beliebiger* Zustand des Drehimpulses ist. Die Aussage (3.30) bedeutet, dass die *Eigenzustände* von J_z eine vollständige Basis darstellen.

Zusammenfassend halten wir fest:

Das Stern-Gerlach-Experiment ist eine Messung der physikalischen Größe **z-Komponente des Drehimpulses** am Atom.

Die Vollständigkeitsrelation (3.30) sowie die Orthogonalitätsrelationen (3.27) gelten (in entsprechender Form) für beliebige Spinquantenzahlen j (nicht nur für j = 1/2) und beliebige, nicht-relativistische Quantonen (nicht nur für Atome).

Es gibt einen wichtigen Unterschied zwischen dem Polarisationsexperiment (1. Beispiel) und dem Stern-Gerlach-Experiment (2. Beispiel). Für die Polarisation des Photons können wir die Projektionswahrscheinlichkeiten *berechnen*, indem wir die klassische Elektrodynamik heranziehen (klassischer Grenzfall). Etwas Entsprechendes für die Atome steht uns (noch) nicht zur Verfügung. Deshalb können wir die Projektionswahrscheinlichkeiten des Stern-Gerlach-Experiments hier nicht (allgemein) berechnen. Die Mittel dazu werden im Abschn. 3.3.4 bereitgestellt.

3.2.3 Polarisation zur Basis (R,L)

Im **3. Beispiel** wenden wir uns wieder den Polarisationseigenschaften des Photons zu. Wir denken uns den Kalkspatkristall des Demonstrationsexperiments (Abb. 3.5) ersetzt durch ein (ideales) *Fresnel-Prisma* (Abb. 3.4), welches den einfallenden, linear polarisierten Strahl in zwei Strahlen (a,b) teilt, die rechts- bzw. linkszirkular polarisiert sind. Die Detektoren D_a , D_b zählen die Photonen, relativ zur Photonenzahl des einlaufenden Strahls. Können wir das Resultat dieses Experiments vorhersagen?

Dazu müssen wir die Projektionswahrscheinlichkeiten $P(R \leftarrow x)$ und $P(L \leftarrow x)$ berechnen, wobei wir mit x die Polarisationsrichtung des einlaufenden Strahls bezeichnen. Wir denken uns den klassischen Grenzfall realisiert und zerlegen den **E**-Vektor der linear polarisierten Welle in einen rechts- bzw. linkszirkular polarisierten Anteil (siehe Abb. 3.9).



Abb. 3.9. Zerlegung einer linear polarisierten Welle in rechts- und linkszirkular polarisierte Anteile

 Der **E**-Vektor des einlaufenden (monochromatischen) Strahls ist transversal und hat am Or
tz die Form

$$\mathbf{E}(t) = (E_x(t), E_y(t)) = E_0(\cos \omega t, 0) \quad . \tag{3.31}$$

(Der Zeitnullpunkt sei so gewählt, dass die (konstante) Phase kz im Argument der linear polarisierten Welle verschwindet; anschließend wird über die Zeit gemittelt.) Diese Welle lässt sich schreiben als Superposition einer rechtsund linkszirkular polarisierten Welle, deren **E**-Vektoren gegeben sind durch

$$\mathbf{E}_{R}(t) = \frac{E_{0}}{2} (\cos \omega t, -\sin \omega t)$$
$$\mathbf{E}_{L}(t) = \frac{E_{0}}{2} (\cos \omega t, \sin \omega t) \quad . \tag{3.32}$$

In (3.32) wurde (3.3) und (3.5) verwendet. Der zeitlich gemittelte Poynting-Vektor (3.13) liefert mit (3.31) und (3.32) die Intensitätsverhältnisse (verifiziere!)

$$\frac{I_R}{I} = 1/2$$
 ; $\frac{I_L}{I} = 1/2$, (3.33)

wobei I die Intensität des einlaufenden Strahls ist. Aus (3.33) folgt das einfache Resultat (klassischer Grenzfall!)

$$P(R \leftarrow x) = 1/2$$
; $P(L \leftarrow x) = 1/2$, (3.34)

unabhängig von der x-Richtung. Dies ist genau das Resultat des Zählexperiments.

Auch dieses Experiment lässt sich verallgemeinern, indem wir einen beliebig (elliptisch) polarisierten Strahl auf das Fresnel-Prisma einfallen lassen. Man findet wieder die Vollständigkeitsrelation

$$P(R \leftarrow p) + P(L \leftarrow p) = 1 \quad , \tag{3.35}$$

wobei p ein beliebiger Zustand der Polarisation des Photons ist. Auch diese Relation lässt sich im klassischen Grenzfall beweisen (siehe Aufgabe 27). Die Zustände (R, L) bilden also wiederum eine **vollständige Basis** der Polarisation.

Zusammenfassend:

Das Experiment mit dem Fresnel-Prisma ist eine Messung der physikalischen Größe **Polarisation zur Basis (R, L)** am Photon.

Zur Übersicht und für spätere Referenz stellen wir alle berechneten Projektionswahrscheinlichkeiten der Polarisation in Tabelle 3.2 zusammen. Hinsichtlich der linearen Polarisation wollen wir zwei verschiedene, beliebig gegeneinander positionierte Bezugssysteme (vollständige Basen) wählen, nämlich die Basis (x, y) und die Basis (x', y'), welche durch eine Rotation um den Winkel θ aus der ersten hervorgeht (Abb. 3.10). Die entsprechenden Projektionswahrscheinlichkeiten folgen alle aus (3.20).

Die Matrix der Projektionswahrscheinlichkeiten der Tabelle 3.2 ist symmetrisch. Dies bedeutet, dass die Projektionswahrscheinlichkeiten invariant sind gegenüber einer Vertauschung von Anfangs- und Endzustand. Wir sind hier auf eine Gesetzmäßigkeit gestoßen, die allgemeine Gültigkeit hat. Für zwei beliebige Zustände v, w des Quantons gilt

$$P(v \leftarrow w) = P(w \leftarrow v) \quad . \tag{3.36}$$

Mit andern Worten: Die Projektionswahrscheinlichkeiten inverser Projektionen sind gleich.

-								
	x	y	x'	y'	R	L		
x	1	0	$\cos^2 \theta$	$\sin^2 \theta$	1/2	1/2		
y	0	1	$\sin^2 \theta$	$\cos^2 \theta$	1/2	1/2		
x'	$\cos^2 \theta$	$\sin^2 \theta$	1	0	1/2	1/2		
y'	$\sin^2 \theta$	$\cos^2 \theta$	0	1	1/2	1/2		
R	1/2	1/2	1/2	1/2	1	0		
L	1/2	1/2	1/2	1/2	0	1		

Tabelle 3.2. Projektionswahrscheinlichkeiten $P(f \leftarrow i)$ für Polarisationszustände. Die 1. Zeile bezeichnet die Anfangszustände (i); die 1. Spalte die Endzustände (f)



Abb. 3.10. Relative Position der Basen der Polarisation (x,y) und (x',y')

3.2.4 Polarisation und Drehimpuls des Photons

Ausgangspunkt unserer Überlegungen in diesem Kapitel waren die Polarisationseigenschaften des Lichts, wie sie in der *klassischen* Elektrodynamik definiert sind (Abschn. 3.1). Im Verlauf der Untersuchungen waren wir gezwungen, auf die Quantennatur des Lichts einzugehen. Im Zusammenhang mit der Polarisation sprachen wir von "Polarisationszuständen des Photons". Die Polarisationszustände sind aber bis jetzt rein klassisch definiert. Die Frage drängt sich deshalb auf: Welches sind die *quantenphysikalischen* Eigenschaften der Polarisationszustände? Können wir diesen Zuständen beispielsweise *Eigenwerte* (im Sinne der Quantenphysik) zuordnen?

Das Experiment von Richard A. $Beth^3$ beantwortet diese Frage. In Abb. 3.11 ist eine vereinfachte Variante des Experiments dargestellt.

Ein $\lambda/4$ -Plättchen (kreiszylindrische Scheibe) ist an einem Torsionsfaden aufgehängt und bildet ein hochempfindliches Torsionspendel. Ein Strahl von linear polarisiertem Licht wird vertikal von unten auf das Plättchen geschickt

³ *R.A. Beth*, Phys. Rev. 50 (1936) 115.



Abb. 3.11. Messung des Drehimpulses J_z des Photons mit Hilfe eines $\lambda/4$ -Plättchens

(Abb. 3.11(a)). Rechtszirkular polarisiertes Licht (R) verlässt das $\lambda/4$ -Plättchen an der oberen Fläche. Das Plättchen erfährt dabei ein mechanisches Drehmoment (M_z) in positiver z-Richtung, welches durch die Auslenkung des Torsionspendels gemessen werden kann. Wird der linear polarisierte Strahl im $\lambda/4$ -Plättchen absorbiert (etwa in einer am Plättchen angebrachten, absorbierenden Folie), dann ist $M_z = 0$. Das in der Anordnung der Abb. 3.11(a) auf das Plättchen übertragene Drehmoment ist proportional zur Anzahl Nder Photonen, die pro Zeiteinheit das Plättchen verlassen, und (experimentell) gegeben durch

$$M_z = N\hbar \quad . \tag{3.37}$$

Nach dem Drallsatz [KP-1-3.3]

$$M_z = \frac{dL_z}{dt} \tag{3.38}$$

bedeutet (3.37) eine entsprechende Zunahme des Drehimpulses des Plättchens. Wegen der Drehimpulserhaltung des Gesamtsystems (Strahl plus Plättchen), müssen wir jedem das Plättchen verlassenden, rechtszirkular polarisierten Photon den Drehimpuls

$$J_z = -\hbar \tag{3.39}$$

zuordnen. Die Drehimpulsverhältnisse sind in Abb. 3.11(b) für *ein* herausgegriffenes Photon, welches das $\lambda/4$ -Plättchen verlässt, schematisch dargestellt. Für *linkszirkular polarisierte Photonen* findet man entsprechend⁴

$$J_z = +\hbar \quad . \tag{3.40}$$

Das Experiment von Beth zeigt uns das wichtige Resultat:

Die Basiszustände (R,L) der Polarisation sind Eigenzustände des Drehimpulses J_z in Bewegungsrichtung des Photons; die Eigenwerte sind

$$\boxed{J_z = \pm \hbar} \tag{3.41}$$

Wir sagen: Das Photon hat "Spin Eins". Dieser Befund hat weitreichende Konsequenzen für alle Prozesse der Atom-, Kern- und Teilchenphysik, in denen Photonen beteiligt sind.

Wenn wir daran denken, dass *linear* polarisierte Photonen, die am Torsionspendel absorbiert werden, keinen Impuls übertragen, könnte man vermuten, dass die Basiszustände (x, y) der Polarisation Eigenzustände des Drehimpulses mit Eigenwert $J_z = 0$ sind. Dies trifft aber nicht zu! Nach (3.34) sind die Projektionswahrscheinlichkeiten

$$P(R \leftarrow x) = P(L \leftarrow x) = 1/2 \quad . \tag{3.42}$$

Dies bedeutet, dass der Zustand x je zu 50% rechts- bzw. linkszirkular polarisiert ist. Da die Zustände R, L Eigenzustände von J_z mit Eigenwert $\mp \hbar$ sind, hat der Zustand x den *Erwartungswert* Null, also

$$\langle J_z \rangle = 0 \quad . \tag{3.43}$$

Diese Eigenschaft erklärt das Verhalten des im Torsionspendel absorbierten Strahls von linear polarisierten Photonen. Das Spektrum der Zustände besteht aus den zwei Werten $\pm\hbar$, und die spektrale Breite ist (verifiziere!)

$$\Delta J_z = \hbar \quad . \tag{3.44}$$

Im Unterschied zu den meisten anderen Quantonen existiert für das Photon kein Ruhesystem: in jedem Inertialsystem bewegt es sich mit der Lichtgeschwindigkeit c. Der Drehimpuls J_z des Photons ist definiert bezüglich seiner *Bewegungsrichtung* (z-Richtung). Der Spezialfall des Photons beruht auf dessen *extremem relativistischem* Verhalten. Damit im Zusammenhang steht auch die Tatsache, dass das Photon die Masse Null hat [KP-1-8.9.3].

⁴ Wir verwenden hier die Definition der Händigkeit, wie sie in der Optik üblich ist. (In der Teilchenphysik definiert man den Zustand (3.40) als rechtszirkular.)

3.2.5 Zusammenfassung

Wir schicken der eigentlichen Zusammenfassung allgemeine Überlegungen voraus, die zentral sind für die Messungen in der Quantenphysik.

Der erste Schritt jeder quantenphysikalischen Messung besteht darin, ein Quanton in einem wohl definierten quantenphysikalischen Zustand zu präparieren. In einem Strahlexperiment ist es der Ausgangszustand, dessen Eigenschaften durch die Messung bestimmt werden sollen. Dieser Schritt unterscheidet sich radikal von der Messung in der klassischen Physik. Wie wir anschließend an einem konkreten Beispiel zeigen werden, ist es (in der Regel) notwendig, eine große Zahl von Quantonen (der gleichen Art) zu formieren, die sich alle im gleichen Ausgangszustand befinden. Ein einzelnes Quanton genügt im Allgemeinen nicht zur Messung seiner Eigenschaften – ganz im Gegensatz zur entsprechenden Situation in der klassischen Physik. Dort genügt beispielsweise ein einziges Federpendel, um ganzen Generationen von Physikerinnen und Physikern die Geheimnisse des harmonischen Oszillators beizubringen. Dagegen lassen sich die Quanteneigenschaften, etwa des Photons, nicht aus einem Einzelexemplar der Spezies gewinnen.

Unser Beispiel ist das Demonstrationsexperiment (Abb. 3.5). Zur Vereinfachung der Diskussion betrachten wir ideale Detektoren (100% Ansprechwahrscheinlichkeit, Dunkelstoßrate Null). Das Ziel besteht darin, die Projektionswahrscheinlichkeiten $P(x \leftarrow i)$, $P(y \leftarrow i)$ zu messen. Wir reduzieren die Intensität des einlaufenden Strahls, exponieren die beiden Detektoren gleichzeitig und warten ab, bis einer der beiden das erste Photon gemessen hat. Wegen der statistischen Schwankungen ist die Aussagekraft dieser Messung hinsichtlich der Bestimmung von $P(x \leftarrow i)$, $P(y \leftarrow i)$ praktisch gleich null. Wir müssten das Experiment mit dem Photon im gleichen Zustand mehrmals wiederholen, um eine Aussage zu bekommen. Dies ist aber unmöglich, denn das Photon ist beim Messvorgang verschwunden! Es hat nämlich in der Photokathode den Prozess des Photoeffekts ausgelöst, der in der Folge das elektrische Nachweissignal erzeugte. Im Allgemeinen ändert das einzelne Quanton beim Messvorgang seinen Zustand (– oder es verschwindet insgesamt).⁵

Zur Durchführung quantenphysikalischer Messungen brauchen wir deshalb eine "Quantonfabrik", welche eine Vielzahl von identischen Quantonen erzeugt, die alle möglichst im selben Zustand sind, dessen Eigenschaften wir messen wollen. *Beispiele* von solchen Quantonfabriken sind: der Laser, die Sonne, Atomstrahlen, radioaktive Quellen (natürliche oder künstliche, durch Kernreaktionen erzeugte), jeder Teilchenbeschleuniger der Kern- und Teilchenphysik, die kosmische Strahlung etc.

⁵ In ganz speziellen Anordnungen ist es möglich, das Quanton vom Zustand nach der Messung wieder in den Anfangszustand zu bringen und die Messung am *gleichen* Quanton mehrmals auszuführen.
134 3 Wahrscheinlichkeit und Quantenamplitude

Neben den eigentlichen Strahlexperimenten gibt es das weite Feld der **Streuexperimente**. Die Strahlen, bestehend aus *einer* Sorte von Quantonen, werden an Quantonen einer zweiten Sorte gestreut, die sich in großer Zahl (und möglichst identischem Zustand) im *Target* des Streuexperiments befinden. Man misst Intensität und Eigenschaften der gestreuten Quantonen als Funktion des Streuwinkels, realtiv zur Intensität des einlaufenden Strahls. Das Ziel kann darin bestehen, mit Hilfe der bekannten Eigenschaften der Quantonen des Strahls, Eigenschaften der Quantonen des Targets zu bestimmen oder aber die *Kräfte* (Wechselwirkungen) zwischen beiden Sorten von Quantonen zu untersuchen. Beispiele von Streuexperimenten aus unserem Erfahrungsbereich sind: Resonanzstreuung an Atomen, Streuung von α -Teilchen an Atomkernen, Streuung von Röntgenstrahlen und Elektronen an Kristallen, Compton-Streuung am Elektron, Mössbauer-Resonanzstreuung an Kernen, Resonanzstreuung des Pions am Nukleon.

Nach diesem Exkurs über Quantonfabriken und ihre Strahlen kehren wir zurück zum Inhalt dieses Abschnitts, nämlich zur *Projektionswahrscheinlichkeit* im Zusammenhang mit der *Messung physikalischer Größen*.

Wir können den Begriff der Projektionswahrscheinlichkeit folgendermaßen definieren:

Die **Projektionswahrscheinlichkeit** $P(v \leftarrow w)$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, am Zustand w des Quantons den Zustand v zu messen;

$$0 \le P(v \leftarrow w) \le 1 \quad . \tag{3.45}$$

Über die Eigenschaften physikalischer Größen wissen wir aus Kap. 2 bereits Folgendes. Jede physikalische Größe X eines Quantons ist charakterisiert durch einen Satz von Eigenzuständen u_n . Befindet sich das Quanton in einem dieser Eigenzustände, dann hat es die durch den entsprechenden Eigenwert X_n gegebene Eigenschaft. (Das Spektrum der Eigenwerte kann diskret oder kontinuierlich sein.)

Eine weitere, an den Beispielen dieses Abschnitts demonstrierte, allgemeine Eigenschaft physikalischer Größen lautet:

Die Gesamtheit der Eigenzustände (u_n) der physikalischen Größe **X** bilden eine **vollständige Basis** in Bezug auf die physikalische Größe.

Ausgedrückt durch die Projektionswahrscheinlichkeiten, lautet diese Aussage:

$$\sum_{n} P(u_n \leftarrow w) = 1 \tag{3.46}$$

wobei w einen beliebigen Ausgangszustand bezeichnet und die Summe in (3.46) über alle Eigenzustände der physikalischen Größe zu erstrecken ist.

Der Ausdruck (3.46) ist die allgemeine Form der Vollständigkeitsrelation.

Ist der Ausgangszustand identisch mit einem der Eigenzustände ($\omega = u_n$), dann gilt

$$P(u_n \leftarrow u_n) = 1 \tag{3.47}$$

Aus (3.47) und (3.46) folgt mit (3.45) für $n\neq n'$

$$P(u_n \leftarrow u_{n'}) = 0 \quad ; \quad n \neq n'$$
(3.48)

Die Aussagen (3.47) und (3.48) zusammengenommen stellen die allgemeine Form der **Orthogonalitätsrelationen** dar.

Eine weitere allgemeine Eigenschaft von Projektionswahrscheinlichkeiten betrifft **inverse Projektionen**:

Die Projektionswahrscheinlichkeit ist invariant gegenüber einer Vertauschung von Anfangs- und Endzustand. In einer Formel ausgedrückt:

$$P(v \leftarrow w) = P(w \leftarrow v) \tag{3.49}$$

wobei v, w beliebige Zustände des Quantons sind.

Schließlich halten wir fest:

Die Projektionswahrscheinlichkeiten für die Polarisationszustände des Photons sind mittels klassischer Elektrodynamik berechenbar.

3.3 Die Quantenamplitude und ihre Gesetze

3.3.1 Das Quanteninterferenzexperiment

Das Demonstrationsexperiment wird zeigen, dass uns noch ein wesentlicher Begriff der Quantenphysik fehlt.

Der schematische Aufbau des Quantenintereferenzexperiments ist in Abb. 3.12 dargestellt.

Die Anordnung geht aus Abb. 3.5 hervor, indem wir anstelle der Detektoren D_a , D_b einen zweiten (identischen) Kalkspatkristall spiegelsymmetrisch zum ersten anordnen, sodass die Strahlen a, b wieder zusammengeführt werden. Die Kalkspatkristalle sollen so dimensioniert sein, dass die optische Wegdifferenz für die Teilstrahlen a, b ein ganzes Vielfaches der Wellenlänge des monochromatischen Lichtes ist. Ein zweiter Polarisator P_2 (identisch zu P_1) mit der Durchlassrichtung f wird in den wiedervereinigten Strahl eingeschoben. Anschließend wird der Strahl im Detektor D gemessen. Die Durchlassrichtungen θ, ψ der Polarisatoren sind in Abb. 3.12 definiert.



Abb. 3.12. Quanteninterferenzexperiment (schematisch)

Das Demonstrationsexperiment werden wir u.a. speziell für den Winkel $\psi = 90^{0}$ durchführen. Wir wollen versuchen, das Ergebnis vorherzusagen.

Die <u>1. Vorhersage</u> basiert auf der klassischen Elektrodynamik. In Abb. 3.13 sind die Verhältnisse speziell für $\psi = 90^{\circ}$ dargestellt.

Wir betrachten "äquivalente Orte" in verschiedenen Bereichen der Strahlen a und b der Anordnung der Abb. 3.12. Äquivalente Orte haben eine optische Wegdifferenz, die ein ganzes Vielfaches der Wellenlänge ist. Wenn wir den **E**-Vektor längs des Strahls a vom einlaufenden Strahl i aus bis nach dem Polarisator P_2 verfolgen, dann erhalten wir die Komponente des **E**-Vektors



Abb. 3.13. Projektionen des E-Feldes für $\psi = 90^{\circ}$

in f-Richtung durch zweimalige Multiplikation (an äquivalenten Orten) mit einem Projektionsfaktor (Abb. 3.13)

$$\cos\theta(-\sin\theta) \quad . \tag{3.50}$$

Für den Strahl b sind die beiden entsprechenden Projektionsfaktoren

$$\sin\theta\cos\theta \quad . \tag{3.51}$$

Aus (3.50) und (3.51) folgt, dass das resultierende **E**-Feld in f-Richtung verschwindet. Deshalb erwarten wir als klassische Vorhersage die im Detektor D zu messende Intensität

$$I = 0$$
 , (3.52)

unabhängig vom Winkel θ .

Die <u>2. Vorhersage</u> basiert auf dem Begriff der Projektionswahrscheinlichkeit. Wir stellen uns vor: Jedes Photon des Strahls *i*, welches schließlich im Detektor *D* gemessen wird, durchläuft die Apparatur entweder im Strahl *a* oder im Strahl *b*. Die Wahrscheinlichkeit $P^{(a)}$ dafür, dass ein Photon, das längs des Strahls *a* läuft, im Detektor gezählt wird, ist gleich dem Produkt der Projektionswahrscheinlichkeiten der beiden Elemente, nämlich

$$P^{(a)} = P(x \leftarrow i)P(f \leftarrow x) \quad . \tag{3.53}$$

Entsprechend ist die Detektionswahrscheinlichkeit $P^{(b)}$ für ein Photon, das den Weg längs des Strahls b genommen hat

$$P^{(b)} = P(y \leftarrow i)P(f \leftarrow y) \quad . \tag{3.54}$$

Die einzelnen Projektionswahrscheinlichkeiten sind in Tabelle 3.2 gegeben. Damit folgt aus (3.53) und (3.54)

$$P^{(a)} = P^{(b)} = \cos^2 \theta \sin^2 \theta \quad . \tag{3.55}$$

Die gesamte Detektionswahrscheinlichkeit ist somit

$$P = P^{(a)} + P^{(b)} = 2\cos^2\theta\sin^2\theta \quad . \tag{3.56}$$

Die Vorhersage (3.56) ist abhängig vom Winkel θ und im Allgemeinen ungleich null – im Gegensatz zur Vorhersage (3.52)! Wo ist die Wahrheit? Wir befragen das Experiment.

Demonstrationsexperiment 11: *Quanteninterferenz.* Die wirkliche Anordnung des Experiments der Abb. 3.12 basiert auf der Apparatur der Abb. 3.6, in welcher – spiegelsymmetrisch zur Linsenebene – ein weiteres Wollaston-Prisma (in der Funktion von K_2) und ein weiterer Glan-Foucault-Polarisator (in der Funktion von P_2) eingeschoben sind. Die zusammengeführten Strahlen *a* und *b* bewegen sich nach dem zweiten Wollaston-Prisma längs der z-Achse und werden schließlich im Photomultiplierdetektor *D* gemessen. Wir können die Funktionsweise des Demonstrationsexperiments anhand der Abb. 3.12 verstehen.

Alle Experimente werden mit reduzierter Intensität des Laserstrahls (im Quantenbereich) durchgeführt. Das Interferometer ist so eingestellt, dass die Wegdifferenz der Teilstrahlen ein ganzes Vielfaches der Wellenlänge beträgt.

Im Experiment (a) wählen wir die Durchlassrichtungen der Polarisatoren $\theta = 45^0$ und $\psi = 90^0$. Für alle Messungen des Demonstrationsexperiments wird dieselbe Expositionszeit (Messzeit) des Detektors gewählt. Wir zählen die im Detektor D gemessenen Photonen, wiederholen die Messung drei Mal und tragen die Resultate in der 1. Spalte der Tabelle 3.3 ein. Nun fahren wir die Blende B (Abb. 3.12) in den Teilstrahl b ein, sodass der Teilstrahl a unbeeinflusst bleibt. Die Resultate der dreimaligen Messung wird in der 2. Spalte eingetragen ($Z^{(a)}$): Die Zählrate bei ausgeblendetem Teilstrahl b ist signifikant größer!

Im Experiment (b) drehen wir die Polarisationsrichtung *i* auf die Position $\theta = -45^{\circ}$, sodass der Winkel zwischen den Polarisationsrichtungen *i* und *f* den Wert $\psi = 180^{\circ}$ annimmt. Die entsprechenden Zählraten (dreimalige Wiederholung) sind in der 3. Spalte der Tabelle 3.3 aufgeführt.

Schließlich blenden wir den Gesamtstrahl vor dem Detektor D aus, um die Dunkelzählrate Z_{dunkel} des Detektors zu bestimmen. Die Resultate der dreimaligen Messung sind in der letzten Spalte der Tabelle 3.3 zu sehen. Die statistischen Fehler der Messungen der 1. Zeile wurden mit A.17 (Anhang A) berechnet.

Wir wollen nun die Resultate des Quanteninterferenzexperiments (Tabelle 3.3) erklären, indem wir einen allgemeinen Ausdruck für die Projektionswahrscheinlichkeit $P(f \leftarrow i)$ suchen. Normalerweise gehen wir vom **E**-Feld der einlaufenden Welle *i* aus und bestimmen das **E**-Feld an äquivalentem Ort der auslaufenden Welle *f* (siehe z.B. Abb. 3.13). Der Poynting-Vektor

$\theta = 45^0$; $\psi = 90^0$	$Z^{(a)}$	$\theta = -45^0;\psi = 180^0$	$Z_{\rm dunkel}$
72	1269	4809	59
± 8	± 36	± 69	± 8
52	1300	4963	61
69	1249	4868	70

Tabelle 3.3. Zählraten des Quanteninterferenzexperiments

liefert dann die entsprechenden Intensitäten I_i , I_f , und $P(f \leftarrow i) = I_f/I_i$ ist schließlich die gesuchte Projektionswahrscheinlichkeit.

Es gibt einen einfacheren Weg zur Bestimmung von $P(f \leftarrow i)$, ohne den Umweg über die **E**-Felder gehen zu müssen. Wir betrachten nur die *Projektionsfaktoren*, d. h. die Kosinusse der Zwischenwinkel, mit denen die **E**-Felder an äquivalenten Orten längs der Strahlen zu multiplizieren sind. Auf diese Weise erhalten wir direkt

$$P(f \leftarrow i) = |\cos(x, i)\cos(f, x) + \cos(y, i)\cos(f, y)|^2 \quad . \tag{3.57}$$

Die Winkeldefinition in (3.57) entspricht der Konvention (siehe Abb. 3.12)

$$\cos(f,i) = \cos\psi \quad . \tag{3.58}$$

Der erste Summand in (3.57) ist das Produkt der beiden Projektionsfaktoren längs des Teilstrahls a, der zweite Summand ist das entsprechende Produkt längs des Teilstrahls b, und die Summe beschreibt die *Interferenz* zwischen den Teilstrahlen.

Wir können die Projektionswahrscheinlichkeit $P(f \leftarrow i)$ auf eine noch einfachere, alternative Art schreiben, indem wir beachten, dass der nach K_2 vereinigte Strahl identisch ist zum einlaufenden Strahl *i* (Abb. 3.12), denn die Aufspaltung in die Teilstrahlen ist wieder aufgehoben. Somit gilt

$$P(f \leftarrow i) = |\cos(f, i)|^2 = \cos^2 \psi$$
 , (3.59)

unabhängig vom Winkel θ .

Mit (3.59) können wir die Interferenzexperimente (a) und (b) sehr einfach verstehen. Im Experiment (a) war $\psi = 90^0$ und damit folgt aus (3.59) $P(f \leftarrow i) = 0$. Wenn wir von den Zählraten der 1. Spalte der Tabelle 3.3 die Dunkelzählrate des Detektors subtrahieren, dann sind die Messresultate tatsächlich mit Null verträglich. Im Experiment (b) war $\psi = 180^0$ und somit ist $P(f \leftarrow i) = 1$. Die Zählraten der 3. Spalte entsprechen also der Intensität des einlaufenden Strahls Z_i .

Nun betrachten wir das Experiment (a) mit ausgeblendetem Strahl b (2. Spalte). Nur der Teilstrahl a trägt bei und wir haben

$$P^{(a)}(f \leftarrow i) = |\cos(x, i)\cos(f, x)|^2 = \cos^2\theta\cos^2(\theta + \psi) \quad . \tag{3.60}$$

140 3 Wahrscheinlichkeit und Quantenamplitude

Speziell für $\theta = 45^0$ und $\psi = 90^0$ folgt aus (3.60)

$$P^{(a)}(f \leftarrow i) = 1/4$$
 . (3.61)

Nach Subtraktion der Dunkelzählraten liefert das Verhältnis zwischen den Zahlen der Spalten 2 und 3 (Intensität des einlaufenden Strahls) sehr genau den Wert (3.61).

Wir kehren zurück zu den Vorhersagen für den speziellen Winkel $\psi = 90^{0}$ (Beispiele: Experiment (a), 1. Spalte der Tabelle 3.3). Die 1. Vorhersage (3.52) ist also richtig.

Wir müssen noch die interessante Frage beantworten: Warum ist unsere 2. Vorhersage (3.56) falsch? Die Aussage "jedes Photon... durchläuft die Apparatur entweder im Strahl a oder im Strahl b " ist falsch! Wir dürfen das Photon nicht als Teilchen ansehen, das in der Apparatur der Abb. 3.12 einen Weg durchläuft. Das Quantonkonzept lehrt uns, dass sich das Photon weder als Teilchen noch als Welle verhält; es ist im Allgemeinen weder lokalisiert noch ausgedehnt. Dieser neuartige Aspekt äußert sich besonders deutlich im Interferenzexperiment. Vom klassischen Interferenzexperiment – etwa der Interferenz zweier kohärenter Lichtquellen (Abb. 2.17) – sind wir gewohnt, dass die Teilstrahlen miteinander interferieren. Man kann sich auch im Quanteninterferenzexperiment die Frage stellen: Was interferiert hier womit? Diese Frage ist schwierig zu beantworten. Der mittlere Abstand zwischen Photonen im Strahl der Abb. 3.12 ist viel größer als die Längsausdehnung der Apparatur (Aufgabe 29). In jedem beliebigen Zeitpunkt ist also höchstens "ein Photon" in der Apparatur! Die gelegentlich gemachte Aussage: "das Photon inteferiert mit sich selbst" ist problematisch. Die richtige Haltung dem Quanteninterferenzexperiment gegenüber ist die, wirklich Abschied zu nehmen von den klassischen Vorstellungen, und sich darauf zu beschränken, die Gesetzmäßigkeiten zu finden, denen das (neuartige) Quanton unterworfen ist.

Offensichtlich spielen die Projektionsfaktoren vom Typ (3.58), wie sie in (3.57) auftreten, eine zentrale Rolle im Interferenzexperiment der Abb. 3.12. Wir geben ihnen deshalb eine besondere Bezeichnung und nennen sie **Quantenamplituden**

$$\langle f|i\rangle \equiv \cos(f,i)$$
 . (3.62)

Konventionell steht rechts der Anfangszustand der Projektion und links der Endzustand. Das *Betragsquadrat der Quantenamplitude* (3.62) ist gleich der entsprechenden *Projektionswahrscheinlichkeit* (siehe z.B. Tabelle 3.2):

$$\underline{P(f \leftarrow i)} = |\langle f|i \rangle|^2 \quad . \tag{3.63}$$

Die Bedeutung des Begriffs der Quantenamplitude geht weit über das Interferenzexperiment hinaus. Es handelt sich vielmehr um einen zentralen Begriff der Quantenphysik, den wir für ein beliebiges Paar von Zuständen definieren können – in Verbindung mit einer beliebigen Projektionswahrscheinlichkeit (3.45). Die Relation (3.63) gilt also *universell*. Im nächsten Abschnitt illustrieren wir diesen Sachverhalt, indem wir u.a. die Quantenamplituden bestimmen, deren Projektionswahrscheinlichkeiten in Tabelle 3.2 zusammengestellt sind.

Wir kehren zurück zum Interferenzexperiment. Die in (3.57) und (3.59) gefundenen Kombinationen der Quantenamplituden der Teilprojektionen zur Quantenamplitude der Gesamtprojektion gelten allgemein. Wir formulieren das entsprechende zentrale Prinzip der Quantenphysik:

Superpositionsprinzip der Quantenamplituden

Führt ein Projektionsprozess von einem Ausgangszustand \boldsymbol{w} über eine vollständige Basis von Zwischenzuständen $\boldsymbol{u_n}$ zu einem Endzustand (Messzustand) \boldsymbol{v} , dann ist die Quantenamplitude der Gesamtprojektion

$$\langle v|w\rangle = \sum_{n} \langle v|u_n\rangle \langle u_n|w\rangle$$
(3.64)

wobei $\langle v|u_n\rangle\langle u_n|w\rangle$ das Produkt der Quantenamplituden der über u_n führenden Teilprojektionen ist. Die Projektionswahrscheinlichkeit ist

$$P(v \leftarrow w) = |\langle v | w \rangle|^2 \tag{3.65}$$

Die Summe über alle Zwischenzustände in (3.64) bringt die Unbestimmtheit der Weginformation zum Ausdruck. Diese Summe bedingt im Allgemeinen die Interferenz aller möglichen Teilwege im Prozess (3.65).

Ein weiteres zentrales Prinzip der Quantenphysik (dokumentiert durch das Experiment (a) mit ausgeblendetem Teilstrahl b, (3.60)) ist das

Prinzip der sequentiellen Faktorisierung

Führt ein Projektionsprozess von einem Anfangszustand \boldsymbol{w} über einen wohl definierten Zwischenzustand \boldsymbol{u} zu einem Endzustand (Messzustand) \boldsymbol{v} , dann ist die Projektionswahrscheinlichkeit

$$P^{(u)}(v \leftarrow w) = |\langle v|u \rangle \langle u|w \rangle|^2 = P(v \leftarrow u)P(u \leftarrow w)$$
(3.66)

wobei $\langle v|u\rangle$, $\langle u|w\rangle$ die Quantenamplituden der Teilprojektionen sind.

Die Unbestimmtheit des Zwischenzustandes ist verschwunden – und damit auch die Interferenz! Nur in diesem Fall ist die Projektionswahrscheinlichkeit für den Gesamtprozess gleich dem Produkt der Projektionswahrscheinlichkeiten der Teilprozesse.

Wir kehren nochmals kurz zum Quanteninterferenzexperiment zurück, das uns zu den beiden Prinzipien geführt hat, und fassen zusammen. Der zentrale Aspekt jedes Quanteninterferenzexperiments ist die Abwesenheit von Weginformation. Umgekehrt bedeutet Weginformation ("which-path information") immer das Verschwinden der Interferenz. Weginformation und Interferenz schließen sich gegenseitig aus.

In den Abschnitten 4.1 und 4.2.1 werden uns weitere Quanteninterferenzexperimente begegnen.

3.3.2 Zirkulare Polarisation und inverse Projektionen

Wir kehren zurück zum 3. Beispiel im Abschn. 3.2.3 und wollen die den Projektionswahrscheinlichkeiten $P(R \leftarrow r)$, $P(L \leftarrow r)$ zugrunde liegenden Quantenamplituden $\langle R|r \rangle$, $\langle L|r \rangle$ bestimmen, wobei r ein beliebiger Zustand linearer Polarisation ist und R, L sind rechts- bzw. linkszirkular polarisierte Photonen. Aus (3.65) folgt mit (3.34) für die Beträge der Quantenamplituden

$$|\langle R|r\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad ; \quad |\langle L|r\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad . \tag{3.67}$$

Wir stellen zwei allgemein gültige Aussagen an den Anfang.

Erstens wird sich zeigen, dass Quantenamplituden im Allgemeinen komplexe Größen sind. Jede Quantenamplitude ist also von der Form

$$\underline{\langle w|v\rangle = Ae^{i\delta}} \quad , \tag{3.68}$$

wobei A ($0 \le A \le 1$) und δ reelle Zahlen sind. Da wir in unserem Fall mit (3.67) die Beträge der Quantenamplituden kennen, handelt es sich also darum, die Phasenwinkel zu bestimmen.

Zweitens sind die Phasenwinkel δ im Allgemeinen *nicht eindeutig* festgelegt. Die einzige physikalische Manifestation der Phasenwinkel sind *Interferenzexperimente*. Wir zeigen anschließend, dass nur Phasen*differenzen* messbare physikalische Konsequenzen haben. Dazu betrachten wir ein beliebiges Zweiweg-Interferenzexperiment. Aus (3.64) und (3.65) folgt⁶

$$P(v \leftarrow w) = (\langle v|w\rangle^{(1)} + \langle v|w\rangle^{(2)})\overline{(\langle v|w\rangle^{(1)} + \langle v|w\rangle^{(2)})}$$
$$= |\langle v|w\rangle^{(1)}|^2 + |\langle v|w\rangle^{(2)}|^2 + \{\langle v|w\rangle^{(1)}\overline{\langle v|w\rangle^{(2)}} + \langle v|w\rangle^{(2)}\overline{\langle v|w\rangle^{(1)}}\} \quad (3.69)$$

wobei

$$\langle v|w\rangle^{(1)} \equiv \langle v|u_1\rangle\langle u_1|w\rangle \quad ; \quad \langle v|w\rangle^{(2)} \equiv \langle v|u_2\rangle\langle u_2|w\rangle \quad . \tag{3.70}$$

In den ersten beiden Termen von (3.69) geht keine Phaseninformation ein; es kommen nur die Beträge der vier Quantenamplituden vor. Man überzeugt sich leicht, dass im Interferenzterm von (3.69) Phasenwinkel*differenzen*

⁶ Die Linien bezeichnen das Konjugiert-Komplexe des entsprechenden Ausdrucks.

der vier Quantenamplituden auftreten. Die notwendigen und hinreichenden Forderungen an die Phasen der Quantenamplituden sind die, dass eindeutige Vorhersagen für alle Interferenzexperimente resultieren müssen. Wir arbeiten deshalb mit *Phasenkonventionen* für die Quantenamplituden, die grundsätzlich nicht eindeutig sind; nur die messbaren Aussagen bezüglich der Projektionswahrscheinlichkeiten müssen eindeutig sein.

Zur Bestimmung der Phasen der Quantenamplituden $\langle R|r\rangle$, $\langle L|r\rangle$ führen wir eine vollständige Basis (x, y) der Polarisation ein (siehe Abb. 3.14) und wenden das Superpositionsprinzip der Quantenamplituden (3.64) an.



Abb. 3.14. Zustände linearer Polarisation r, s in der vollständigen Basis (x, y)

Die Quantenamplitude $\langle R|r\rangle$ lässt sich damit schreiben als

$$\langle R|r\rangle = \langle R|x\rangle\langle x|r\rangle + \langle R|y\rangle\langle y|r\rangle \quad . \tag{3.71}$$

Dadurch haben wir die uns bekannten Quantenamplituden $\langle x|r\rangle$, $\langle y|r\rangle$ ins Spiel gebracht⁷. Mit der Konvention (3.58) folgt aus der Winkeldefinition der Abb. 3.14

$$\langle R|r\rangle = \langle R|x\rangle\cos\theta + \langle R|y\rangle\sin\theta \quad . \tag{3.72}$$

Zunächst wollen wir zeigen, dass die Quantenamplitude $\langle R|r\rangle$ nicht reell sein kann. Wegen (3.67) gilt

⁷ Die der Relation (3.71) entsprechende Messung ist eine Modifikation des Interferenzexperiments der Abb. 3.12: Der Polarisator P_2 ist ersetzt durch ein $\lambda/4$ -Plättchen, welches die zirkulare Polarisation misst. Da das Superpositionsprinzip der Quantenamplituden allgemeine Aussagen macht über die Gesamtheit aller Interferenzexperimente, müssen wir nicht mehr für jede Anwendung ein entsprechendes Experiment erfinden.

144 3 Wahrscheinlichkeit und Quantenamplitude

$$|\langle R|r\rangle| = |\langle R|x\rangle| = |\langle R|y\rangle| = 1/\sqrt{2} \quad . \tag{3.73}$$

Wären alle drei Quantenamplituden reell, dann wäre die rechte Seite der mit $\sqrt{2}$ multiplizierten Gleichung (3.72) dem Betrag nach gleich

$$\cos\theta \pm \sin\theta \equiv \sqrt{2}\sin(\pi/4\pm\theta) \quad , \tag{3.74}$$

und dieser Ausdruck müsste vom Betrag Eins sein, für beliebige Winkel θ . Dies ist offensichtlich nicht der Fall. Somit haben wir bewiesen, dass die Amplitude $\langle R|r\rangle$ komplex sein muss.

Die Gleichung (3.72) muss identisch erfüllt sein in θ . Die (komplexe) Quantenamplitude $\langle R|r \rangle$ können wir deshalb ansetzen in der Form

$$\langle R|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi(\theta)} \quad , \tag{3.75}$$

wobe
i $\phi(\theta)$ eine zunächst unbekannte Winkelfunktion ist. Aus
 (3.75) folgt mit der Winkeldefinition der Abb. 3.14

$$\langle R|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi(0)} \quad ; \quad \langle R|y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi(\pi/2)} \quad .$$
 (3.76)

Ein Phasenfaktor $e^{i\delta}$, der allen drei Quantenamplituden in (3.72) gemeinsam ist, liefert keine messbaren Effekte. Deshalb können wir den Phasenwinkel in einer Amplitude konventionell festschreiben. Wir setzen

$$\langle R|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad , \tag{3.77}$$

d.h. $\phi(0) = 0$. Nun setzen wir (3.77), (3.76) und (3.75) in (3.72) ein und zerlegen die Gleichung nach Imaginär- und Realteil. Wir erhalten

$$\sin \phi(\theta) = \sin \phi(\pi/2) \cdot \sin \theta$$

$$\cos \phi(\theta) = \cos \theta + \cos \phi(\pi/2) \cdot \sin \theta \quad . \tag{3.78}$$

Die Gleichungen (3.78) haben zwei Lösungen, nämlich

$$\phi(\theta) = \theta \quad (\text{Lösung I}) \tag{3.79}$$

und

$$\phi(\theta) = -\theta$$
 (Lösung II) . (3.80)

Beide Lösungen sind verträglich mit (3.77). Für $\langle R|r\rangle$ wählen wir konventionell die Lösung II

$$\langle R|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\theta} \quad . \tag{3.81}$$

Aus (3.81) folgt dann mit $\theta = \pi/2$

3.3 Die Quantenamplitude und ihre Gesetze 145

$$\langle R|y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\frac{\pi}{2}} = \frac{-i}{\sqrt{2}}$$
 (3.82)

Zur Bestimmung der Phase von $\langle L|r\rangle$ gehen wir gleich vor; man erhält wiederum die beiden Lösungen (3.79) und (3.80). Da die Quantenamplituden $\langle L|r\rangle$ und $\langle R|r\rangle$ verschieden sein müssen, ist hier die Lösung I realisiert

$$\langle L|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} \quad . \tag{3.83}$$

Aus (3.83) folgt speziell für $\theta = 0, \pi/2$

$$\langle L|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad ; \quad \langle L|y\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} \quad .$$
 (3.84)

Wir fassen alle bis jetzt gewonnenen Bestimmungen von Quantenamplituden der Polarisationszustände in Tabelle 3.4 zusammen.

Tabelle 3.4. Quantenamplituden $\langle f | i \rangle$ für Polarisationszustände. Die 1. Zeile bezeichnet die Anfangszustände (i); die 1. Spalte die Endzustände (f)

	x	y	x'	y'	R	L
x	1	0	$\cos \theta$	$-\sin \theta$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
y	0	1	$\sin \theta$	$\cos \theta$	$\frac{i}{\sqrt{2}}$	$\frac{-i}{\sqrt{2}}$
x'	$\cos \theta$	$\sin heta$	1	0	$\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\theta}$
y'	$-\sin\theta$	$\cos \theta$	0	1	$\frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\theta}$	$\frac{-i}{\sqrt{2}}e^{-i\theta}$
R	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{-i}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\theta}$	$\frac{-i}{\sqrt{2}} e^{-i\theta}$	1	0
L	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{i}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta}$	$\frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\theta}$	0	1

Dies sind zunächst die Quantenamplituden linearer Polarisation (3.62), wobei die Winkeldefinition in Abb. 3.10 gegeben ist. Zudem tragen wir die Resultate (3.77), (3.82), (3.84) sowie (3.81) und (3.83) (mit $r \equiv x'$) in der Tabelle ein. Die Quantenamplituden $\langle R|y'\rangle$, $\langle L|y'\rangle$ der Tabelle 3.4 erhalten wir aus (3.81) und (3.83) (mit $r \equiv y'$), indem wir θ durch ($\theta + \pi/2$) ersetzen (gemäß Abb. 3.14).

Nun wenden wir uns den Quantenamplituden **inverser Projektionen** zu. Gegeben sei die Quantenamplitude $\langle v|w\rangle$ beliebiger Zustände v, w. Frage: Können wir daraus die Quantenamplitude $\langle w|v\rangle$ der inversen Projektion (Vertauschung von Anfangs- und Endzustand) bestimmen?

Wir betrachten zunächst wiederum die Polarisationszustände und wollen die inversen Quantenamplituden $\langle r|R\rangle$, $\langle r|L\rangle$ bestimmen. Der Tabelle 3.2 entnehmen wir die Beträge

146 3 Wahrscheinlichkeit und Quantenamplitude

$$|\langle r|R \rangle| = 1/\sqrt{2}$$
; $|\langle r|L \rangle| = 1/\sqrt{2}$. (3.85)

Die gleiche Methode, die uns von (3.67) über (3.71) zu den Lösungen (3.81) und (3.83) geführt hat, können wir auch hier anwenden (ausgehend von (3.85)). Für die Phasen der Quantenamplituden $\langle r|R \rangle$ und $\langle r|L \rangle$ werden wir wiederum die beiden Lösungen (3.79) und (3.80) finden (verifiziere!). Falls wir aber einmal die Konvention (3.81) für $\langle R|r \rangle$ getroffen haben, dann sind die Phasen für $\langle r|R \rangle$ und $\langle r|L \rangle$ eindeutig. Wir können dies folgendermaßen einsehen. Betrachte zwei Zustände linearer Polarisation r und s (Abb. 3.14). Nach (3.62) ist die Quantenamplitude $\langle r|s \rangle$ gegeben durch

$$\langle r|s \rangle = \cos(\theta' - \theta)$$
 . (3.86)

Wir wenden das Superpositionsprinzip der Amplituden (3.64) bezüglich einer vollständigen Basis (R, L) an und schreiben (3.86) als

$$\langle r|s \rangle = \langle r|R \rangle \langle R|s \rangle + \langle r|L \rangle \langle L|s \rangle$$
 (3.87)

Aus (3.81) und (3.83) (mit $s \equiv r$) und (3.86) können wir (3.87) schreiben als

$$\cos(\theta' - \theta) = \langle r|R \rangle \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\theta'} + \langle r|L \rangle \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta'} \quad . \tag{3.88}$$

Wir betrachten nun den Spezialfall $s \to r$, d. h. $\theta' \to \theta$; (3.88) geht dabei über in

$$1 = \langle r|R \rangle \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\theta} + \langle r|L \rangle \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} \quad . \tag{3.89}$$

Die Gleichung (3.89) kann nur durch eine Wahl der Phasen identisch erfüllt werden, nämlich

$$\langle r|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta}$$
; $\langle r|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\theta}$, (3.90)

womit die Eindeutigkeit der Phasenzuordnung bewiesen ist.

Mit diesem Resultat können wir die Tabelle 3.4 vervollständigen, einmal indem wir für r in (3.90) entweder x ($\theta = 0$) oder y ($\theta = \pi/2$) wählen und indem wir $r \equiv x'$ setzen. Schließlich wählen wir $r \equiv y'$ und ersetzen gleichzeitig θ in (3.90) mit ($\theta + \pi/2$).

Dem Vergleich von (3.90) mit den früheren Resultaten (3.81) und (3.83) entnehmen wir das bemerkenswerte Resultat

$$\langle R|r\rangle = \overline{\langle r|R\rangle} \quad ; \quad \langle L|r\rangle = \overline{\langle r|L\rangle} \quad .$$
 (3.91)

Diese Gesetzmäßigkeit gilt allgemein:

Jede Quantenamplitude $\langle v|w\rangle$ ist gleich dem Konjugiert-Komplexen der Quantenamplitude der inversen Projektion:

$$\langle v|w\rangle = \overline{\langle w|v\rangle} \tag{3.92}$$

Die gesamte Matrix der Tabelle 3.4 hat die Eigenschaft (3.92); jedes Element ist gleich dem Konjugiert-Komplexen des an der Diagonale gespiegelten Elements. Aus (3.92) folgt allgemein die uns bekannte Eigenschaft (3.49) der Projektionswahrscheinlichkeiten

$$P(v \leftarrow w) = \langle v | w \rangle \overline{\langle v | w \rangle} = \overline{\langle w | v \rangle} \langle w | v \rangle = P(w \leftarrow v) \quad . \tag{3.93}$$

Für einen beliebigen Zustand v gilt

$$P(v \leftarrow v) = |\langle v|v \rangle|^2 = 1 \quad . \tag{3.94}$$

(Die Messung des Zustandes v am Zustand v liefert mit Sicherheit den Zustand!) Wir treffen die *natürliche Phasenwahl*

$$\langle v|v\rangle = 1 \quad . \tag{3.95}$$

Nun wenden wir das Superpositionsprinzip der Amplituden (3.64) an und schieben eine vollständige Basis u_n von Zwischenzuständen ein:

$$1 = \langle v | v \rangle = \sum_{n} \langle v | u_n \rangle \langle u_n | v \rangle \quad . \tag{3.96}$$

Andererseits gilt die Vollständigkeitsrelation (3.46)

$$1 = \sum_{n} P(u_n \leftarrow v) = \sum_{n} \overline{\langle u_n | v \rangle} \langle u_n | v \rangle \quad . \tag{3.97}$$

Aus dem Vergleich der allgemein gültigen Ausdrücke (3.96) und (3.97) folgt

$$\langle v|u_n\rangle = \overline{\langle u_n|v\rangle}$$
 . (3.98)

Mit (3.98) können wir nun (3.92) für *beliebige* Zustände v, w beweisen, indem wir wiederum das Superpositionsprinzip (3.64) anwenden:

$$\langle v|w\rangle = \sum_{n} \langle v|u_{n}\rangle\langle u_{n}|w\rangle = \sum_{n} \overline{\langle u_{n}|v\rangle\langle w|u_{n}\rangle}$$
$$= \sum_{n} \overline{\langle w|u_{n}\rangle\langle u_{n}|v\rangle} = \overline{\langle w|v\rangle} \quad . \tag{3.99}$$

Aus Tabelle 3.4 ist ersichtlich, dass die Matrix der Quantenamplituden innerhalb einer vollständigen Basis die Einheitsmatrix ist. Dies ist Ausdruck der allgemeinen **Orthogonalitätsrelation für Quantenamplituden**

$$\langle u_n | u_{n'} \rangle = \delta_{nn'}$$
 . (3.100)

Die Eigenschaft (3.100) ist einerseits eine Folge der natürlichen Phasenwahl

$$\langle u_n | u_n \rangle = 1 \tag{3.101}$$

und andererseits der Orthogonalität der Projektionswahrscheinlichkeiten, denn (3.48) ist gleichbedeutend mit

$$\langle u_n | u_{n'} \rangle = 0 \quad ; \quad n \neq n' \quad . \tag{3.102}$$

3.3.3 Reiner Zustand und Gemisch

Wir kehren zurück zu den Stern-Gerlach-Experimenten (Abschn. 3.2.2 und 2.4) und wollen die Eigenschaften "polarisierter" und "unpolarisierter" Strahlen von Ag-Atomen einander gegenüberstellen.

Erstens betrachten wir den ausgeblendeten, *polarisierten* Atomstrahl der Abb. 3.8. Die Ag-Atome sind in einem festen Eigenzustand von $J_{z'}$ (Quantenzahl m_i). Der Strahlteiler erlaubt es, die beiden Projektionswahrscheinlichkeiten $P(\frac{1}{2} \leftarrow m_i)$ und $P(-\frac{1}{2} \leftarrow m_i)$ zu bestimmen, wobei $m = \pm \frac{1}{2}$ die Eigenzustände von J_z sind; die Projektionswahrscheinlichkeiten sind abhängig vom Winkel θ . Wir bezeichnen den Zustand des Ag-Atoms des polarisierten Strahls als **reinen Zustand**.

Alle im Zusammenhang mit dem Superpositionsprinzip der Quantenamplitude (3.64) und dem Prinzip der sequenziellen Faktorisierung (3.66) auftretenden Zustände sind *reine Zustände*, insbesondere auch die (beliebigen) Zustände w und v. Physikalisch gesehen ist der reine Zustand eines Quantons immer verbunden mit einem *isolierten* Quanton, das nicht in Wechselwirkung mit den Objekten seiner Umgebung steht.

Zweitens betrachten wir den einlaufenden, *unpolarisierten* Atomstrahl der Abb. 2.38 (ursprüngliches Stern-Gerlach-Experiment). Auch hier könnten wir den Strahlteiler, mit der y-Achse als Rotationsachse, in eine beliebige Position (θ) bringen. Im Gegensatz zum polarisierten Atomstrahl würde aber jede Komponente des geteilten Strahls – unabhängig vom Rotationswinkel θ – je 50 % der Intensität des einlaufenden (unpolarisierten) Strahls enthalten. Dies folgt allein aus Symmetriegründen: Der unpolarisierte Strahl (im Gegensatz zum polarisierten Strahl) hat keine ausgezeichnete z-Richtung. Wir bezeichnen den Zustand der Ag-Atome des unpolarisierten Strahls als **Gemisch**.

Um den physikalischen Unterschied zwischen Gemisch und reinem Zustand zu verstehen, müssen wir die Entstehung des unpolarisierten Strahls im Ofen betrachten. Die Ag-Atome sind kräftigen Stößen mit den Atomen des Dampfes unterworfen. Dies bedeutet, dass die einzelnen Ag-Atome elektromagnetischen Feldern ausgesetzt sind, die in Stärke und Richtung ständig wechseln. Dadurch werden die Ag-Atome zwischen verschiedenen Orientierungen ihres Drehimpulses (Spin) "hin und her geworfen". Der vom Ofen emittierte Atomstrahl ist eine *statistische Mischung* von Atomen *verschiedener* Spinorientierungen (vgl. 2. Beispiel, Abschn. 3.3.4). Da bei diesem Vorgang keine Richtung ausgezeichnet ist, sind aus Symmetriegründen die beiden Ausgangsstrahlen des Strahlteilers in Abb. 2.38 gleichberechtigt.

Es ist interessant, diese Erkenntnisse auf die verschiedenen Strahlen der *Quantonfabriken* (Abschn. 3.2.5) anzuwenden. Dabei stellen wir fest, dass es Strahlen gibt, deren Quantonen sich in einem *reinen Zustand* befinden. Beispiele dafür sind: der Laserstrahl mit beliebigem (allgemeinem) Polarisationszustand sowie polarisierte Teilchenstrahlen von Beschleunigern. Es gibt aber

auch Strahlen, deren Quantonen Gemische sind. Dazu gehören alle unpolarisierten Strahlen, beispielsweise auch γ -Strahlen von radioaktiven Quellen, oder Photonen von Glühlampen, deren Atomkerne bzw. Atome unpolarisiert sind.

Bei den Streuexperimenten schließlich müssen wir (zusätzlich zu den Quantonen der Strahlen) auch die Strukturen der Quantonen der Targets betrachten. Auch hier gibt es *polarisierte* oder *unpolarisierte* Targetquantonen, welche *reinen Zuständen* bzw. Gemischen (statistisch gemischten Zuständen) entsprechen.

3.3.4 Quanton mit Spin 1/2

Eine große Klasse von Quantonen hat Spin 1/2. Dazu gehören beispielsweise alle *Leptonen* (Abschn. 8.2), etwa das *Elektron*, der wichtigste Baustein der uns umgebenden Materie. Unter den zusammengesetzten Quantonen gibt es eine Reihe von Grundzuständen und angeregten Zuständen von *Atomen* und *Atomkernen*, welche Spin 1/2 haben (Beispiel: Grundzustand des Silberatoms). Ferner existieren *Baryonen* mit Spin 1/2 (Abschn. 8.2), z.B. die Nukleonen (Proton und Neutron).

Wir studieren hier die Eigenschaften eines beliebigen Drehimpulszustandes u eines ruhenden Quantons, in Bezug auf eine vollständige Basis von Eigenzuständen einer Komponente seines Drehimpulses. Als Basis wählen wir die Eigenzustände von J_z . Der Zustand $u = u(\theta, \phi)$ ist definiert als Eigenzustand der Drehimpulskomponente in einer beliebigen Richtung, welche durch die Polarwinkel θ, ϕ gegeben ist (Abb. 3.15).



Abb. 3.15. Eigenzustand des Drehimpulses $u(\theta, \phi)$

150 3 Wahrscheinlichkeit und Quantenamplitude

Der Kreiskegel repräsentiert den Zustand u im Vektormodell (siehe Abb. 2.34). Für die beiden Basiszustände wählen wir die Bezeichnungen (in Anlehnung an Abb. 3.15)

$$m_z = 1/2 : ,, \uparrow ``; m_z = -1/2 : ,, \downarrow ``.$$
 (3.103)

Das Ziel besteht darin, die Quantenamplituden

$$\langle \uparrow | u(\theta, \phi) \rangle$$
 , $\langle \downarrow | u(\theta, \phi) \rangle$ (3.104)

als Funktion der Polarwinkel zu berechnen.

Die Vollständigkeitsrelation verlangt

$$|\langle \uparrow | u(\theta, \phi) \rangle|^2 + |\langle \downarrow | u(\theta, \phi) \rangle|^2 = 1 \quad . \tag{3.105}$$

Weiterhin müssen die Orthogonalitätsrelationen

$$|\langle \uparrow | \uparrow \rangle|^2 = |\langle \downarrow | \downarrow \rangle|^2 = 1 \tag{3.106}$$

und

$$\langle \uparrow | \downarrow \rangle = \langle \downarrow | \uparrow \rangle = 0 \tag{3.107}$$

erfüllt sein. Die allgemeine Form der Quantenamplituden

$$\langle \uparrow | u(\theta, \phi) \rangle = \cos \Theta(\theta, \phi) \, e^{i \, \Phi_{\uparrow}(\theta, \phi)} \tag{3.108}$$

$$\langle \downarrow | u(\theta, \phi) \rangle = \sin \Theta(\theta, \phi) \, e^{i \, \Phi_{\downarrow}(\theta, \phi)} \quad , \tag{3.109}$$

wobe
i $\Theta, \varPhi_{\uparrow}, \varPhi_{\downarrow}$ beliebige Funktionen der Polarwinkel sind, befriedigt die Relation (3.105). Aus (3.106) folgt dann

$$\cos\Theta(0,\phi) = \sin\Theta(\pi,\phi) = 1 \tag{3.110}$$

und aus (3.107)

$$\cos \Theta(\pi, \phi) = \sin \Theta(0, \phi) = 0 \quad . \tag{3.111}$$

Die Gleichungen (3.110) und (3.111) haben die Lösung

$$\Theta(\theta, \phi) = \Theta(\theta) = \theta/2 \quad . \tag{3.112}$$

Damit lassen sich die Quantenamplituden schreiben als

$$\langle \uparrow | u(\theta, \phi) \rangle = \cos(\theta/2) \, e^{i \, \Phi_{\uparrow}(\theta, \phi)} \quad ; \quad \langle \downarrow | u(\theta, \phi) \rangle = \sin(\theta/2) \, e^{i \, \Phi_{\downarrow}(\theta, \phi)} \quad .$$
(3.113)

Die Festlegung der Phasenwinkel $\Phi_{\uparrow}, \Phi_{\downarrow}$ geschieht mit folgendem heuristischen Argument. Das Problem als Ganzes ist *rotationssymmetrisch* bezüglich der *z-Achse*. Deshalb müssen die Objekte, nämlich die Quantenamplituden $\langle \uparrow | u \rangle, \langle \downarrow | u \rangle$, diese Symmetrie repräsentieren. Die beiden Objekte sind einerseits parametrisiert durch die Drehimpulsquantenzahlen $m_z = \pm 1/2$ und andererseits räumliche Funktionen auf der Einheitskugel. Diese Situation erinnert uns an die Teilchen-Wellen-Symmetrierelation $J_z = \hbar m$ (2.33) (Abschn. 2.2.3), in welcher *m* die azimutale Wellenzahl ist, welche die Variable ϕ in der Wellenfunktion multiplizert, und deren diskrete Werte die Rotationssymmetrie bezüglich der z-Achse ausdrückten. In Analogie zu jener Situation nehmen wir an, dass auch hier $m_{(z)}$ die Variable ϕ multiplizert, d. h. wir setzen den Phasenwinkel an (für beliebigen Winkel θ) als

$$\Phi = m_z \phi + \Phi_0 \quad , \tag{3.114}$$

wobe
i \varPhi_0 eine beliebige Phase ist, die wir null setzen können. Aus (3.114) folgt som
it

$$\Phi_{\uparrow} = \phi/2 \quad ; \quad \Phi_{\downarrow} = -\phi/2 \quad , \tag{3.115}$$

und damit erhalten die Quantenamplituden die endgültige Form

$$\langle \uparrow | u(\theta, \phi) \rangle = \cos(\theta/2) e^{i \phi/2}$$
 (3.116)

$$\langle \downarrow | u(\theta, \phi) \rangle = \sin(\theta/2) e^{-i \phi/2}$$
 (3.117)

Diese Form der Quantenamplituden wird durch die Experimente voll und ganz bestätigt.

Als **1. Beispiel** berechnen wir die Quantenamplituden für einen Drehimpulszustand u, dessen Spinrichtung in der x-y-Ebene beliebig orientiert ist (Abb. 3.15). In diesem Fall ist $u = u(\pi/2, \phi)$; wir bezeichnen den Zustand mit " \leftrightarrow ". Aus (3.116) und (3.117) folgt

$$\langle \uparrow | \leftrightarrow \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i \phi/2} \quad ; \quad \langle \downarrow | \leftrightarrow \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i \phi/2} \quad .$$
 (3.118)

Die entsprechenden Projektionswahrscheinlichkeiten sind

$$|\langle \uparrow | \leftrightarrow \rangle|^2 = |\langle \downarrow | \leftrightarrow \rangle|^2 = 1/2 \quad . \tag{3.119}$$

Aus Gründen der Symmetrie des Problems bezüglich der x-y-Ebene war das Resultat (3.119) zu erwarten.

Als **2. Beispiel** behandeln wir die statistische Mittelung im unpolarisierten Strahl von Ag-Atomen (Abschn. 3.3.3). Die Projektionswahrscheinlichkeiten

$$P(\uparrow \leftarrow u) = |\langle \uparrow | u(\theta, \phi) \rangle|^2 \quad ; \quad P(\downarrow \leftarrow u) = |\langle \downarrow | u(\theta, \phi) \rangle|^2 \tag{3.120}$$

sind über alle Spinorientierungen (θ, ϕ) zu mitteln. Aus (3.120) folgt mit (3.116) und (3.117)

$$\overline{P(\uparrow\leftarrow u)}^{(\theta,\phi)} = \overline{\cos^2(\theta/2)}^{\theta} = \frac{1}{2} \quad ; \quad \overline{P(\downarrow\leftarrow u)}^{(\theta,\phi)} = \overline{\sin^2(\theta/2)}^{\theta} = \frac{1}{2} \quad ,$$
(3.121)

wie erwartet.



Abb. 3.16. Malussches Gesetz

Aufgabe 25 Malussches Gesetz. Ein monochromatischer Lichtstrahl wird mit Hilfe eines Polarisators in einen linear polarisierten Strahl (Polarisationsrichtung i) umgewandelt (Abb. 3.16).

Dieser Strahl trifft auf einen Analysator, dessen Durchlassrichtung f mit i den Winkel Θ einschließt. Ein Detektor (Photomultiplier) registriert die Photonen im Austrittsstrahl.

1. Berechne die Projektionswahrscheinlichkeit $P(f \leftarrow i)$ als Funktion des Winkels Θ , wobei *i* und *f* Zustände linearer Polarisation des Photons in *i*- bzw. *f*-Richtung bedeuten.

Hinweis: Man verwende den Poynting-Vektor (3.13).

Wir messen für je eine feste Expositionszeit t_0 die im Detektor registrierte Zahl Z' von Quantonen für verschiedene Winkel Θ . Die Resultate sind in Tabelle 3.5 aufgeführt.

Tabelle 3.5. Zahl der Photonen, die im Detektor der Abb. 3.16 in fester Zeit gemessen werden, für verschiedene Winkel Θ

Θ	Z'
00	5056
30^0	3750
45^{0}	2598
90^{0}	74

2. Bestimme aus den Daten der Tabelle 3.5 das Verhältnis der Photonzahlen im Ausgangsstrahl des Analysators relativ zum Eingangsstrahl $(Z_f(\Theta)/Z_i)$ für die beiden Winkel $\Theta = 30^0$, 45^0 .

Hinweis: Wir interpretieren $Z'(90^0)$ als mittleren Untergrund (Dunkelzählrate) und betrachten $Z'(0^0)$ als Maß der mittleren Photonenzahl im Eingangskanal.

3. Bestimme die statistischen Fehler der Resultate von 2. und vergleiche die Gesamtresultate mit den entsprechenden Projektionswahrscheinlichkeiten von 1. **Aufgabe 26** Statistische Fehler. Die Messzahlen Z_1 und Z_2 ($Z_1, Z_2 \gg 1$) gehören zu statistisch unabhängigen Ereigniszählungen.

1. Berechne den statistischen Fehler $\varDelta F$ von

$$F = Z_1 Z_2$$

2. Vergleiche den statistischen Fehler von

$$F = Z_1^2$$

mit dem Resultat von 1. für den Spezialfall $Z_2 = Z_1$.

Aufgabe 27 Elliptische Polarisation. Eine ebene, monochromatische elektromagnetische Welle breitet sich im Raum in z-Richtung eines kartesischen Koordinatensystems aus. Das **E**-Feld der allgemeinsten Welle dieser Art hat die Form

$$E_x(z,t) = E_{0x} \cos(kz - \omega t)$$

$$E_y(z,t) = E_{0y} \cos(kz - \omega t + \epsilon)$$

$$E_z(z,t) \equiv 0 \quad .$$

- 1. Zeige, dass der **E**-Vektor in jeder Ebene z = konstant im Allgemeinen eine Ellipse beschreibt (*elliptisch* polarisierte Welle). Formuliere die Ellipsengleichung im Hauptachsensystem (x', y') der Ellipse.
- 2. Für welche Parameterwerte ist die Welle *linear* polarisiert?
- 3. Für welche Parameterwerte ist die Welle rechts- bzw. linkszirkular polarisiert?
- 4. Zeige, dass die allgemeinste, elliptisch polarisierte Welle als Superposition zweier Teilwellen der Polarisation zur Basis(x, y)
 - zur Basis (R, L) dargestellt werden kann.

 $\mathit{Hinweis}:$ Im Fall der Basis (R,L) verwende man das Hauptachsensystem der Ellipse.

5. Berechne (mit Hilfe der Resultate von 4.) die Projektionswahrscheinlichkeiten $P(x \leftarrow p), P(y \leftarrow p)$ sowie $P(R \leftarrow p), P(L \leftarrow p)$, wobei p ein Zustand elliptischer Polarisation ist, und verifiziere die Vollständigkeitsrelation bezüglich der Basis (x, y) bzw. (R, L).

Aufgabe 28 Spin Eins. Die Spinquantenzahl eines Atoms im Grundzustand ist j = 1.

- 1. Wie lautet die Vollständigkeitsrelation bezüglich der z-Komponente $J_z\,$ des Drehimpulses?
- 2. Wie lauten die entsprechenden Orthogonalitätsrelationen, ausgedrückt durch die Projektionswahrscheinlichkeiten?
- Skizziere ein konkretes Experiment zur Überprüfung der Resultate von 1. und 2.

Aufgabe 29 Photonenabstand im Interferenzexperiment. Der Laserstrahl des Quanteninterferenzexperiments hatte eine typische Intensität von $N \approx 10^3$ Photonen/sec.

Wie groß ist der entsprechende mittlere Abstand d zwischen zwei Photonen?



Abb. 3.17. $\lambda/4$ -Plättchen

Aufgabe 30 $\lambda/4$ -*Plättchen*. Eine monochromatische, in vertikaler *i*-Richtung linear polarisierte elektromagnetische (ebene) Welle ($\lambda = 589 \text{ nm}$; $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$) fällt senkrecht auf ein $\lambda/4$ -Plättchen aus Kalkspat ein (Abb. 3.17).

Die Brechungsindizes parallel und senkrecht zur optischen Achse sind $n_{\parallel} = 1.486$ und $n_{\perp} = 1.658$ (für die Wellenlänge $\lambda = 589$ nm).

- 1. Berechne die Dicke d des Plättchens, sodass das einfallende, linear polarisierte Licht in zirkularpolarisiertes Licht umgewandelt wird. Ist das austretende Licht rechts- oder linkszirkular polarisiert?
- 2. Wie erzeugt man mit demselben $\lambda/4$ -Plättchen und derselben einlaufenden Welle den anderen Basiszustand der zirkularen Polarisation?
- 3. Bestimme die Quantenamplituden $\langle R|i\rangle$ und $\langle L|i\rangle$.
- 4. Wir lassen die in *i*-Richtung linear polarisierte Welle von hinten auf das λ/4-Plättchen der Abb. 3.17 einfallen (in negativer z-Richtung). Wie ist die auf der Vorderseite des Plättchens austretende Welle polarisiert?
- 5. Wir lassen eine rechtszirkular polarisierte Welle auf das $\lambda/4$ -Plättchen der Abb. 3.17 (in positiver z-Richtung) einlaufen. Welches ist der Polarisationszustand der austretenden Welle?
- 6. Vergleiche die Quantenamplituden der Prozesse von 2. und von 5.

Aufgabe 31 Spin 1/2. Mit der Stern-Gerlach-Apparatur der Abb. 3.8 werden Silberatome (Spin 1/2) eines unpolarisierten Strahls untersucht. Die **B**-Felder zwischen den Polschuhen der Magnete sind in negativer z'- bzw. z-Richtung orientiert.

- 1. Welcher Ausgangsstrahl des Polarisators muss ausgeblendet werden, damit die Atome des in den Strahlteiler einlaufenden Strahls im Zustand $m_{z'} = +1/2$ sind?
- 2. Berechne für diese Situation die Intensitäten der den Strahlteiler verlassenden Strahlen ($m_z = 1/2$, bzw. $m_z = -1/2$), relativ zur Intensität des in den Polarisator einlaufenden Strahls (I_0).

4 Das Quanton in Raum und Zeit

Inhalt: Wir haben uns mit zwei fundamentalen Aspekten noch nicht beschäftigt, nämlich mit dem *örtlichen* und dem *zeitlichen* Verhalten des Quantons. Im Hinblick sowohl auf die Messungen an quantenphysikalischen Systemen (alle Messungen finden in Raum und Zeit statt!) als auch in Bezug auf die zeitliche Vorhersage ihres Verhaltens sind diese Aspekte offensichtlich von zentraler Bedeutung.

Der natürliche Zugang zum zeitlichen Verhalten des Quantons liefert die Heisenbergsche Ungleichung in Energie und Zeit. Das einfachste zeitliche Verhalten haben die Eigenzustände der Energie. Anhand des Müon-Spin-Rotationsexperiments (μ SR-Experiment) gewinnen wir die Zeitabhängigkeit der Quantenamplitude eines müonischen Eigenzustands des Drehimpulses. Das Resultat wird verallgemeinert auf die Zeitabhängigkeit von Quantenamplituden beliebiger Zustände des Müons. Das Quantonprinzip führt schließlich zur Verallgemeinerung des Resultats für das Zeitverhalten beliebiger Quantonen.

Das räumliche Verhalten wird durch die Quantenamplitude des Ortes, genannt Wellenfunktion im Ortsraum ($\psi(x)$) bestimmt, deren Betragsquadrat gleich der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Quantons (zur festen Zeit t) ist. Wegen der Heisenbergschen Ungleichung im Impuls und Ort ist das Verhalten des Quantons im Impulsraum mit demjenigen im Ortsraum verbunden. Die Quantenamplitude des Impulses heißt Wellenfunktion im Impulsraum ($\hat{\psi}(p)$); ihr Betragsquadrat ist gleich der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Quantons im Impulsraum. Wir zeigen, dass die beiden Wellenfunktionen mittels Fourier-Transformation auseinander hervorgehen.

Die Wellenfunktionen führen uns auf eine präzise Definition der *Mittelwerte* und der *spektralen Breiten* physikalischer Größen mit kontinuierlichen Eigenwertspektren.

4.1 Die Zeitabhängigkeit der Quantenamplitude

Bisher haben wir uns in erster Linie mit den Eigenschaften des Quantons *zur* festen Zeit t beschäftigt. Insbesondere war das Kap. 3 ausschließlich diesem Aspekt der Quantenphysik gewidmet. In den diskutierten Anordnungen zur Messung physikalischer Größen spielte zwar der Zeitablauf des Geschehens eine Rolle, das Ziel jedoch war immer die Bestimmung der physikalischen Eigenschaften des Quantons in einem wohl definierten (reinen) Ausgangszustand w, der als stationär angesehen wurde. Die Eigenschaften des Quantons

im Zustand \boldsymbol{w} sind gegeben durch die Gesamtheit der Projektionswahrscheinlichkeiten

$$P(v \leftarrow w) = |\langle v|w \rangle|^2 \quad , \tag{4.1}$$

wobei v ein beliebiger Messzustand ist, d.h. ein Eigenzustand einer oder mehrerer physikalischer Größen; $\langle v | w \rangle$ ist die entsprechende Quantenamplitude.

In diesem Abschnitt geht es darum, die Zeitabhängigkeit der Eigenschaften eines Quantons systematisch zu studieren.

Die Zeitabhängigkeit quantenphysikalischer Systeme ist uns bereits im Kap. 2 im Zusammenhang mit der Heisenbergschen Ungleichung in Energie und Zeit begegnet (Abschn. 2.3.2; siehe auch Abschn. 2.5). Unter allen Größen, die in den Heisenbergschen Ungleichungen vorkommen, spielt die Zeit eine ausgezeichnete Rolle. Die Zeit ist nämlich keine Observable (wie alle anderen Größen) sondern ein Parameter, welcher den zeitlichen Ablauf eines quantenphysikalischen Systems beschreibt. Die Situation ist analog zur klassischen Mechanik, wo beispielsweise der Ort $\mathbf{r}(0)$ und der Impuls $\mathbf{p}(0)$ die Eigenschaften eines Massenpunktes zur Zeit t = 0 festlegen (in Analogie zu (4.1)). Der Zeitablauf wird dann beschrieben durch die Funktion $\mathbf{r}(t)$. Ein Quanton im zeitabhängigen Zustand w(t) wird analog durch die Gesamtheit der zeitabhängigen Projektionswahrscheinlichkeiten

$$P(v \leftarrow w(t)) = |\langle v | w(t) \rangle|^2 \tag{4.2}$$

beschrieben, wobei die zugrunde liegende Quantenamplitude konsequenterweise mit $\langle v|w(t)\rangle$ bezeichnet wird.

Die im Abschn. 4.1 allgemein zu beantwortende Frage lautet:

Welches ist die Zeitabhängigkeit der Quantenamplitude $\langle v|w(t)\rangle$, wenn sich das Quanton zur Zeit t = 0 im Zustand w(0) befindet?

Mit (4.2) lässt sich dann aus $\langle v|w(t)\rangle$ der gesamte Zeitablauf des Systems bestimmen.

4.1.1 Eigenzustände der Energie

Nach den einführenden Bemerkungen ist es klar, dass die *Energie* des Quantons eine zentrale Rolle spielen muss, denn sie ist die einzige physikalische Größe, welche via einer Heisenbergschen Ungleichung mit der Zeit verknüpft ist. Die Eigenschaft Energie wird durch die Energieeigenzustände u_E vermittelt. Also ist die denkbar einfachste Situation die, dass sich das Quanton in einem Eigenzustand der Energie

$$w(0) = u_E \tag{4.3}$$

befindet, wobei E der Energieeigenwert des Zustandes u_E ist.

In dieser Situation ist das Quanton *stationär*, denn wir haben in (2.96) gezeigt: Ein quantenphysikalisches System ist genau dann stationär, wenn es in einem Eigenzustand der Energie ist. Stationarität heißt, alle Eigenschaften des Systems sind zeitlich konstant. Dies bedeutet mit (4.2), dass die Projektionswahrscheinlichkeiten

$$P(v \leftarrow u_E(t)) = |\langle v | u_E(t) \rangle|^2 \tag{4.4}$$

zeitlich konstant sind für alle Zustände v. Daraus geht hervor, dass die explizite Zeitabhängigkeit der entsprechenden (komplexen) Quantenamplitude in der *Phase* enthalten sein muss, d.h. die Quantenamplitude ist von der Form

$$\langle v|u_E(t)\rangle = K e^{i\varphi(t)} \quad , \tag{4.5}$$

wobei K und $\varphi(t)$ reelle Größen sind, die vom Zustand v und vom Energieeigenwert E abhängen. Speziell für t = 0 folgt aus (4.5)

$$\langle v|u_E(0)\rangle \equiv \langle v|u_E\rangle = K e^{i\varphi(0)}$$
 . (4.6)

Damit lässt sich (4.5) schreiben als

$$\langle v|u_E(t)\rangle = \langle v|u_E\rangle e^{i\varphi_E(t)} \quad , \tag{4.7}$$

wobei $\varphi_E(t)$ der *zeitabhängige* Teil der Phasenfunktion $\varphi(t)$ ist und die Eigenschaft hat

$$\varphi_E(0) = 0 \quad . \tag{4.8}$$

In (4.7) bedeutet $\langle v|u_E \rangle$ die (im Allgemeinen komplexe) Quantenamplitude des Systems zur Zeit t = 0.

Es stellt sich die interessante Frage: Hat die unbekannte Phasenfunktion $\varphi_E(t)$ in (4.7) überhaupt physikalisch messbare Auswirkungen?

Hier erinnern wir uns an die Betrachtung am Anfang des Abschn. 3.3. Das Stichwort lautet: *Interferenzexperiment*. Die Phasen der Quantenamplituden haben nur in Interferenzexperimenten messbare physikalische Auswirkungen. Im nächsten Abschnitt werden wir ein geeignetes Interferenzexperiment heranziehen, das uns eine Bestimmung der Phasenfunktion $\varphi_E(t)$ liefern wird.

4.1.2 Das μ SR(Müon-Spin-Rotation)-Experiment

(Experiment 12 der CD-ROM)

Das Prinzip

Gegenstand des Experiments ist das positiv geladene Müon (μ^+), ein "schweres Positron". (Beide Teilchen sind Elementarteilchen der Ladung +e mit Spin 1/2 und g-Faktor 2.)



Abb. 4.1. Prinzip des μ SR-Experiments

Wir präparieren das μ^+ in einem Eigenzustand der Komponente J_x des Drehimpulses (magnetische Quantenzahl $m_x = -1/2$) und plazieren es in einem in z-Richtung weisenden Magnetfeld **B** (siehe Abb. 4.1).

Die Energieeigenzustände des μ^+ (Eigenwerte E_1, E_2 in Abb. 4.1) sind gleichzeitig Eigenzustände der Komponente J_z des Drehimpulses, wie die nachfolgende Herleitung zeigt.

Die potentielle Energie des μ^+ im Magnetfeld $\mathbf{B}=(0,0,B)$ ist gegeben durch

$$U = -\vec{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\mu_z B \quad , \tag{4.9}$$

wobei das magnetische Moment $\overrightarrow{\mu}$ mit dem Drehimpuls $\overrightarrow{\mathbf{J}}$ des Müons nach dem Parallelitätsgesetz (2.156) verknüpft ist durch

$$\vec{\boldsymbol{\mu}} = g \frac{e}{2m_{\mu}} \vec{\mathbf{J}} \quad . \tag{4.10}$$

In (4.10) ist g = 2 der g-Faktor des μ^+ , m_{μ} seine Masse und e die Elementarladung. (Wegen der positiven Ladung des Müons müssen μ und **J** parallel sein.) Mit (4.10) folgt aus (4.9) für die Eigenwerte der Energie

$$E_{m_z} = -g \frac{eB}{2m_\mu} J_z = -g \frac{eB}{2m_\mu} m_z \hbar \quad , \qquad (4.11)$$

wobe
i $m_z=\pm 1/2$ die magnetische Quantenzahl des Drehimpulses in z-Richtung ist. Die Energie
eigenzustände sind also gleichzeitig Eigenzustände von
 J_z .

Die Präparation des μ^+ in einem Eigenzustand von J_x hat den Zweck, die Interferenz der beiden Energieeigenzustände zu erzwingen. Nach dem 2. Satz der Drehimpulseigenschaften (Abschn. 2.3.4) kann nämlich ein Quanton niemals gleichzeitig in Eigenzuständen zweier seiner Drehimpulskomponenten sein. Da das μ^+ in einem Eigenzustand von J_x ist, kann es nicht gleichzeitig in einem Eigenzustand von J_z sein. Dies bedeutet, dass *beide* Eigenzustände von J_z (und damit auch beide Energieeigenzustände) *kohärent* am Zustand des μ^+ beteiligt sind, d.h. die beiden Zustände *interferieren*.

Das Experiment

Die Müonen (μ^+) entstehen aus dem Zerfall der positiv geladenen Pionen (π^+) entsprechend der Reaktion

$$\pi^+ \to \mu^+ + \nu_\mu \quad , \tag{4.12}$$

wobei ν_{μ} das Müonneutrino ist. Wir betrachten diesen Zerfall im Ruhesystem des π^+ , welches ein Teilchen mit Spin Null ist (Abb. 4.2).



Abb. 4.2. Zerfall des Pions in seinem Ruhesystem

Das Neutrino bewegt sich mit der Lichtgeschwindigkeit c (Masse Null!). Es ist vollständig polarisiert, und zwar entgegen seiner Bewegungsrichtung. Da das Neutrino ein Teilchen mit Spin 1/2 ist, beträgt sein Drehimpuls in Bewegungsrichtung $-\frac{1}{2}\hbar$. Die Drehimpulserhaltung in x-Richtung verlangt, dass auch das μ^+ vollständig polarisiert ist, wobei der Drehimpuls in seiner Bewegungsrichtung (x-Richtung) wiederum $-\frac{1}{2}\hbar$ beträgt (Abb. 4.2).

Die Pionen stammen aus Reaktionen, in welchen hochenergetische Protonen auf Materie geschossen werden. Die Pionen werden ihrerseits in Materie abgebremst, sodass die nach der Reaktion (4.12) entstehenden Müonen in ihrer Bewegungsrichtung (x-Richtung) 100% polarisiert sind (man spricht von "Oberflächenmüonen").

Das Experiment ist in Abb. 4.3 dargestellt.

Das Müon wird abgebremst in der Target¹, welche sich im homogenen **B**-Feld befindet. Das ruhende μ^+ zerfällt mit einer mittleren Lebensdauer

Umgekehrt können μ SR-Experimente auch verwendet werden, um Eigenschaften magnetischer Materialien bei verschiedenen Temperaturen und äußeren **B**-Feldern zu untersuchen: Das Müon wird als "Magnetfeldsonde" eingesetzt, welche das an seinem Ruheort herrschende lokale **B**-Feld ausmisst.

Das in Abb. 4.3 dokumentierte μ SR-Experiment wurde in der Forschungsgruppe von Alexander Schenck ausgeführt.

¹ Die Müonen kommen an gewissen Gitter- oder Zwischengitterplätzen des Targetmaterials zur Ruhe. Die Bedingungen müssen so sein, dass allfällige Magnetfelder benachbarter Elektronen vernachlässigbar klein sind gegenüber dem äußeren **B**-Feld, damit die Dynamik des müonischen Drehimpulses allein durch das angelegte **B**-Feld bestimmt wird. Das vorliegende μ SR-Experiment wurde mit einer intermetallischen Target aus CeRu₂Si₂ bei tiefer Temperatur (2 K) durchgeführt.



Abb. 4.3. μ SR-Experiment (Anordnung)

von $\tau_{\mu} = 2.20 \times 10^{-6}$ s entsprechend der Reaktion

$$\mu^+ \to e^+ + \nu_e + \overline{\nu}_\nu \tag{4.13}$$

in ein Positron (e^+) und zwei Neutrinos² $(\nu_e, \overline{\nu}_{\mu})$.

Das Experiment besteht darin, die Zerfallshäufigkeit ruhender Müonen in der Target als Funktion ihrer Lebenszeit t zu messen. Ein in der Target abgebremstes Müon wird durch ein Startsignal des vor der Target plazierten Zählers angezeigt (Abb. 4.3). Ein im Detektor registriertes Positron des μ^+ -Zerfalls (4.13) erzeugt das Stoppsignal. In einem TAC ("Time-to-Amplitude-Converter") wird die Zeitdifferenz t der beiden Signale gemessen und ein Histogramm der Ereignisse als Funktion von t erzeugt.

Im Gegensatz zum früheren Experiment Zeitmessung (Abb. 2.23, Abschn. 2.3.2) ist die Häufigkeitsverteilung im μ SR-Experiment keine Exponentialfunktion! Die Zerfallshäufigkeit (Anzahl Zerfälle pro Zeiteinheit) ist von der Form

$$Z(t) = Z_0 e^{-t/\tau_{\mu}} [1 + F(t)] \quad , \tag{4.14}$$

wobei F(t) die in Abb. 4.4 dargestellte *oszillierende* Funktion der Zeit ist. Das Phänomen wird als **Quantenschwebung** ("quantum beats") bezeichnet; es bedeutet u.a., dass die Zerfallswahrscheinlichkeit zu einer späteren Zeit größer sein kann als zur Zeit t = 0! Die Konstante Z_0 ist ein Maß für die Gesamtheit der im Experiment erfassten Müonenzerfälle.

² Das erste (ν_e) ist das Elektronneutrino und das zweite ($\overline{\nu}_{\mu}$) das Antineutrino des Müons (siehe Abschn. 8.2).



Abb. 4.4. Oszillatorischer Anteil der Zerfallshäufigkeit des Müons als Funktion seiner Lebenszeit

Aus Abb. 4.4 ist ersichtlich, dass die Oszillation F(t) sehr genau dargestellt wird durch die harmonische Funktion

$$F(t) = -a\cos\omega t \quad , \tag{4.15}$$

mit der Frequenz

$$\omega = 2\pi\nu = 1.646 \times 10^6 \,\mathrm{s}^{-1} \tag{4.16}$$

 $(\nu=262\,{\rm kHz};\,T=1/\nu=3.82\times10^{-6}\,{\rm s}).$ Die Messung der Abb. 4.4 wurde mit einem Magnetfeld von

$$B = 1.933 \times 10^{-3} \,\mathrm{T} \tag{4.17}$$

durchgeführt.

Woher kommt das oszillierende Verhalten der Zerfallshäufigkeit?

Die Phasenfunktion $\varphi_E(t)$

Zunächst geht es darum, die Form der Quantenamplitude $\langle v|w(t)\rangle$, welche im Ausdruck (4.2) vorkommt, für ein beliebiges Quanton, das zwei Energieeigenzustände hat (Eigenwerte E_1, E_2), zu finden.

Wir betrachten zuerst den Spezialfall t = 0, d. h. die Quantenamplitude $\langle v|w(0)\rangle$, wobei w(0) der Zustand des Quantons z. Zt. t = 0 ist. Da die Eigenschaft *Energie* in unserem Problem eine zentrale Rolle spielt, ist es naheliegend, $\langle v|w(0)\rangle$ zu schreiben als

$$\langle v|w(0)\rangle = \langle v|u_{E_1}\rangle\langle u_{E_1}|w(0)\rangle + \langle v|u_{E_2}\rangle\langle u_{E_2}|w(0)\rangle \quad , \tag{4.18}$$

d. h. das Superpositionsprinzip der Quantenamplituden (3.64) anzuwenden bezüglich der vollständigen Basis der Energieeigenzustände u_{E_1} , u_{E_2} .

162 4 Das Quanton in Raum und Zeit

Zwei weitere bekannte Spezialfälle betreffen die Situation $w(t) = u_{E_1}(t)$ bzw. $w(t) = u_{E_2}(t)$. Die zeitabhängigen Quantenamplituden in diesen Fällen sind nach (4.7)

$$\langle v|u_{E_1}(t)\rangle = \langle v|u_{E_1}\rangle e^{i\varphi_{E_1}(t)}$$
(4.19)

und

$$\langle v|u_{E_2}(t)\rangle = \langle v|u_{E_2}\rangle e^{i\varphi_{E_2}(t)}$$
 . (4.20)

Der allgemeine Ansatz

$$\langle v|w(t)\rangle = \langle v|u_{E_1}\rangle\langle u_{E_1}|w(0)\rangle e^{i\varphi_{E_1}(t)} + \langle v|u_{E_2}\rangle\langle u_{E_2}|w(0)\rangle e^{i\varphi_{E_2}(t)}$$
(4.21)

enthält alle drei Spezialfälle. Denn mit (4.8) folgt aus (4.21) für t = 0 unmittelbar der Ausdruck (4.18), und wegen der Orthogonalitätsrelationen

$$\langle u_{E_1}|u_{E_1}\rangle = \langle u_{E_2}|u_{E_2}\rangle = 1 \quad ; \quad \langle u_{E_2}|u_{E_1}\rangle = \langle u_{E_1}|u_{E_2}\rangle = 0$$
 (4.22)

folgen aus (4.21) auch die Ausdrücke (4.19) und (4.20).

Im Folgenden führen wir für die Drehimpulseigenzustände des Müons die naheliegenden Bezeichnungen ein:

$$m_x = +1/2: , , \to "; \quad m_x = -1/2: , , \leftarrow "$$
 (4.23)

$$m_z = +1/2: ,, \uparrow ``; m_z = -1/2: ,, \downarrow ``,$$

$$(4.24)$$

in Anlehnung an das Koordinatensystem der Abbildungen 4.1, 4.2, 4.3.

Das Ziel besteht darin, mit Hilfe des Ansatzes (4.21) einen theoretischen Ausdruck für das Resultat (4.14), (4.15) des μ SR-Experiments zu gewinnen.

Wir betrachten ein positives Müon, das sich z. Zt. t = 0 im Drehimpulszustand $m_x = -1/2$ befindet (Ausgangszustand des μ SR-Experiments). Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das μ^+ zur Zeit t noch lebt, ist nach (2.71) gegeben durch

$$P(t) = e^{-t/\tau_{\mu}} \quad . \tag{4.25}$$

Es ist zweckmäßig, die Drehimpulseigenschaften des μ^+ in der vollständigen Basis der Eigenzustände von J_x zu beschreiben. Das μ^+ wird entweder aus dem Zustand $m_x = +1/2$ heraus oder aus dem Zustand $m_x = -1/2$ heraus zerfallen. Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich das μ^+ im Zustand $m_x = -1/2$ befindet im Moment des Zerfalls (angenommen, es ist nicht vorher zerfallen), ist gegeben durch die Projektionswahrscheinlichkeit

$$P_{\leftarrow}(t) \equiv |\langle \leftarrow |w(t) \rangle|^2 \quad . \tag{4.26}$$

Die entsprechende Wahrscheinlichkeit für den Zustand $m_x = +1/2$ ist

$$P_{\rightarrow}(t) \equiv |\langle \rightarrow |w(t) \rangle|^2 \quad . \tag{4.27}$$

Die Zerfallswahrscheinlichkeit des μ^+ aus dem Zustand $m_x = +1/2$ für den Zerfall in Strahlrichtung (Spinrichtung) ist nach der Theorie der schwachen

Wechselwirkung³ doppelt so groß wie die Zerfallswahrscheinlichkeit aus dem Zustand $m_x = -1/2$. Unter Berücksichtigung dieser Tatsache – zusammen mit (4.25), (4.26) und (4.27 – ist die Zerfallshäufigkeit des Müons

$$Z(t) \propto e^{-t/\tau_{\mu}} [P_{\leftarrow}(t) + 2P_{\rightarrow}(t)]$$
 . (4.28)

Im nächsten Schritt geht es darum, die Projektionswahrscheinlichkeiten (4.26) und (4.27) mit Hilfe des Ansatzes (4.21) zu bestimmen. Zur Berechnung von (4.26) braucht man die Quantenamplitude (4.21)

$$\langle \leftarrow |w(t)\rangle = \langle \leftarrow |\uparrow\rangle \langle \uparrow | \leftarrow \rangle e^{i\varphi_{E_1}(t)} + \langle \leftarrow |\downarrow\rangle \langle \downarrow | \leftarrow \rangle e^{i\varphi_{E_2}(t)} \quad . \tag{4.29}$$

Aus (3.92) folgt

$$\langle \leftarrow | \uparrow \rangle \langle \uparrow | \leftarrow \rangle = \overline{\langle \uparrow | \leftarrow \rangle} \langle \uparrow | \leftarrow \rangle = |\langle \uparrow | \leftarrow \rangle|^2 \tag{4.30}$$

und

$$\langle \leftarrow | \downarrow \rangle \langle \downarrow | \leftarrow \rangle = \overline{\langle \downarrow | \leftarrow \rangle} \langle \downarrow | \leftarrow \rangle = |\langle \downarrow | \leftarrow \rangle|^2 \quad . \tag{4.31}$$

Aus Symmetriegründen sind die Projektionswahrscheinlichkeiten (4.30), (4.31)einander gleich:

$$|\langle \uparrow | \leftarrow \rangle|^2 = |\langle \downarrow | \leftarrow \rangle|^2 \quad . \tag{4.32}$$

Zudem gilt die Vollständigkeitsrelation

$$|\langle \uparrow | \leftarrow \rangle|^2 + |\langle \downarrow | \leftarrow \rangle|^2 = 1 \quad . \tag{4.33}$$

Aus (4.33) und (4.32) folgt

$$|\langle \uparrow | \leftarrow \rangle|^2 = |\langle \downarrow | \leftarrow \rangle|^2 = 1/2$$
 , (4.34)

und zusammen mit (4.30) und 4.31 können wir (4.29) schreiben als

$$\langle \leftarrow |w(t)\rangle = \frac{1}{2} e^{i\varphi_{E_1}(t)} + \frac{1}{2} e^{i\varphi_{E_2}(t)}$$
 (4.35)

Die entsprechende Projektionswahrscheinlichkeit ist

$$P_{\leftarrow}(t) = 1/4 \left(e^{i\varphi_{E_1}(t)} + e^{i\varphi_{E_2}(t)} \right) \left(e^{-i\varphi_{E_1}(t)} + e^{-i\varphi_{E_2}(t)} \right)$$

= 1/4 $\left(2 + e^{i(\varphi_{E_1}(t) - \varphi_{E_2}(t))} + e^{-i(\varphi_{E_1}(t) - \varphi_{E_2}(t))} \right)$
= 1/2 $\left[1 + \cos(\varphi_{E_1}(t) - \varphi_{E_2}(t)) \right]$ (4.36)

Aus (4.36) folgt mit (4.8) $P_{\leftarrow}(0) = 1$, wie wir erwarten.

Zu jeder Zeit t muss die Vollständigkeitsrelation

$$P_{\leftarrow}(t) + P_{\rightarrow}(t) = 1 \tag{4.37}$$

 $^{^3}$ Der μ -Zerfall (4.13) ist ein Prozess der schwachen Wechselwirkung (vgl. Abschnitte 8.3.2 und 8.3.6).

gelten. Wir setzen (4.36) in (4.37) ein und erhalten direkt

$$P_{\to}(t) = 1/2[1 - \cos(\varphi_{E_1}(t) - \varphi_{E_2}(t))] \quad . \tag{4.38}$$

Nun setzen wir (4.36) und (4.38) in (4.28) ein und finden

$$Z(t) \propto e^{-t/\tau_{\mu}} \left[1 - \frac{1}{3} \cos(\varphi_{E_1}(t) - \varphi_{E_2}(t)) \right] \quad . \tag{4.39}$$

Diese Herleitung zeigt, dass die Schwebung in der Zerfallshäufigkeit zwei Gründe hat. Einerseits ist es die bereits diskutierte erzwungene Interferenz der beiden Energieeigenzustände, und andererseits ist es die in (4.28) formulierte Vorwärts-Rückwärts-Anisotropie der Zerfallswahrscheinlichkeit des Müons bezüglich seiner Spinrichtung. Wäre die Zerfallswahrscheinlichkeit nämlich isotrop, dann würde die Schwebung in (4.39) als Folge der Vollständigkeitsrelation verschwinden.

Der Vergleich von (4.39) mit (4.14) und dem experimentellen Resultat (4.15) (Abb. 4.4) liefert die Identität

$$-F(t) = \frac{1}{3}\cos(\varphi_{E_1}(t) - \varphi_{E_2}(t)) \equiv a\cos\omega t \quad , \tag{4.40}$$

wobei a und ω die im μ SR-Experiment gemessenen Größen sind.

Wenn wir die beiden Ausdrücke in (4.40) miteinander vergleichen, dann fällt auf, dass die Amplitude *a* im oszillatorischen Teil der Abb. 4.4 etwas kleiner ist als 1/3. Dies hat experimentelle Gründe (räumliche Ausdehnung des e^+ -Detektors, Energieabhängigkeit der Ansprechwahrscheinlichkeit etc.).

Wir identifizieren im Folgenden die Argumente der beiden Kosinusfunktionen in (4.40) und stellen die Behauptung auf:

$$\varphi_E(t) \equiv -\frac{E}{\hbar} t \tag{4.41}$$

Für das μ SR-Experiment ist die Behauptung (4.41) gleichbedeutend mit

$$\underline{\varphi_{E_1}(t) - \varphi_{E_2}(t)} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} t = \frac{\Delta E_B}{\hbar} t \quad , \tag{4.42}$$

denn nach (4.8) ist $\varphi_E(0) = 0$ (ΔE_B ist in Abb. 4.1 definiert).

Mit Hilfe weiterer μ SR-Experimente wollen wir nun die Korrektheit der Behauptung (4.42) nachweisen.

Die Proportionalität der Phasenwinkeldifferenz mit der Zeit t folgt unmittelbar aus der Identität (4.40). Die Schwebungsfrequenz ω im μ SR-Experiment ist (experimentell) exakt proportional zur Stärke des **B**-Feldes und damit (nach (4.11)) auch proportional zur Energieaufspaltung ΔE_B . Daraus folgt mit (4.40) die Proportionalität der Phasenwinkeldifferenz zu ΔE_B (4.42). Da der Ausdruck (4.42) dimensionsmäßig korrekt ist, geht es schließlich noch darum, mit den Daten des μ SR-Experiments numerisch zu beweisen, dass kein zusätzlicher dimensionsloser Faktor auftritt. Wir vergleichen die Frequenz $\omega = 1.646 \times 10^6 \,\mathrm{s^{-1}}$ (4.16) mit (siehe (4.11); g = 2.002, $B = 1.933 \times 10^{-3} \,\mathrm{T}$, $m_{\mu} = 105.66 \,\mathrm{MeV/c^2}$)

$$\frac{\Delta E_B}{\hbar} = \frac{geB}{2m_{\mu}} = \frac{2.002 \times (2.998)^2 \times 10^{16} \times 1.933 \times 10^{-3}}{2 \times 105.66 \times 10^6} = 1.646 \times 10^6 \,\mathrm{s}^{-1} \quad .$$
(4.43)

Die beiden Größen ω und $\Delta E_B/\hbar$ stimmen (innerhalb der experimentellen Fehler des μ SR-Experiments) exakt überein.

Damit haben wir gezeigt, dass die Phasenfunktion $\varphi_E(t)$ durch den Ausdruck (4.41) gegeben ist. Die *Phasenfaktoren* in den Quantenamplituden (4.7) und (4.21) sind also von der Form

$$\underline{e}^{i\varphi_E(t)} = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad . \tag{4.44}$$

Dies ist ein fundamentales Resultat, denn es wird sich zeigen (in Abschn. 4.1.3), dass der Phasenfaktor (4.44) die gesamte explizite Zeitabhängigkeit aller Quantenamplituden bestimmt!

Die in (4.43) etablierte Relation

$$\frac{\Delta E_B}{\hbar} = \omega \tag{4.45}$$

des μ SR-Experiments, welche aus (4.42) und (4.40) folgt, hat die gleiche Struktur wie die Planck-Einstein-Beziehung (2.10) $E = \hbar \omega$. Anschließend werden wir die präzise physikalische Bedeutung der Schwebungsfrequenz ω aufzeigen.

Erwartungswert des Drehimpulses

Wir verstehen allgemein unter dem **Erwartungswert** den Mittelwert einer physikalischen Größe in Abhängigkeit von der Zeit.

Wir berechnen zuerst den Erwartungswert der x-Komponente des Drehimpulses des Müons im μ SR-Experiment

$$\langle J_x(t) \rangle = +\frac{\hbar}{2} P_{\rightarrow}(t) - \frac{\hbar}{2} P_{\leftarrow}(t) \quad , \qquad (4.46)$$

indem wir (4.38) und (4.36) in (4.46) einsetzen. Man findet mit (4.42) und (4.45)

$$\langle J_x(t) \rangle = -\frac{\hbar}{2} \cos \omega t$$
 . (4.47)

Wie erwartet ist $\langle J_x(0) \rangle = -\hbar/2$.

166 4 Das Quanton in Raum und Zeit

Nun wenden wir uns der y-Komponente des Drehimpulses zu und stellen die Behauptung auf

$$\langle J_y(t) \rangle = -\frac{\hbar}{2} \sin \omega t$$
 (4.48)

Für die nachfolgende Beweisführung ersetzen wir die Bezeichnung $\left(4.23\right)$ durch

$$m_y = +1/2: ,, \to "; \quad m_y = -1/2: ,, \leftarrow ".$$
 (4.49)

Es gilt (mit (4.49))

$$\langle J_y(t)\rangle = +\frac{\hbar}{2} P_{\rightarrow}(t) - \frac{\hbar}{2} P_{\leftarrow}(t) \quad . \tag{4.50}$$

In (4.50) bedeuten

$$P_{\rightarrow}(t) = |\langle \rightarrow |w(t) \rangle|^2 \quad ; \quad P_{\leftarrow}(t) = |\langle \leftarrow |w(t) \rangle|^2 \quad , \tag{4.51}$$

wobei w(0) der Drehimpulseigenzustand $m_x = -1/2$ ist und (mit (4.21))

$$\langle \to |w(t)\rangle = \langle \to |\uparrow\rangle\langle\uparrow|w(0)\rangle e^{i\varphi_{E_1}} + \langle \to |\downarrow\rangle\langle\downarrow|w(0)\rangle e^{i\varphi_{E_2}}$$
(4.52)

$$\langle \leftarrow |w(t)\rangle = \langle \leftarrow |\uparrow\rangle \langle \uparrow |w(0)\rangle e^{i\varphi_{E_1}} + \langle \leftarrow |\downarrow\rangle \langle \downarrow |w(0)\rangle e^{i\varphi_{E_2}} \quad . \tag{4.53}$$

Alle auf den rechten Seiten der Gleichungen (4.52) und (4.53) auftretenden Quantenamplituden lassen sich mit Hilfe der Formeln (3.116) und (3.117) explizit ausrechnen. Zusammen mit den Relationen (4.42) und (4.45) lässt sich damit die Behauptung (4.48) beweisen (verifiziere!).

Für die z-Komponente des Drehimpulses des Müons gilt (siehe Aufgabe 32)

$$\langle J_z(t) \rangle = 0 \quad . \tag{4.54}$$

Die Resultate (4.47), (4.48) und (4.54) haben eine einfache Interpretation:

Der Erwartungswert $\langle \mathbf{J}(t) \rangle = (\langle J_x(t) \rangle, \langle J_y(t) \rangle, 0)$ des Drehimpulses des Müons führt eine Präzessionsbewegung mit der Winkelgeschwindigkeit ω in der Ebene senkrecht zum **B**-Feld aus (siehe Abb. 4.5(a)).

Dieser Eigenschaft verdankt das μ SR-Experiment seinen Namen (Müon-Spin-Rotation).

In Abb. 4.5(b) ist die Bewegung des Drehimpulses auch im Vektormodell (Abb. 2.34) dargestellt. Die Oszillation im μ SR-Experiment lässt sich nun folgendermaßen interpretieren (siehe Abb. 4.5(c)). Die bezüglich des Erwartungswertes $\langle \mathbf{J}(t) \rangle$ des Spins des Müons anisotrop verteilte Emissionswahrscheinlichkeit des Positrons bewegt sich periodisch mit diesem und überstreicht dabei den raumfesten Detektor. Als Folge der Anisotropie resultiert daraus das oszillatorische Verhalten in der Zerfallshäufigkeit der Positronen mit der Periode

$$T = \frac{2\pi}{\omega} \quad ; \quad \omega = \frac{\Delta E_B}{\hbar} = \frac{geB}{2m_{\mu}} \quad . \tag{4.55}$$



Abb. 4.5. μ SR-Experiment. (a) Erwartungswert des Drehimpulses des Müons $\langle \mathbf{J}(t) \rangle$ im Zeitverlauf; (b) Drehimpuls des Müons im Vektormodell; (c) Zerfallsverteilung der Positronen in der (x, y)-Ebene

(In (4.55) wurden (4.45) und (4.11) verwendet.)

Diese Interpretation der Oszillation erinnert uns an die klassische Bewegung des Drehimpulses eines Atoms im äußeren **B**-Feld [KP-2-11.3.2]. Der Drehimpuls führt eine Präzessionsbewegung um die **B**-Feldrichtung aus, welche mit der Larmor-Winkelgeschwindigkeit

$$\Omega = \frac{eB}{2m} \tag{4.56}$$

erfolgt (hier ist m die Elektronenmasse).

Der Bewegung des Drehimpulses des klassischen Systems im äußeren Magnetfeld entspricht also die Bewegung des *Erwartungswertes* des Drehimpulses im quantenphysikalischen System⁴.

⁴ Setzen wir in (4.55) den *g*-Faktor des Müons (g = 2) ein, dann ist die Schwebungsfrequenz ω doppelt so groß wie die entsprechende Larmor-Winkelgeschwindigkeit Ω (4.56). Dieser Faktor 2 hat den Grund darin, dass der klassischen Larmor-Winkelgeschwindigkeit die Kreisbahnbewegung des Elektrons zugrunde liegt (siehe Abb. 2.35), für welche nach (2.161) g = 1 ist.

Zweiweg-Quanten-Interferenzexperiment

Das μ SR-Experiment hat alle Charakteristiken eines Zweiweg-Quanten-Interferenzexperiments (Abschn. 3.3.1). Der Ausgangszustand des Müons ist der Drehimpulszustand $m_x = -1/2$. Die vollständige Basis von Zwischenzuständen sind die Energieeigenzustände $m_z = \pm 1/2$ im Magnetfeld, und der Endzustand (Messzustand) des Müons ist ein Zustand des Zerfallsprodukts bestehend aus Positron und zwei Neutrinos (4.13). Im Unterschied zum Quanteninterferenzexperiment des Abschn. 3.3.1 ist hier die Variable des Experiments die Zeit (dort war es die relative Winkelposition (ψ) der Polarisatoren).

Ein anderes, häufig diskutiertes Zweiweg-Quanten-Interferenzexperiment ist das *Doppelspaltexperiment*: Wir gehen aus von der Anordnung der Abb. 2.17 (Abschn. 2.2.2), ersetzen die beiden Lichtquellen durch zwei Spaltöffnungen senkrecht zur Zeichenebene in einer Wand, welche die Positionen der Lichtquellen enthält und lassen von links einen Strahl von Quantonen einfallen (siehe auch Abschn. 4.2.1). Der Ausgangszustand in diesem Fall ist das Quanton in einem Eigenzustand des Impulses (in Richtung $\theta = 0$; Abb. 2.17). Die vollständige Basis von Zwischenzuständen sind die Eigenzustände des Ortes (siehe Abschn. 4.2) bezüglich der beiden Spaltpositionen, und der Endzustand (Messzustand) ist ein Eigenzustand des Impulses in Richtung des Streuwinkels θ . (Der Detektor ist als Zähler ausgebildet.) Hier ist die Variable des Interferenzexperiments der Streuwinkel θ .

Energieverteilung des Müons

Die Zerfallshäufigkeit (4.14) kann mit (4.40) und (4.42) geschrieben werden als

$$Z(t) = Z_0 e^{-t/\tau_{\mu}} \left[1 - \frac{1}{3} \cos\left(\frac{\Delta E_B}{\hbar}t\right) \right] \quad . \tag{4.57}$$

Das μ SR-Experiment misst also die Zerfallswahrscheinlichkeit des Müons (für Zerfallspositronen in Strahlrichtung) als Funktion der Lebenszeit t für eine feste Energiedifferenz ΔE_B seiner Energieeigenzustände.

Wir stellen nun die Frage: Wie groß ist die Zahl der Zerfälle N(E) des Müons als Funktion seiner Energie E, unabhängig von der Zerfallszeit t? Die Antwort erhalten wir aus (4.57), indem wir über alle Zerfallszeiten tintegrieren:

$$N(E) = \int_0^\infty Z_0 \, e^{-t/\tau_\mu} \left[1 - \frac{1}{3} \cos\left(\frac{2E}{\hbar}t\right) \right] \, dt \quad . \tag{4.58}$$

In (4.58) ist die Energie E des Müons definiert durch

$$\Delta E_B = 2E \quad , \tag{4.59}$$

d. h. der Energienullpunkt entspricht der Energie des Müons ohne Magnetfeld (siehe Abb. 4.1). Aus der Größe (4.58) wollen wir nun die Zerfallswahrscheinlichkeit P(E) des Müons als Funktion seiner Energie E bestimmen, wobei wir P(E) (willkürlich) zu eins normieren für verschwindenden Interferenzeffekt. Aus (4.58) folgt somit

$$P(E) = \frac{\int_0^\infty Z_0 \, e^{-t/\tau_\mu} \left[1 - \frac{1}{3} \cos\left(\frac{2E}{\hbar}t\right)\right] \, dt}{\int_0^\infty Z_0 \, e^{-t/\tau_\mu} \, dt} \quad . \tag{4.60}$$

Nach (4.59) entspricht also die Variation der Energie E des Müons der Änderung der Energieaufspaltung ΔE_B , d. h. einer Variation des **B**-Feldes. Wir führen die Integrationen in (4.60) aus und finden (verifiziere!)

$$P(E) = 1 - \frac{1}{3} \frac{(\Gamma/2)^2}{E^2 + (\Gamma/2)^2} \quad , \tag{4.61}$$

wobei

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau_{\mu}} \tag{4.62}$$

die natürliche Linienbreite ist. Die Zerfallswahrscheinlichkeit (4.61) ist in Abb. 4.6 dargestellt.



Abb. 4.6. Zerfallswahrscheinlichkeit P(E) des Müons (zu eins normiert für $|E| \gg \Gamma$) als Funktion seiner Energie E, für beliebige Zerfallszeiten t

Der Interferenzeffekt als Funktion der Energie E des Müons ist also gegeben durch die Lorentz-Verteilung

$$I(E) = P(E) - P(\infty) = P(E) - 1 = -\frac{1}{3} \frac{(\Gamma/2)^2}{E^2 + (\Gamma/2)^2} \quad . \tag{4.63}$$

Nach (4.60) und (4.61) resultiert der Interferenzeffekt (4.63) aus der Superposition von Kosinusfunktionen, welche mit dem exponentiellen Zeitfaktor gewichtet sind.
170 4 Das Quanton in Raum und Zeit

Anhand der Spinrotation des Müons (Abb. 4.5) können wir das Verschwinden des Interferenzeffekts für $|E| \gg \Gamma$ folgendermaßen verstehen. Diese Bedingung bedeutet mit (4.59) und (4.62) $\frac{\Delta E_B}{2} \gg \frac{\hbar}{\tau_{\mu}}$, und mit (4.55) folgt daraus: Periode der Spinrotation $T \ll \tau_{\mu}$. Unter diesen Umständen mittelt sich die Anisotropie der Zerfallsverteilung der Positronen heraus (Abb. 4.5), weil im Moment des Müonzerfalls der Drehimpulsvektor beliebig positioniert ist. Umgekehrt ist für $|E| \stackrel{<}{\sim} \Gamma$ der Interferenzeffekt wesentlich, weil in diesem Fall die Positionen der Drehimpulsvektoren für die einzelnen Zerfälle stark korreliert sind (Abb. 4.5).

Die Energieverteilung P(E) und der Interferenzeffekt I(E) sind *abhängig* von der Geometrie des μ SR-Experiments. Würden wir nämlich den Positrondetektor (Abb. 4.5) um 180⁰ bezüglich der z-Achse (in der x-y-Ebene) drehen und die "Rückwärtspositronen" messen, dann würde der Interferenzeffekt das Vorzeichen wechseln. Noch drastischer zeigt sich die Geometrieabhängigkeit bei einer Drehung des Detektors um 90⁰ (siehe Aufgabe 34).

Unabhängig von der Geometrie gilt:

- Der Interferenzeffekt I(E) beschreibt die vollständige Energieabhängigkeit der Zerfallswahrscheinlichkeit P(E): P(E) = I(E) + 1.
- Der Interferenzeffekt I(E) verschwindet für $|E| \gg \Gamma$.

Interferenz und Weginformation

Das μ SR-Experiment demonstriert den für alle Quanteninterferenzexperimente fundamentalen Zusammenhang zwischen *Weginformation* und *Inter-ferenz* (Abschn. 3.3.1):

Interferenz und Weginformation schließen sich gegenseitig aus.

Wir haben geschen, dass für $|E| > \Gamma$ der Interferenzeffekt klein ist und für $|E| \gg \Gamma$ vollständig verschwindet, wobei $\Gamma = \hbar/\tau_{\mu}$ die natürliche Linienbreite ist. Letztere Bedingung ist gleichbedeutend mit $|\Delta E_B| \gg \Gamma$ (denn $\Delta E_B = 2E$). In diesem Fall ist die Weginformation zugänglich, denn wir können im Prinzip feststellen, aus welchem Energieeigenzustand das Müon zerfallen ist – beispielsweise durch eine zusätzliche Energiemessung der Zerfallsprodukte des Müons. Bemerkenswert dabei ist die Tatsache, dass der Interferenzeffekt auch dann verschwindet, wenn wir die zusätzliche Energiemessung der Zerfallsprodukte gar nicht ausführen! Das Verschwinden der Interferenz zeigt an, dass die Weginformation grundsätzlich erhältlich ist.

Wenn nun aber $|E| \lesssim \Gamma$ (d. h. auch $\Delta E_B \lesssim \Gamma$), sagt uns die Heisenbergsche Ungleichung in Energie und Zeit, dass die Energieverteilung mindestens die Breite Γ hat; d. h. die beiden Energieeigenzustände des Müons im Magnetfeld "überlappen". In diesem Fall ist es unmöglich, den Energieeigenzustand zu bestimmen, aus dem das Müon zerfallen ist; die Weginformation ist grundsätzlich unzugänglich.

4.1.3 Allgemeine Zeitabhängigkeit

Als Ausgangspunkt dient das Resultat des μ SR-Experiments, welches wir in folgender Relation zusammenfassen können. Wir setzen (4.41) in (4.21) ein und erhalten

$$\langle v|w(t)\rangle = \langle v|u_{E_1}\rangle\langle u_{E_1}|w(0)\rangle e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + \langle v|u_{E_2}\rangle\langle u_{E_2}|w(0)\rangle e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t} \quad . \quad (4.64)$$

Dies ist die allgemeine zeitabhängige Quantenamplitude für ein Quanton, welches zwei Energieeigenzustände u_{E_1} , u_{E_2} hat (Energieeigenwerte E_1 , E_2); zur Zeit t = 0 ist das Quanton im Zustand w(0). Mit Hilfe des Ausdrucks (4.64), zusammen mit (4.2), lässt sich der Zeitverlauf eines solchen Quantons im Prinzip vollständig berechnen – falls wir die in (4.64) auftretenden Quantenamplituden kennen.

Im Sinne des Quantonprinzips ist die naheliegende Verallgemeinerung der Relation (4.64) für ein *beliebiges Energiespektrum* eines Quantons

$$\langle v|w(t)\rangle = \sum_{E} \langle v|u_E\rangle \langle u_E|w(0)\rangle \, e^{-i\frac{E}{\hbar}\,t} \tag{4.65}$$

In (4.65) erstreckt sich die Summe über alle Energieeigenzustände u_E , wobei das Energiespektrum sowohl *diskret* als auch *kontinuierlich* sein kann. Dies ist ein *fundamentales Resultat*, auf das wir im *Kap. 5* zurückgreifen werden.

Um die zeitabhängigen Quantenamplituden (4.65) explizit bestimmen zu können, muss man die auftretenden Quantenamplituden – sowohl zwischen Anfangs- als auch Messzustand und den Energieeigenzuständen – kennen. (Im Beispiel des μ SR-Experiments waren dies alles Drehimpulszustände des Müons.) Ebenso müssen die Energieeigenwerte E bekannt sein. (Im μ SR-Experiment waren es die Energien des Zeeman-Effekts des Müons.)

4.2 Wellenfunktion im Orts- und Impulsraum

Das zentrale Thema dieses Abschnitts ist die *physikalische Größe* des Ortes. Alle Betrachtungen beziehen sich auf eine feste Zeit; die kombinierte Orts- und Zeitabhängigkeit des Quantons wird erst im Kap. 5 angegangen. Zunächst beschränken wir uns konkret auf eindimensionale Probleme. In diesem Abschnitt betrachten wir Quantonen mit Spin Null, mit Ausnahme der Spin 1/2-Quantonen im Schlussteil.

4.2.1 Ortsamplitude und Wahrscheinlichkeitsdichte

Der Ort X eines Quantons (zunächst eindimensional) ist eine physikalische Größe, die wir messen können, genauso wie die Energie E oder die Polarisation. Den Ort eines Quantons messen wir mit einem oder mehreren Teilchendetektoren (Quantondetektoren); denken wir etwa an die Streuung von

 α -Teilchen an Atomkernen (Abb. 2.4) oder an die Messung der Röntgenstrahlung mit dem CCD-Detektor (Abb. 2.3).

Im Sinne des Quantonprinzips (Abschn. 2.1.3) übertragen wir die Begriffe und Gesetze, wie wir sie im *Kap.* 3 entwickelt hatten (ausgehend von der physikalischen Größe *Polarisation*) auf die physikalische Größe Ort^5 .

Wir sagen: Ein Quanton, das sich am Ort x befindet, ist in einem Eigenzustand des Ortes; wir bezeichnen diesen speziellen Zustand mit u_x , wobei xder Eigenwert des Ortes ist. Ist das Quanton in einem beliebigen Zustand w, dann existiert eine Quantenamplitude $\langle u_x | w \rangle$, die wir als Ortsamplitude bezeichnen können. Die Quantenamplitude $\langle u_x | w \rangle$ ist im Allgemeinen eine komplexe Zahl für jeden Eigenzustand u_x (Eigenwert x). Wir können somit $\langle u_x | w \rangle$ als komplexe (kontinuierliche) Funktion von x auffassen. Aus historischen Gründen wird diese Funktion "Wellenfunktion im Ortsraum" genannt und mit

$$\psi_w(x) \equiv \langle u_x | w \rangle \tag{4.66}$$

bezeichnet. Der Name "Wellenfunktion" ist keine glückliche Bezeichnung, weil dadurch die Eigenschaften einer klassischen Welle suggeriert werden. Die Wellenfunktion $\psi_w(x)$ ist aber eine *Quantenamplitude*. Im Gegensatz zur klassischen Wellenfunktion ist sie im Allgemeinen *komplex*, und wir postulieren für sie alle Eigenschaften und Gesetze, denen Quantenamplituden unterworfen sind.

Es ist nützlich, eine konkrete physikalische Situation vor Augen zu haben, obschon die folgenden Gesetzmäßigkeiten allgemeine Gültigkeit beanspruchen. Wir betrachten einen Ausschnitt aus einem Strahl von Quantonen irgendeiner Quantonfabrik (Abb. 4.7).

Die Abb. 4.7(a) vermittelt die Momentaufnahme eines Strahls identischer, *klassischer* Teilchen, die durch Massenpunkte dargestellt sind. Dabei setzen wir voraus, dass die mittlere Teilchendichte in der y-z-Ebene für jedenWert von x *homogen* sei.

Quantenphysikalisch betrachten wir ein einzelnes Quanton des Strahls (im einheitlichen Zustand der Strahlteilchen), dessen Eigenschaften wir beschreiben wollen. Wir fragen nach der Wahrscheinlichkeit dafür, dieses Quanton im infinitesimalen Intervall zwischen x und x + dx zu finden. Diese Größe ist einerseits proportional zur Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho_w(x)$ (Wahrscheinlichkeit pro Längeneinheit; der Index w bezeichnet den Zustand des Quantons) und andererseits proportional zur Breite dx des Intervalls (Abb. 4.7).

⁵ Ort und Impuls eines Quantons sind physikalische Größen mit kontinuierlichen Eigenwertspektren, im Gegensatz etwa zu den diskreten Eigenwerten der Größe Polarisation. Die Erkenntnis, dass alle physikalischen Größen (Observablen), ob sie nun diskrete oder kontinuierliche Eigenwertspektren haben, den gleichen quantenphysikalischen Gesetzen unterworfen sind (Quantonprinzip), ist das Resultat der massiven Anstrengungen, die Quantenphysik in eine mathematisch strenge Form zu kleiden. Siehe dazu M. Jammer (Fuβnote 1-3), Chapter 6: "Statistical Transformation Theory".



Abb. 4.7. Strahl von Quantonen (a) (klassisches Bild) und entsprechende Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho_w(x)$ (b)

Entsprechend der allgemeinen Bedeutung der Projektionswahrscheinlichkeit (3.65) können wir – im vorliegenden Fall eines kontinuierlichen Spektrums von Eigenwerten – die *Wahrscheinlichkeitsdichte* gleich der *Projektionswahrscheinlichkeit* setzen:

$$\rho_w(x) = P(u_x \leftarrow w) = |\langle u_x | w \rangle|^2 = |\psi_w(x)|^2$$
(4.67)

(In (4.67) haben wir (3.65) und (4.66) verwendet.) Mit dem Ansatz (4.67) lässt sich nämlich auch die *Vollständigkeitsrelation* (3.46) (für den Fall des kontinuierlichen Eigenwertspektrums) befriedigen. Die Wahrscheinlichkeit dafür, das Quanton im Bereich $x_1 \leq x \leq x_2$ zu finden, ist nach (4.67) gegeben durch

$$P_w(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} \rho_w(x) \, dx = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_w(x)|^2 \, dx \quad . \tag{4.68}$$

Damit nimmt die Vollständigkeitsrelation (3.46) die Form an

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho_w(x) \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_w(x)|^2 \, dx = 1 \quad . \tag{4.69}$$

Die Vollständigkeitsrelation (4.69) besagt, dass die Wahrscheinlichkeit dafür, das Quanton irgendwo zu finden, gleich eins ist; sie entspricht einer Normierungsbedingung für die Wellenfunktion $\psi_w(x)$.

174 4 Das Quanton in Raum und Zeit

Als wichtiges **Beispiel** versuchen wir die Wellenfunktion eines *Eigenzu*standes u_p des Impulses P zu konstruieren (p ist der Eigenwert). Dieser Zustand ist auch Eigenzustand der Energie und damit ein stationärer Zustand. Wir bezeichnen dessen Wellenfunktion mit $\psi_p(x)$. Aufgrund der Heisenbergschen Ungleichung im Impuls und Ort,

$$\Delta P \cdot \Delta X \stackrel{>}{\sim} \hbar \quad , \tag{4.70}$$

können die Objekte eines Strahls von Quantonen mit festem Impuls $p(\Delta P = 0)$ nicht alle an einem festen Ort x sein (Abb. 4.7). Vielmehr ist das Quanton nach (4.70) vollständig *delokalisiert* in $x(\Delta X \to \infty)$ – eine Eigenschaft, die sich in der Wellenfunktion $\psi_p(x)$ ausdrücken muss. Wir behaupten, dass in unserem Fall die Wahrscheinlichkeitsdichte (und damit auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Quantons) *unabhängig von x* sein muss, d. h.

$$\rho_p(x) = |\psi_p(x)|^2 = \text{konst.}$$
(4.71)

Wäre nämlich $\rho_p(x)$ abhängig von x, dann wäre die Translationsinvarianz des Problems bezüglich x verletzt. (Kein Ort x ist ausgezeichnet.) Aus (4.71) folgt, dass die Wellenfunktion von der Form sein muss

$$\psi_p(x) = b \, e^{i\varphi_p(x)} \quad , \tag{4.72}$$

wobe
ibeine reelle Konstante ist und $\varphi_p(x)$ eine re
lle Funktion von x,abhängig von p; wir haben

$$\varphi_p(0) = 0 \tag{4.73}$$

gewählt⁶. Die Größe (4.72) wird oft (ungenau) als "ebene Welle" (Ortsabhängigkeit derselben) bezeichnet.

Die Wellenfunktion (4.72) beinhaltet ein Problem, im Zusammenhang mit der Vollständigkeitsrelation. Setzen wir nämlich $\psi_p(x)$ in (4.69) ein,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_p(x)|^2 \, dx = b^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx = 1 \quad , \tag{4.74}$$

dann stellen wir fest, dass die Wellenfunktion (4.72) nicht normierbar ist, denn das Integral (4.74) divergiert für jeden endlichen Wert von b! Diesem Problem werden wir am Schluss des Abschnitts unsere Aufmerksamkeit schenken. Wir erwähnen hier den Grundgedanken und das praktische Resultat der Untersuchung. Jeder Strahl von Quantonen hat eine endliche Impulsbreite Δp . Die physikalische Wellenfunktion des Quantons ist deshalb ein

⁶ Es besteht eine Analogie zwischen der zeitabhängigen Phase $\varphi_E(t)$ in Gleichung (4.7) und der ortsabhängigen Phase $\varphi_p(x)$ in (4.72). Die zeitabhängige Phase entspricht einem Zustand fester Energie, die ortsabhängige Phase einem Zustand festen Impulses. In beiden Fällen ist die Struktur der entsprechenden Gleichungen (4.7) und (4.72) eine Folge der Translationsinvarianz – einmal bezüglich der Zeit, das andere Mal bezüglich des Ortes.

"Wellenpaket", d. h. eine Überlagerung von ebenen Wellen eng benachbarter Impulse. Die Wellenfunktion (4.72) ist eine *Idealisierung* oder Approximation des Wellenpakets. Für die meisten praktischen Rechnungen können wir mit der Wellenfunktion (4.72) arbeiten – sofern wir eine der beiden Vorsichtsmaßnahmen treffen:

• Wir schränken den physikalischen Raum zunächst ein auf eine Länge L, welche groß ist gegenüber allen Lineardimensionen des Problems, aber endlich bleibt. Die Normierungsbedingung (4.74) lautet dann

$$b^2 \int_{-L/2}^{+L/2} dx = b^2 L = 1$$
 ; $b = \frac{1}{\sqrt{L}}$. (4.75)

Erst im Schlussresultat der Rechnung betrachten wir den Grenzfall $L \to \infty$.

• Wir lassen die Normierungskonstante *b* in der Wellenfunktion $\psi_p(x)$ frei und beschränken uns auf die Berechnung von physikalischen Größen, für welche sich *b* herauskürzt. Konkrete Beispiele dazu folgen im Kap. 5.

Nun wenden wir uns der Bestimmung der Phasenfunktion $\varphi_p(x)$ in (4.72) zu. Wie im Fall der Zeitabhängigkeit (Abschn. 4.1.2) können wir auch hier die unbekannte Phasenfunktion $\varphi_p(x)$ durch ein geeignetes Interferenzexperiment bestimmen. In Abb. 4.8 ist das für diesen Zweck geeignete Zweiweg-Quanten-Interferenzexperiment dargestellt.



Abb. 4.8. Zweiweg-Quanten-Interferenzexperiment zur Bestimmung der Phase $\varphi_p(x)$

Ein Strahl von Quantonen mit festem Impuls p bewegt sich in z-Richtung und trifft auf eine Wand mit zwei geometrisch identischen, kleinen Spaltöffnungen im Abstand d, welche in Richtung der y-Achse unendlich ausgedehnt sind. In der x-y-Ebene, im Abstand z_0 von der Wand $(z_0 \gg d)$, befindet sich ein Schirm. Wir interessieren uns für die *Wahrscheinlichkeitsdichte* $\rho_p(x)$ des Quantons längs der x-Achse auf dem Schirm, im Bereich $|x| \stackrel{\leq}{\sim} d/2$.

Wir betrachten eine feste Zeit. Zunächst denken wir uns den unteren Spalt geschlossen. In der Umgebung des Schirms (weit weg vom Spalt) können wir das Quanton als *eindimensionale*, ebene Welle

$$\psi_1(z_1) = b \, e^{i\phi_p(z_1)} \tag{4.76}$$

beschreiben (siehe Abb. 4.8), wobe
i z_1 mit der festen Position \boldsymbol{x} verknüpft ist durch

$$z_1^2 = z_0^2 + (x - d/2)^2 \quad . \tag{4.77}$$

Decken wir den oberen Spalt ab, dann ist die Wellenfunktion des Quantons an der Stelle \boldsymbol{x}

$$\psi_2(z_1) = b \, e^{i\varphi_p(z_2)} \quad , \tag{4.78}$$

wobei

$$z_2^2 = z_0^2 + (x + d/2)^2 \quad . \tag{4.79}$$

Welches ist die Wellenfunktion des Quantons an der Stelle x für die (ursprüngliche) Anordnung der Abb. 4.8? Die Antwort ist im Superpositionsprinzip der Quantenamplituden (3.64) enthalten. Wir können nämlich die Eigenzustände u_1, u_2 der Spaltpositionen **1** und **2** als vollständige Basis von Zwischenzuständen im Sinne eines Zweiweg-Interferenzexperiments auffassen. Die Quantenamplitude des gesamten Prozesses ist nach (3.64)

$$\langle u_x | u_p \rangle = \langle u_x | u_1 \rangle \langle u_1 | u_p \rangle + \langle u_x | u_2 \rangle \langle u_2 | u_p \rangle \quad . \tag{4.80}$$

Nun müssen wir die Quantenamplituden in (4.80) in die Sprache der Wellenfunktionen übersetzen. Beide Quantenamplituden $\langle u_1|u_p\rangle$ und $\langle u_2|u_p\rangle$ sind proportional zur Wellenfunktion (4.72) (ebene Welle) des einlaufenden Strahls

$$b e^{i\varphi_p(z_w)} \quad , \tag{4.81}$$

wobei z_w die Position der Wand ist (die beiden Proportionalitätskonstanten sind gleich). Die anderen beiden Quantenamplituden auf der rechten Seite der Relation (4.80) entsprechen genau den Wellenfunktionen (4.76) bzw. (4.78). Somit ist die Wellenfunktion $\psi_p(x)$, welche der Quantenamplitude $\langle u_x | u_p \rangle$ des Gesamtprozesses entspricht, nach (4.80)

$$\psi_p(x) \propto e^{i\varphi_p(z_w)} \left(e^{i\varphi_p(z_1(x))} + e^{i\varphi_p(z_2(x))} \right) \quad , \tag{4.82}$$

wobei die Funktionen $z_1(x)$, $z_2(x)$ durch die Beziehungen (4.77) bzw. (4.79) gegeben sind. Aus (4.82) folgt schließlich mit (4.67) die gesuchte Wahrscheinlichkeitsdichte des Quantons auf der x-Achse des Schirms 4.2 Wellenfunktion im Orts- und Impulsraum 177

$$\rho_p(x) \propto |e^{i\varphi_p(z_1(x))} + e^{i\varphi_p(z_2(x))}|^2 = 2\{1 + \cos[\varphi_p(z_2(x)) - \varphi_p(z_1(x))]\} \quad .$$
(4.83)

Experimentell findet man für alle Zweiweg-Quanten-Interferenzexperimente vom Typ der Abb. 4.8, dass der Interferenzterm von (4.83) eine *exakt* harmonische Funktion von x ist. Dies bedeutet, dass alle Interferenzexperimente verträglich sind mit der Phasenfunktion (siehe Aufgabe 38)

$$\underline{\varphi_p(z) = \frac{p}{\hbar}z} \quad , \tag{4.84}$$

wobe
izden Ort in Richtung der auf den Schirm einlaufenden Welle bezeichnet.
7

Mit dem Resultat (4.84) gehen wir zurück zur ursprünglich Form (4.72) der ebenen Welle. Die *Wellenfunktion eines Impulseigenzustandes* mit Eigenwert p ist somit

$$\psi_p(x) = b \, e^{i\frac{p}{\hbar}x} \quad , \tag{4.85}$$

wobei b eine freie, reelle Konstante ist; sie hat die Dimension [Länge]^{-1/2}.

Wir untersuchen nun die vollständige (normierbare) örtliche Wellenfunktion eines Impulseigenzustandes. Es gibt kein Quanton, dessen Impulseigenwert exakt p ist; jedes physikalische Quanton besitzt ein u. U. beliebig kleines, aber endliches Spektrum von Impulswerten in der unmittelbaren Umgebung von p. Für alle Quantenamplituden – also auch für die Wellenfunktionen – gilt das Superpositionsprinzip, sodass die vollständige örtliche Wellenfunktion des physikalischen Impulseigenzustandes π mit (4.85) gegeben ist durch

$$\psi_{\pi}(x) = \int_{\Delta p} f(p') \, e^{i \frac{p'}{\hbar} x} \, dp' \quad , \tag{4.86}$$

wobei das Integral über das Impulsspektrum (Δp) in der Umgebung von p zu erstrecken ist und die Funktion f(p') so festgelegt wird, dass $\psi_{\pi}(x)$ normiert ist, d. h.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_{\pi}(x)|^2 \, dx = 1 \quad . \tag{4.87}$$

Für jede glatte Kurve f(p') lässt sich (4.86) schreiben als eine Konstante mal $e^{i\frac{p}{\hbar}x}$ im Bereich $|x| \ll \frac{\hbar}{\Delta p}$. Dies entspricht dann der Approximation (4.85).

⁷ Die Phasenfunktion (4.84) wurde bestätigt durch präzise Experimente mit sehr langsamen ("ultra-kalten") Neutronen [R. Gähler and A. Zeilinger, Am. J. Phys. 59 (1991) 316], ebenso mit Elektronen [A. Tonomura et al., Am. J. Phys. 57 (1989) 117] und Atomen [O. Carnal and J. Mlynek, Phys. Rev. Lett. 66 (1991) 2689].

4.2.2 Impulsamplitude

Die Heisenbergsche Ungleichung (4.70) beinhaltet eine Relation zwischen Orts- und Impulseigenschaften des Quantons, welche beispielsweise in der Wellenfunktion $\psi_p(x)$ (4.85) zum Ausdruck kommen muss. Da die Orts- und Impulseigenschaften in (4.70) symmetrisch eingehen, kann man einen Schritt weitergehen und fragen: Gibt es vielleicht sogar eine allgemeine Symmetrie zwischen den Orts- und Impulseigenschaften des Quantons? In den folgenden Überlegungen lassen wir uns von diesem Gedanken leiten.

In Analogie zu (4.66) definieren wir eine "Wellenfunktion im Impulsraum"

$$\hat{\psi}_w(p) \equiv \langle u_p | w \rangle \quad , \tag{4.88}$$

wobei w wiederum einen beliebigen Zustand des Quantons bezeichnet, und u_p ist ein Eigenzustand des Impulses mit Eigenwert p. Wir können die Quantenamplitude $\langle u_p | w \rangle$ als **Impulsamplitude** bezeichnen. Analog zu (4.67) definieren wir die Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum als Projektionswahrscheinlichkeit der Impulsamplitude

$$\sigma_w(p) = P(u_p \leftarrow w) = |\langle u_p | w \rangle|^2 = |\hat{\psi}_w(p)|^2 \quad , \tag{4.89}$$

wobei wir (4.88) verwendet haben. Die Wahrscheinlichkeit dafür, das Quanton mit Impulsen im Bereich $p_1 \le p \le p_2$ zu finden, ist nach (4.89)

$$P_w(p_1, p_2) = \int_{p_1}^{p_2} \sigma_w(p) \, dp = \int_{p_1}^{p_2} |\hat{\psi}_w(p)|^2 \, dp \quad . \tag{4.90}$$

Die *Vollständigkeitsrelation* bezüglich der Eigenzustände des Impulses lautet (entsprechend (4.69))

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \sigma_w(p) \, dp = \int_{-\infty}^{+\infty} |\hat{\psi}_w(p)|^2 \, dp = 1 \quad . \tag{4.91}$$

Als interessantes **Beispiel** suchen wir die Wellenfunktion im Impulsraum $\hat{\psi}_x(p)$ eines Quantons, das "exakt" am Ort x (im Ortsraum) lokalisiert ist. Die entsprechende Impulsamplitude $\langle u_p | u_x \rangle$ können wir nach (3.92) schreiben als

$$\langle u_p | u_x \rangle = \overline{\langle u_x | u_p \rangle} \quad , \tag{4.92}$$

wobei $\langle u_x | u_p \rangle$ die Ortsamplitude darstellt, deren Wellenfunktion (approximativ) durch (4.85) gegeben ist. Die entsprechende Wellenfunktion im Impulsraum, $\hat{\psi}_x(p)$ ist also proportional zum Konjugiert-Komplexen der Wellenfunktion (4.85) – aufgefasst als Funktion von p. Damit haben wir das Resultat

$$\hat{\psi}_x(p) = c \, e^{-i\frac{x}{\hbar}p} \quad , \tag{4.93}$$

wobei die (reelle) freie Konstante c die Dimension [Impuls]^{-1/2} hat. Für diesen Zustand des Quantons ist die Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum nach (4.89) mit (4.93)

$$\sigma_x(p) = |\hat{\psi}_x(p)|^2 = c^2 = \text{konst.}$$
 (4.94)

Der Vergleich von (4.94) mit (4.71) zeigt eine bemerkenswerte Symmetrie zwischen Orts- und Impulsraum, die in Abb. 4.9 dargestellt ist.



Abb. 4.9. Wahrscheinlichkeitsdichten im Orts- und Impulsraum (schematisch) für Quantonen mit Impulseigenwert p: (a) bzw. Ortseigenwert x: (b)

Das Quanton im Impulseigenzustand (Eigenwert p) hat eine konstante Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum; das Quanton im Ortseigenzustand (Eigenwert x) hat konstante Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Impulsraum.

Auch hier muss darauf hingewiesen werden, dass die Wellenfunktion (4.93) eine *Idealisierung* oder Approximation darstellt. Denn aus (4.94) geht unmittelbar hervor, dass die Wellenfunktion (4.93) *nicht normierbar* ist. Genauso wenig wie es ein Quanton des exakten Eigenwerts p gibt, existiert ein Quanton, das im Ortsraum exakt an der Stelle x lokalisiert ist. Jeder Ortsdetektor, so klein er auch sein mag, hat eine endliche Ausdehnung. Entsprechend hat jedes beliebig gut lokalisierte Quanton ein Spektrum von x-Werten endlicher Breite Δx in der unmittelbaren Umgebung von x. Der dazugehörige lokalisierte Zustand ξ des Quantons hat – als Folge des Superpositionsprinzips und mit (4.93) – die Wellenfunktion

$$\hat{\psi}_{\xi}(p) = \int_{\Delta x} g(x') \, e^{-i\frac{p}{\hbar}x'} \, dx' \quad , \tag{4.95}$$

wobei die Funktion g(x') dadurch festgelegt wird, dass $\hat{\psi}_{\xi}(p)$ normiert ist, d. h.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\hat{\psi}_{\xi}(p)|^2 \, dp = 1 \quad . \tag{4.96}$$

Für jede glatte Kurve g(x') geht (4.95) im Bereich $|p| \ll \frac{\hbar}{\Delta x}$ über in (4.93).

Als Nächstes betrachten wir ein Quanton in einem **beliebigen Zu**stand w. Die zugehörige Wellenfunktion im Ortsraum, $\psi_w(x)$, sei gegeben. Frage: Können wir daraus die Wellenfunktion im Impulsraum, $\hat{\psi}_w(p)$, die zum selben Zustand w gehört, bestimmen?

Wir gehen aus von (4.88) und verwenden das Superpositionsprinzip der Quantenamplituden (3.64) bezüglich einer vollständigen Basis von Eigenzuständen u_x des Ortes:

$$\hat{\psi}_w(p) = \langle u_p | w \rangle = ,, \sum_x \langle u_p | u_x \rangle \langle u_x | w \rangle^{*} \quad . \tag{4.97}$$

Die Anführungszeichen der Summe weisen darauf hin, dass das Superpositionsprinzip in dieser Form für Größen mit *diskreten* Eigenwertspektren entwickelt wurde. Die Quantenamplituden in (4.97) sollen hier durch die Wellenfunktionen der *kontinuierlichen* Variablen x ausgedrückt werden. Wir schreiben zunächst (4.97) mit (4.92) in der Form

$$\hat{\psi}_w(p) = ,, \sum_x \overline{\langle u_x | u_p \rangle} \langle u_x | w \rangle^{"} , \qquad (4.98)$$

führen für $\overline{\langle u_x | u_p \rangle}$ das Konjugiert-Komplexe der (approximativen) Wellenfunktion (4.85) ein, schreiben $\langle u_x | w \rangle$ mit (4.66) als $\psi_w(x)$ und verwandeln die Summe (4.97) in ein Integral:

$$\hat{\psi}_{w}(p) = a \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{p}{\hbar}x} \,\psi_{w}(x) \,dx$$
(4.99)

Da die ebene Welle (4.85) eine unbestimmte Konstante enthält, müssen wir auch hier eine freie (reelle) Konstante (a) einführen, welche die Dimension $[Länge \times Impuls]^{-1/2}$ hat.

Wir können auch das *Umkehrproblem* lösen. Sei $\hat{\psi}_w(p)$ die Wellenfunktion im Impulsraum für den beliebigen Zustand w des Quantons. Dann ist die zugehörige Wellenfunktion im Ortsraum

$$\psi_w(x) = \langle u_x | w \rangle = ,, \sum_x \langle u_x | u_p \rangle \langle u_p | w \rangle = ,, \sum_x \overline{\langle u_p | u_x \rangle} \langle u_p | w \rangle , \quad (4.100)$$

wobei wir im Superpositionsprinzip eine vollständige Basis von Eigenzuständen u_p eingeschoben haben.

Die entsprechenden Schritte, die zum Resultat (4.99) führten, ergeben – unter Verwendung von (4.93) und (4.88) – die Lösung des Umkehrproblems:

$$\psi_w(x) = a' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{x}{\hbar}p} \,\hat{\psi}_w(p) \,dp$$
(4.101)

Die Konstanten a' in (4.101) und a in (4.99) sind identisch und haben den Wert (Aufgabe 39):

$$\underline{a = a' = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}} \quad . \tag{4.102}$$

Die Ergebnisse (4.99) und (4.101) besagen:

Die **Fourier-Transformierte**⁸ einer beliebigen Wellenfunktion im Ortsraum ist identisch mit der entsprechenden Wellenfunktion im Impulsraum; die Wellenfunktion im Ortsraum ist gleich der inversen Fourier-Transformierten der Wellenfunktion im Impulsraum.

Dieses Resultat ist bemerkenswert aus zwei Gründen. Erstens manifestiert es auf eindrückliche Weise die Symmetrie zwischen Ortsraum und Impulsraum. Zum Zweiten haben wir einen bekannten mathematischen Zusammenhang (die Fourier-Transformation) hergeleitet dadurch, dass wir unsere Gesetze der Quantenamplituden hingeschrieben haben. Was bedeutet das? Haben wir die Fourier-Transformation neu bewiesen? – sicher nicht! Es ist vielmehr ein deutlicher Hinweis darauf, dass die mathematische Struktur unseres Formalismus der Quantentheorie richtig ist; der Formalismus in diesem Bereich ist mathematisch widerspruchsfrei. Um es etwas salopp auszudrücken: Die Mathematik macht mit!

Die in den obigen Betrachtungen eingegangenen Gesetze der Quantenamplituden sind das *Superpositionsprinzip*, die Relation *inverser Projektionen* sowie die *Vollständigkeit*.

Als Anwendungsbeispiel der Fourier-Transformation wollen wir zeigen, dass auch die **Orthogonalität** im Wellenfunktionsformalismus kontinuierlicher Observablen mit enthalten ist.

Die Orthogonalitätsrelation für diskrete Eigenwertspektren lautet (3.100)

$$\langle u_n | u_{n'} \rangle = \delta_{nn'} \quad . \tag{4.103}$$

Wir setzen für $\psi_w(x)$ in (4.99) die Wellenfunktion (4.85) mit $p = p'(\psi_{p'}(x))$ ein und erhalten

$$\hat{\psi}_{p'}(p) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{p}{\hbar}x} e^{i\frac{p'}{\hbar}x} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{x}{\hbar}(p'-p)} dx \quad . \tag{4.104}$$

⁸ Siehe z.B. [KP-1, Anhang D].

Für $p \neq p'$ verschwinden die Integrale des Real- und Imaginärteils in (4.104). Dies entspricht aber genau der Orthogonalitätsrelation (4.103) für die Eigenzustände des Impulses, $u_n \equiv u_p$.

Auf analoge Weise beweist man die Orthogonalitätsrelation für die Eigenzustände des Ortes $u_n \equiv u_x$ (verifiziere!).

4.2.3 Größen mit kontinuierlichen Eigenwertspektren

Ort und Impuls sind physikalische Größen mit kontinuierlichen Eigenwertspektren. Bereits im Kap. 2 – im Zusammenhang mit der Heisenbergschen Ungleichung (Abschn. 2.3.3) – hatten wir uns mit den Eigenwertspektren von Ort und Impuls beschäftigt und diese charakterisiert durch Mittelwerte und spektrale Breiten. Mit Hilfe des Begriffs der Wellenfunktion können wir nun Mittelwerte und spektrale Breiten exakt berechnen.

Betrachten wir zunächst die physikalische Größe X des Ortes. Der Mittelwert $\langle X \rangle$ für einen beliebigen Zustand w des Quantons ist definiert als⁹

$$\langle X \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho(x) \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x)|^2 \, dx \quad , \tag{4.105}$$

wobei $\rho(x)$ und $\psi(x)$ Wahrscheinlichkeitsdichte und Wellenfunktion des Quantons im Ortsraum sind. Die spektrale Breite ΔX ist definiert als die Wurzel aus der quadratischen Abweichung vom Mittelwert ("Standard-Abweichung")

$$\Delta X \equiv \sqrt{\langle (x - \langle X \rangle)^2 \rangle} \quad . \tag{4.106}$$

Aus (4.106) folgt

$$(\Delta X)^2 = \langle x^2 - 2x \langle X \rangle + \langle X \rangle^2 \rangle = \langle X^2 \rangle - 2 \langle X \rangle \langle X \rangle + \langle X \rangle^2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 ,$$
(4.107)

oder, wiederum ausgedrückt durch die Wellenfunktion im Ortsraum

$$(\Delta X)^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi(x)|^2 \, dx - \left(\int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x)|^2 \, dx\right)^2 \quad . \tag{4.108}$$

Offensichtlich gelten analoge Relationen für die physikalische Größe P in Bezug auf die Wellenfunktion $\hat{\psi}(p)$ im Impulsraum. Der Mittelwert ist

$$\langle P \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p |\hat{\psi}(p)|^2 \, dp \tag{4.109}$$

und das Quadrat der spektralen Breite

$$(\Delta P)^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} p^2 |\hat{\psi}(p)|^2 \, dx - \left(\int_{-\infty}^{+\infty} p |\hat{\psi}(p)|^2 \, dp\right)^2 \quad . \tag{4.110}$$

 9 Wir lassen im Folgenden den Index w weg.

Falls also, für einen beliebigen Zustand (w) des Quantons, eine der entsprechenden Wellenfunktionen bekannt ist (entweder $\psi(x)$ oder $\hat{\psi}(p)$), kann die andere durch Fourier-Transformation erhalten werden und *beide* spektralen Breiten, ΔX (4.108) und ΔP (4.110), sind exakt berechenbar.

Im Zusammenhang mit der präzisen Definition der spektralen Breiten geben wir den genauen Wert der unteren Schranke in der Heisenbergschen Ungleichung (4.70):

$$\Delta P \cdot \Delta X \ge \hbar/2 \tag{4.111}$$

Für den Beweis der allgemeinen Gültigkeit dieses Resultats verweisen wir auf die Theorievorlesungen zur Quantenphysik. (Siehe auch Aufgabe 51, *Kap. 5.*)

4.2.4 Wellenfunktionen in drei Dimensionen

Bis jetzt haben wir uns im Abschn. 4.2 auf eindimensionale Wellenfunktionen beschränkt. Die Physik spielt sich natürlich immer in drei räumlichen Dimensionen ab. Die eindimensionale Betrachtungsweise bedeutet eine Idealisierung oder Approximation zur physikalischen Wirklichkeit. Die Wellenfunktion (4.81), die den einlaufenden Strahl des Zweiweg-Interferenzexperiments (Abb. 4.8) beschreibt, wie auch die Wellenfunktionen (4.76) und 4.78), die wir den beiden Teilwegen in der Umgebung des Schirms zugeordnet haben, sind Beispiele dafür. Jede dieser Wellenfunktionen ist – streng genommem – dreidimensional. Die eindimensionale Wellenfunktion des einlaufenden Strahls beispielsweise setzt voraus, dass die Ausdehnung des Strahls (senkrecht zur Bewegungsrichtung der Quantonen) groß ist gegenüber dem Spaltabstand d.

Analog zu (4.66) definieren wir die Wellenfunktion im dreidimensionalen Ortsraum für ein Quanton in einem beliebigen Zustand w als die Ortsamplitude¹⁰

$$\psi_w(\mathbf{r}) \equiv \langle u_\mathbf{r} | w \rangle \tag{4.112}$$

Hier ist $u_{\mathbf{r}}$ der Eigenzustand des Ortes und $\mathbf{r} = (x, y, z)$ der entsprechende Eigenwert. Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho_w(\mathbf{r})$ ist wiederum gleich der Projektionswahrscheinlichkeit bezüglich der Ortsamplitude

$$\rho_w(\mathbf{r}) = P(u_{\mathbf{r}} \leftarrow w) = |\langle u_{\mathbf{r}} | w \rangle|^2 = |\psi_w(\mathbf{r})|^2$$
(4.113)

¹⁰ In (4.112) ist wiederum vorausgesetzt, dass die Wellenfunktion normierbar sei; die Normierbarkeit beinhaltet die fundamentale Eigenschaft der Vollständigkeit.

Die *Vollständigkeitsrelation* drückt sich auch hier als Normierungsbedingung für die Wellenfunktion aus:

$$\iiint_{-\infty}^{+\infty} |\psi_w(\mathbf{r})|^2 \, d^3 r = 1 \quad , \tag{4.114}$$

wobei das Integral über alle drei Ortskoordinaten x, y, z auszuführen ist $(d^3r = dx \, dy \, dz)$.

Als wichtiges **Beispiel** suchen wir die dreidimensionale Wellenfunktion (im Ortsraum) eines freien Quantons, welches im Eigenzustand $u_{\mathbf{p}}$ des Impulses $\overrightarrow{\mathbf{p}}$ ist, mit Eigenwert $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$.

Die Wellenfunktion ist proportional zur entsprechenden Ortsamplitude

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \propto \langle u_{\mathbf{r}} | u_{\mathbf{p}} \rangle$$
 . (4.115)

Sowohl die drei Komponenten P_x, P_y, P_z des Impulses als auch die drei Ortskomponenten X, Y, Z sind unter sich verträgliche physikalische Größen. (Es gibt keine Heisenbergschen Ungleichungen für irgendein Paar der drei Komponenten.) Dasselbe gilt für irgendein Paar unterschiedlicher Komponenten von Impuls und Ort (z.B. P_x und Y). All dies bedeutet: Die Projektionswahrscheinlichkeiten gleicher Komponenten des Impulses und des Orts sind unabhängig voneinander. Deshalb ist die der Wellenfunktion $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ entsprechende Projektionswahrscheinlichkeit (für festen Zustand $u_{\mathbf{p}}$) gleich dem Produkt der Projektionswahrscheinlichkeiten der Komponenten,

$$P(u_{\mathbf{r}} \leftarrow u_{\mathbf{p}}) = P(u_x \leftarrow u_{p_x}) P(u_y \leftarrow u_{p_y}) P(u_z \leftarrow u_{p_z}) \quad . \tag{4.116}$$

Die Eigenschaft (4.116) wird garantiert durch den Produktansatz

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \propto e^{i\frac{p_x}{\hbar}x} e^{i\frac{p_y}{\hbar}y} e^{i\frac{p_z}{\hbar}z}$$
(4.117)

mit eindimensionalen Wellenfunktionen vom Typ (4.85). Die Wellenfunktion (4.117) schreiben wir in der kompakten Form

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = B \, e^{\frac{i}{\hbar} \, \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \tag{4.118}$$

wobei die freie Konstante *B* die Dimension $[Länge]^{-3/2}$ hat. Die Wellenfunktion (4.118) ist wiederum nicht normierbar und deshalb gelten die gleichen Vorsichtsmaßnahmen, wie wir sie in Abschn. 4.2.1 diskutiert hatten.

Alle Überlegungen der Abschnitte 4.2.1 und 4.2.2 für den eindimensionalen Fall lassen sich auf drei Dimensionen übertragen. Insbesondere ist die (dreidimensionale) Wellenfunktion im Impulsraum eines beliebigen Zustandes w des Quantons definiert als die Impulsamplitude

$$\hat{\psi}_w(\mathbf{p}) \equiv \langle u_\mathbf{p} | w \rangle \tag{4.119}$$

wobei $u_{\mathbf{p}}$ der Eigenzustand des Impulses mit den Eigenwerten $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ ist. Die entsprechende *Wahrscheinlichkeitsdichte* $\sigma_w(\mathbf{p})$ im Impulsraum ist gleich der Projektionswahrscheinlichkeit

$$\sigma_w(\mathbf{p}) = P(u_\mathbf{p} \leftarrow w) = |\langle u_\mathbf{p} | w \rangle|^2 = |\hat{\psi}_w(\mathbf{p})|^2$$
(4.120)

Analog zu (4.93) ist die Wellenfunktion eines Ortseigenzustandes mit Eigenwert $\mathbf{r} = (x, y, z)$ gegeben durch

$$\hat{\psi}_{\mathbf{r}}(\mathbf{p}) = C \, e^{-\frac{i}{\hbar} \, \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}} \quad , \tag{4.121}$$

wobei die Konstante C die Dimension [Impuls]^{-3/2} hat.

Schließlich können wir die Wellenfunktion im Impulsraum ausdrücken durch die Wellenfunktion im Ortsraum für einen beliebigen Zustand w des Quantons (verifiziere!):

$$\hat{\psi}_w(\mathbf{p}) = A \iiint_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \psi_w(\mathbf{r}) d^3 r$$
(4.122)

Umgekehrt ist die Wellenfunktion im Ortsraum gegeben durch die Wellenfunktion im Impulsraum als

$$\psi_w(\mathbf{r}) = A \iiint_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}} \hat{\psi}_w(\mathbf{p}) d^3 p$$
(4.123)

wobei die freie Konstante A in (4.122) und (4.123) den Wert hat

$$\underline{A} = (2\pi\hbar)^{-3/2} \quad . \tag{4.124}$$

Dieses Resultat folgt aus (4.102) zusammen mit einer Dimensionsbetrachtung.

Die im Abschn. 4.2.2 formulierte Aussage über den Zusammenhang zwischen den Wellenfunktionen im Orts- und Impulsraum als **Fourier-Transformierte** gilt also auch für *dreidimensionale* Wellenfunktionen.

Im Kap. 5 werden wir auf die Resultate dieses Abschnitts zurückgreifen.

4.3 Spinoren

Die Drehimpulseigenschaften der *Quantonen* mit Spin 1/2 lassen sich mit Hilfe einer speziellen Art von Wellenfunktionen beschreiben, welche auf der Einheitskugel im Ortsraum definiert sind. Die Grundlagen dafür wurden bereits im Abschn. 3.3.4 erarbeitet. Am Schluss dieses Abschnitts erwähnen wir noch den Spinorenformalismus. Die früher erhaltenen Quantenamplituden (3.116) und (3.117) zur Erinnerung:

$$\langle \uparrow | u(\theta, \phi) \rangle = \cos(\theta/2) e^{i \phi/2} \quad ; \quad \langle \downarrow | u(\theta, \phi) \rangle = \sin(\theta/2) e^{-i \phi/2} \quad . \quad (4.125)$$

Wir betrachten ein Quanton, das sich in einem Eigenzustand der z-Komponente seines Drehimpulses befindet (Quantenzahl $m_z = +1/2$ oder -1/2) und fragen nach der Wahrscheinlichkeit dafür, an diesem Quanton den Drehimpulszustand $u(\theta, \phi)$ (Drehimpuls $\hbar/2$ in Richtung der Polarwinkel θ, ϕ) zu messen (Abb. 3.15). Eine experimentelle Realisierung dieser Messung ist in der Stern-Gerlach-Apparatur der Abb. 3.8 dargestellt. Am durchgehenden, polarisierten Strahl wählt der Strahlteiler den Teilstrahl aus, dessen Atome im Drehimpulszustand $u(\theta, \phi)$ sind (die z-Richtung der Abb. 3.8 entspricht der Richtung θ, ϕ in Abb. 3.15). Die gesuchte Projektionswahrscheinlichkeit für den Ausgangszustand $m_z = +1/2$ folgt aus der ersten Quantenamplitude in (4.125):

$$P(u_{\theta\phi} \leftarrow \uparrow) = |\langle u(\theta, \phi)| \uparrow \rangle|^2 = |\overline{\langle \uparrow | u(\theta, \phi) \rangle}|^2 = \cos^2(\theta/2) = \frac{1}{2} (1 + \cos\theta) \quad .$$

$$(4.126)$$

Für den Ausgangszustand $m_z = -1/2$ ist die Projektionswahrscheinlichkeit mit (4.125)

$$P(u_{\theta\phi} \leftarrow \downarrow) = |\langle u(\theta, \phi)| \downarrow \rangle|^2 = |\overline{\langle \downarrow | u(\theta, \phi) \rangle}|^2 = \sin^2(\theta/2) = \frac{1}{2} \left(1 - \cos\theta\right) \quad .$$
(4.127)

Die Projektionswahrscheinlichkeiten (4.126) und (4.127) sind unabhängig vom Winkel ϕ . In Abb. 4.10 sind die beiden Projektionswahrscheinlichkeiten als Funktionen auf der Einheitskugel grafisch dargestellt.

Die Wahrscheinlichkeit (4.126) beispielsweise hat den Wert Eins für $\theta = 0$ (hier ist die Wahrscheinlichkeit eine Sicherheit) und geht mit zunehmendem Winkel θ monoton nach null (für $\theta = \pi$).

Da die Projektionswahrscheinlichkeiten invariant sind gegenüber einer Vertauschung von Anfangs- und Endzustand, gelten die Ergebnisse (4.126) und (4.127) auch für die inversen Prozesse: Preparation des Quantons im Zustand $u(\theta, \phi)$ und Messung der Zustände $m_z = \pm 1/2$.

Die Drehimpulszustände $m_z = \pm 1/2$ stellen eine vollständige Basis dar. Die Vollständigkeitsrelation ist erfüllt, denn die Quantenamplituden (4.125) sind von der Form

$$\langle \uparrow | u(\theta, \phi) \rangle = a \quad ; \quad \langle \downarrow | u(\theta, \phi) \rangle = b$$
 (4.128)

mit der Eigenschaft

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \quad . \tag{4.129}$$



Abb. 4.10. Die Projektionswahrscheinlichkeiten $P(u_{\theta\phi} \leftarrow \uparrow)$ und $P(u_{\theta\phi} \leftarrow \downarrow)$ als Funktion von θ

Da die Form der Quantenamplituden (4.125) (bis auf einen gemeinsamen, unbeobachtbaren Phasenwinkel) die allgemeinste Parametrisierung darstellt, welche die Eigenschaft (4.129) hat, schließen wir: Der Zustand $u(\theta, \phi)$ ist der allgemeinste Drehimpulszustand eines Quantons mit Spin 1/2.

In der mathematischen Formulierung der Quantentheorie werden den physikalischen Größen Operatoren zugeordnet (Anhang E). In diesem Zusammenhang ist es zweckmäßig, die Zustände des Eigendrehimpulses (Spin) von Quantonen durch so genannte **Spinoren** darzustellen.

Ein Quanton mit Spin 1/2 hat zwei Freiheitsgrade des Drehimpulses, welche charakterisiert sind durch die zwei Eigenzustände einer vollständigen Basis (beispielsweise die beiden m_z -Zustände). Der allgemeinste Drehimpulszustand ist eine (beliebige) kohärente Superposition der Basiszustände. Diesen Sachverhalt kann man durch zweikomponentige Matrizen – so genannte Spinoren – darstellen. Der allgemeinste Drehimpulszustand χ des Quantons schreibt sich als

$$\chi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \alpha \, \chi_+ + \beta \, \chi_- \quad , \tag{4.130}$$

wobei

$$\chi_{+} = \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \chi_{-} = \begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix} \tag{4.131}$$

Einheitsspinoren sind und die Drehimpulseigenzustände $m_z = +1/2 \ (\chi_+)$ und $m_z = -1/2 \ (\chi_-)$ darstellen. Die Vollständigkeitsrelation verlangt dann

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad . \tag{4.132}$$

In unserer Darstellung der Drehimpulseigenschaften (Kap. 7) verwenden wir konsequent den Formalismus der Wellenfunktion im Spinraum (Abschn. 7.1.2), der auf den Quantenamplituden (4.125) basiert.

Aufgabe 32 μ SR-Experiment I (Abb. 4.3).

- 1. Berechne den Erwartungswert der Drehimpulskomponente $\langle J_z(t) \rangle$ des Müons.
- 2. Wie groß ist die Müon-Spin-Rotationsfrequen
z ω für ein Magnetfeld von $B=0.6~\mathrm{T?}$

Aufgabe 33 μ SR-Experiment II (Abb. 4.3).

Zeige, dass die Emissionswahrscheinlichkeit des Positrons (für ein lebendes μ^+) als Funktion des Winkels Ψ zwischen dem Erwartungswert des Drehimpulses des Müons und der Richtung des Detektors proportional ist zu

$$W(\Psi) = 1 + \frac{1}{3}\cos\Psi$$
 (4.133)

Aufgabe 34 μ SR-Experiment III. Wir drehen den Positrondetektor der Abb. 4.3 in die negative y-Richtung und messen die Positronen des Müonzerfalls senkrecht zur Richtung des einlaufenden Strahls. Die Emissionswahrscheinlichkeit des Positrons als Funktion des Winkels Ψ zwischen dem Erwartungswert des Drehimpulses des Müons und der Richtung des Detektors (Abb. 4.5) ist proportional zu (Resultat der Aufgabe 33)

$$W(\Psi) = 1 + \frac{1}{3}\cos\Psi$$

- 1. Berechne die Zerfallshäufigkeit Z(t) des Müons als Funktion seiner Lebenszeit t und des Magnetfeldes B.
- 2. Berechne die Zerfallswahrscheinlichkeit P(E) des Müons als Funktion seiner Energie E, unabhängig von der Zerfallszeit t; P(E) ist definiert als Zerfallswahrscheinlichkeit bezogen auf den Mittelwert über alle Orientierungen des Drehimpulses $\langle \mathbf{J} \rangle$ des Müons. Stelle P(E) graphisch dar.

Aufgabe 35 μ SR-Experiment IV (Abb. 4.3). Die Zerfallshäufigkeit als Funktion der Lebensdauer t der Müonen in der Geometrie der Abb. 4.3 ist gegeben durch

$$Z(t) = Z_0 e^{-t/\tau} \left[1 - \frac{1}{3} \cos\left(\frac{\Delta E_B}{\hbar} t\right) \right]$$

wobe
i ΔE_B die Energieaufspaltung des Müons im Magnetfeld ist und
 $\tau\equiv\tau_\mu$ seine mittlere Lebensdauer.

- 1. Berechne die Gesamtzahl der Zerfälle des Müons $N(E; t_1, t_2)$ im Zeitintervall $t_1 \leq t \leq t_2$ als Funktion seiner Energie E für die beiden Fälle (a): $0 \leq t \leq \tau$ und (b): $\tau \leq t \leq \infty$.
- 2. Bestimme für die beiden Fälle (a) und (b) die Zerfallswahrscheinlichkeit des Müons als Funktion seiner Energie ${\cal E}$

$$P(E;t_1,t_2) = \frac{N(E;t_1,t_2)}{\int_{t_1}^{t_2} Z_0 e^{-t/\tau} dt}$$

Aufgabe 36 μ SR-Experiment V. Der Strahl der einlaufenden Müonen liegt in der x-z-Ebene und bildet mit der Richtung des Magnetfeldes (z-Achse) den Winkel θ (Abb. 4.11).

1. Berechne für diese Geometrie den Erwartungswert des Drehimpulses $\langle {\bf J}(t)\rangle$ des Müons; skizziere seine Zeitabhängigkeit.



Abb. 4.11. Allgemeine Geometrie des μ SR-Experiments

2. Wie hängt die Müon-Spin-Rotationsfrequenz ω vom Winkel θ ab?

Aufgabe 37 Neutronen im Magnetfeld. Ein monochromatischer Strahl von Neutronen (De-Broglie-Wellenlänge $\lambda = 1.55$ Å (1 Å= 10⁻¹⁰ m), Spin 1/2, g-Faktor = -3.83, Protonenmasse $m_p = 938$ MeV/c² \simeq Neutronenmasse m_n) wird im Polarisator (Abb. 4.12) in x-Richtung polarisiert und tritt in ein Gebiet mit einem in z-Richtung orientierten homogenen Magnetfeld ($B = 1.55 \times 10^{-3}$ T).



Abb. 4.12. Polarisierte Neutronen im Magnetfeld

Ein im Abstand d vom Polarisator beweglich angeordneter Analysator ist durchlässig für Neutronen, die in x-Richtung polarisiert sind. Die austretenden Neutronen werden mit dem (mitbewegten) Detektor – als Funktion des Abstandes dzwischen Analysator und Polarisator – gezählt.

Berechne die Detektionswahrscheinlichkeit P(d) eines in das Magnetfeldgebiet eintretenden Neutrons als Funktion des Abstandes d; skizziere den Verlauf.

Der Neutronenzerfall kann vernachlässigt werden.

Aufgabe 38 Doppelspalt-Interferenzexperiment. Wir betrachten das in Abb. 4.8 dargestellte Zweiweg-Quanten-Interferenzexperiment.

190 4 Das Quanton in Raum und Zeit

- 1. Berechne die Intensitätsverteilung auf dem Schirm als Funktion von x, d, z_0 und dem Impuls p der einlaufenden Quantonen. Skizziere das Resultat in Abhängigkeit von x.
- 2. Wie groß ist der Abstand Δx benachbarter Maxima der Intensitätsverteilung für (sehr langsame) Neutronen der De-Broglie-Wellenlänge $\lambda = 18.45$ Å (1 Å= 10^{-10} m), mit $d = 126 \ \mu m \ (1 \ \mu m = 10^{-6} \text{ m}) \text{ und } z_0 = 5 \text{ m}$?

Aufgabe 39 *Wellenfunktionen*. Die Wellenfunktionen (eindimensional) eines Quantons im Ortsraum seien gegeben:

(a)
$$\psi(x) = B e^{-\frac{|x|}{\lambda}}$$
; (b) $\psi(x) = B e^{-(\frac{x}{\lambda})^2}$

- 1. Normiere die Wellenfunktionen (a), (b).
- 2. Berechne die zu (a) und (b) gehörigen Wellenfunktionen $\hat{\psi}(p)$ im Impulsraum (einschließlich der Normierung).
- 3. Bestimme die Konstanten a, a' der Fourier-Transformierten (4.99) und (4.101) für normierte Wellenfunktionen.
- 4. Berechne die spektralen Breiten ΔX und ΔP für den Zustand (b) und vergleiche das Resultat mit der Heisenbergschen Ungleichung im Impuls und Ort.

Aufgabe 40 Orthogonalitätsrelation. Wir betrachten eindimensionale Eigenzustände u_p des Impulses.

Beweise die Orthogonalitätsrelation

$$\langle u_p | u'_p \rangle = \delta_{pp'}$$

für $p \neq p'$ mit Hilfe der Wellenfunktionen.

Aufgabe 41 Spin 1/2. Ein Quanton mit Spin 1/2 befinde sich in einem Eigenzustand m_z der z-Komponente seines Drehimpulses.

Berechne die Mittelwerte $\langle J_x \rangle$, $\langle J_y \rangle$ und die spektralen Breiten ΔJ_x , ΔJ_y .

5 Die Schrödinger-Wellengleichung

Inhalt: Dieses Kapitel ist dem Raum- *und* Zeitverhalten nicht-relativistischer Quantonen mit Spin Null gewidmet. Die *Schrödinger-Wellengleichung*, welche das Verhalten dieser Quantonen bestimmt, ist eine partielle Differentialgleichung (erster Ordnung in der Zeit) für die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$.

Wir gewinnen die Schrödinger-Gleichung des *freien Quantons* aus der bekannten Wellenfunktion eines Impuls-Energie-Eigenzustandes. Als erstes konkretes Problem behandeln wir das Quanton im (eindimensionalen) unendlich tiefen Kastenpotential. Die Wellenfunktionen der stationären Zustände enthalten u. a. die Eigenschaft der Spiegelsymmetrie des Problems, welche uns auf den Begriff der *Parität* führt. Schließlich konstruieren wir die allgemeinste Wellenfunktion des freien Quantons.

Die Schrödinger-Gleichung mit (zeitunabhängigem) *Potential* entwickeln wir aus der Differentialgleichung der Wellenfunktion für das Problem der (eindimensionalen) Potentialstufe. Wir leiten die Kontinuitätsgleichung für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit her sowie die Stetigkeitsbedingungen bei Potentialsprüngen. Eine Reihe von Anwendungen bilden den Kern des Kapitels und veranschaulichen fundamentale Quanteneffekte: die Streuung an der (eindimensionalen) Potentialstufe, der Tunneleffekt, der (eindimensionale) harmonische Oszillator, der doppelte Potentialtopf sowie das Wasserstoffatom. Die Quanteneffekte sind u. a. der Schlüssel zum Verständnis der uns umgebenden Materie.

Im Kap. 4 hatten wir einerseits die Wellenfunktion (im Ortsraum)

$$\psi_w(\mathbf{r}) = \langle u_\mathbf{r} | w \rangle \tag{5.1}$$

für feste Zeit t betrachtet und andererseits die allgemeine Zeitabhängigkeit der Quantenamplitude (4.65) gewonnen. Hier interessiert uns speziell die Zeitabhängigkeit der Ortsamplitude (Wellenfunktion). Sinngemäß definieren wir die entsprechende Ortsamplitude als *zeitabhängige Wellenfunktion*

$$\Psi(\mathbf{r},t) \equiv \langle u_{\mathbf{r}} | w(t) \rangle \quad , \tag{5.2}$$

wobei die Quantenamplitude in (5.2) durch den Ausdruck (4.65) mit $v = u_{\mathbf{r}}$ gegeben ist.

Wir suchen nun eine allgemeine Bewegungsdifferentialgleichung für die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$.

5.1 Die Schrödinger-Gleichung des freien Quantons

Ausgangspunkt ist die Wellenfunktion des Impulseigenzustandes (4.118) für die feste Zeit $t~({\rm z.B.}~t=0)$

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = B \, e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \quad , \tag{5.3}$$

wobei \mathbf{p} der Impuls des Quantons ist. Wegen

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \tag{5.4}$$

ist der Zustand auch Eigenzustand der Energie, und aus (4.65) folgt mit $v=u_{\mathbf{r}}$

$$\langle u_{\mathbf{r}}|u_E(t)\rangle = \langle u_{\mathbf{r}}|u_E(0)\rangle e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$
 (5.5)

Aus (5.5) erhalten wir mit (5.3) und (5.4) die zeitabhängige Wellenfunktion des Zustandes

$$\Psi(\mathbf{r},t) = B e^{\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \frac{p^2}{2m}t\right)} \quad . \tag{5.6}$$

Die Wellenfunktion (5.6) muss Lösung der gesuchten partiellen Differentialgleichung sein. Einerseits leiten wir die Funktion (5.6) partiell nach t ab:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \Psi \quad . \tag{5.7}$$

Andererseits lassen wir den Laplace-Operator auf ψ einwirken:

$$\Delta \Psi = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \Psi = -\frac{1}{\hbar^2} \left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) \Psi = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi \quad . \tag{5.8}$$

Die beiden Ausdrücke (5.7) und (5.8) unterscheiden sich lediglich durch eine Konstante. Aus (5.7), (5.8) folgt die partielle Differentialgleichung für $\Psi(\mathbf{r}, t)$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \,\Delta \Psi(\mathbf{r},t)$$
(5.9)

Dies ist die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung des freien Quantons. Wir postulieren, dass *jede* zeitabhängige Wellenfunktion eines nichtrelativistischen, freien Quantons mit Spin Null Lösung dieser Gleichung ist.

Die Schrödinger-Gleichung hat bemerkenswerte Eigenschaften, von denen die folgenden drei, im Sinne unseres Postulats, notwendig sind:

• Die Differentialgleichung ist *linear* und *homogen*. Damit ist jede Superposition von Lösungen wiederum eine Lösung der Gleichung. Diese Eigenschaft garantiert das Superpositionsprinzip der Quantenamplituden. (Man denke beispielsweise an die Superposition der Wellenfunktionen ψ_1 und ψ_2 im Zweiweg-Quanteninterferenzexperiment der Abb. 4.8.)

- Die Schrödinger-Gleichung enthält als einzige Eigenschaft des Quantons seine Masse m; Impuls p und Energie E kommen nicht mehr vor. Diese Eigenschaft muss man fordern, soll die Gleichung Lösungen eines beliebigen Quantonzustandes zulassen.
- Man kann allgemein zeigen, dass die Normierungsbedingung

$$\int \rho(\mathbf{r},t) \, d^3r = 1 \quad , \tag{5.10}$$

 $wobei^1$

$$\rho(\mathbf{r},t) \equiv |\Psi(\mathbf{r},t)|^2$$
(5.11)

die zeitabhängige Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ist, für alle Zeiten t erfüllt werden kann: Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Quantons im ganzen Raum muss eins sein – unabhängig von t.

Eine weitere zentrale Eigenschaft ist diese: Die Schrödinger-Gleichung ist eine partielle Differentialgleichung *erster Ordnung in der Zeit.* Dies bedeutet, dass durch Vorgabe der Wellenfunktion zur Zeit t = 0 ($\Psi(\mathbf{r}, 0)$) die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ für alle späteren Zeiten bestimmt ist. Diese Eigenschaft steht in krassem Gegensatz zu den *klassischen* Wellengleichungen (Schallwellen, elektromagnetische Wellen etc.), welche Differentialgleichungen zweiter Ordnung in der Zeit sind. (In diesem Fall muss die Wellenfunktion *und* ihre zeitliche Ableitung zur Zeit t = 0 vorgegeben sein.)

5.1.1 Das Quanton im unendlich tiefen Kastenpotential

Wir betrachten das folgende, einfache *klassische* Problem. Ein metallischer Massenpunkt m sei an einem Faden der Länge L aufgehängt und bewege sich in der Vertikalebene reibungsfrei zwischen zwei vertikalen, festen Metallplatten (Abstand $a; a \ll L$), an welchen der Massenpunkt vollkommem elastisch gestreut wird (Abb. 5.1(a)).

Wegen $L \gg a$ bewegt sich die Masse m praktisch horizontal zwischen den Platten hin und her (Gewicht und Fadenkraft heben sich auf). Wir haben es mit einem eindimensionalen Problem zu tun. Da die Masse m an den Platten elastisch streut, ist ihre Energie zwischen den Platten konstant und die Bewegung gleichförmig. (Wir vernachlässigen die rücktreibende Kraft, die beim Pendel endlicher Länge durch die Krümmung der Bahn hervorgerufen wird.) Die elastischen Streuungen an den Wänden lassen sich durch unendlich große rücktreibende Kräfte F(x) an den Orten x = 0 bzw. x = a (idealisiert) darstellen, und diese sind beschreibbar durch die potentielle Energie U(x) des Teilchens (oft auch Potential genannt), entsprechend der Relation [KP-1-2.4]

$$F(x) = -\frac{dU(x)}{dx} \quad . \tag{5.12}$$

¹ Die Relation (5.11) gilt allgemein – nicht nur für *freie* Quantonen.



Abb. 5.1. Kräftefreier, elastisch streuender Massenpunkt m (a) und zugehörige potentielle Energie U(x) (b).

Die rücktreibende Kraft, beispielsweise an der Stelle x = a, ist nach Abb. 5.1(b) ($\Delta U = \text{konst.}$)

$$F(a) = -\lim_{\Delta x \to 0} \left(\frac{\Delta U}{\Delta x}\right) = -\infty \quad , \tag{5.13}$$

und entsprechend ist $F(0) = +\infty$. Wir können also das Problem charakterisieren durch das Potential U(x) (Abb. 5.1(b)):

$$U(x) = 0$$
 für $0 < x < a$; $U(x) = +\infty$ für $x < 0$ bzw. $x > a$.
(5.14)

Wir sprechen vom "unendlich tiefen Kastenpotential".

Wir wollen nun genau dieses Problem quantenphysikalisch lösen, d.h. wir suchen stationäre Lösungen der Schrödinger-Gleichung (5.9) für ein Quanton der Masse m im Bereich $0 \le x \le a$, für verschiedene (feste) Energiewerte E.

Ein stationärer Zustand der Energie E hat nach (5.2), (4.7) und (4.41) eine Wellenfunktion der Form

$$\Psi_E(x,t) = \langle u_x | u_E(t) \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \langle u_x | u_E \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi_E(x) \quad . \tag{5.15}$$

Wir setzen (5.15) in der Schrödinger-Gleichung (5.9) ein und erhalten die Differentialgleichung für $\psi_E(x)$

$$E\psi_E(x) + \frac{\hbar^2}{2m}\psi''_E(x) = 0$$
(5.16)

 oder

$$\psi_E''(x) + k_E^2 \psi_E(x) = 0 \quad , \tag{5.17}$$

wobei

$$k_E \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (>0) \quad . \tag{5.18}$$

Die Differentialgleichung (5.17) hat zwei linear unabhängige, komplexe Lösungen für den festen Wert E:

$$\psi_1(x) = e^{ik_E x}$$
; $\psi_2(x) = e^{-ik_E x}$. (5.19)

(Verifiziere mittels Ansatz $e^{\alpha x}$!) Die allgemeinste Lösung der homogenen, linearen Differentialgleichung (5.17) ist also von der Form

$$\psi_E(x) = A_1 e^{ik_E x} + A_2 e^{-ik_E x} \quad , \tag{5.20}$$

wobei A_1 , A_2 komplexe Konstanten sind. Die beiden Lösungen (5.19) sind nach (4.85) auch Wellenfunktionen von Eigenzuständen des Impulses, denn aus (5.18) folgt²

$$p_E = \pm \hbar k_E \quad . \tag{5.21}$$

Nun ziehen wir die Randbedingungen heran. Im verbotenen Gebiet x < 0 bzw. x > a muss die Aufenthaltswahrscheinlichkeit verschwinden. Dies bedeutet nach (5.11) und (5.15)

$$|\psi_E(x)|^2 = 0$$
 für $x < 0$; $x > a$ (5.22)

Wir zeigen später (im Abschn. 5.2.2), dass die Wellenfunktion $\psi_E(x)$ für alle x stetig sein muss. Daraus folgt aus (5.22)

$$\psi_E(0) = 0 \quad ; \quad \psi_E(a) = 0 \quad .$$
 (5.23)

Die erste Gleichung (5.23) bedeutet mit (5.20)

$$A_1 + A_2 = 0 \quad . \tag{5.24}$$

Aus (5.24) folgt mit (5.20)

$$\psi_E(x) = A_1(e^{ik_E x} - e^{-ik_E x}) = 2iA_1\sin(k_E x) \quad . \tag{5.25}$$

Und wegen (5.25) folgt aus der zweiten Gleichung (5.23)

$$k_E = n \frac{\pi}{a}$$
; $n = 1, 2, 3, \dots$ (5.26)

² Diese Aussage stimmt exakt nur dann, wenn die Wellenfunktionen (5.20) im ganzen Raum $(-\infty < x < +\infty)$ definiert sind. In unserem Fall ist aber $\psi_E(x)$ außerhalb des Kastens identisch null.

(Wir müssen n = 0 ausschließen, da die entsprechende Wellenfunktion $\psi_E(x) \equiv 0$ nicht normierbar ist.) Die Diskretisierung von k_E (5.26) bedeutet aber mit (5.21), dass die *Energie*

$$E_n = \frac{p_E^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$
 (5.27)

quantisiert ist!

Die Wellenfunktion des stationären Zustandes der Energie E_n hat nach (5.25) und (5.26) die Form

$$\psi_n(x) = C \sin\left(n\frac{\pi}{a}x\right)$$
 . (5.28)

Die Vollständigkeitsrelation (4.114) verlangt die Normierung der Wellenfunktion. Dies bedeutet mit (5.28)

$$\int_{0}^{a} |C|^{2} \sin^{2}\left(n\frac{\pi}{a}x\right) \, dx = 1 \quad . \tag{5.29}$$

Aus (5.29) folgt (verifiziere!)

$$\underline{\psi_n(x)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\frac{\pi}{a}x\right) \quad ; \quad 0 \le x \le a \tag{5.30}$$

(Wir können C reell wählen, da ein Phasenfaktor in der stationären Wellenfunktion keine Auswirkungen hat.)

Das Spektrum der Energiewerte (5.27) sowie die zugehörigen Wellenfunktionen (5.30) sind in der Abb. 5.2 dargestellt.

Eine Besonderheit des Quantons im unendlich tiefen Kastenpotential besteht darin, dass alle Energieeigenzustände gebundene Zustände sind. (Im Allgemeinen hat ein Quanton in einem endlichen Potential sowohl gebundene als auch freie Energieeigenzustände, so genannte Streuzustände, deren Energiespektrum kontinuierlich ist.)

Wir können unser früheres Resultat über die allgemeine Zeitabhängigkeit der Quantenamplitude (4.65) heranziehen und die Wellenfunktion des allgemeinsten Zustandes des Quantons im Kastenpotential festhalten. Aus (4.65) und (5.2) folgt mit $v = u_x$

$$\underline{\Psi}_{\omega}(x,t) \equiv \langle u_x | \omega(t) \rangle = \sum_{n} \langle u_x | u_{E_n} \rangle \langle u_{E_n} | \omega(0) \rangle e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \\
= \sum_{n=1}^{\infty} a_n \, \psi_n(x) \, e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} ,$$
(5.31)

wobei die Quantenamplituden $a_n \equiv \langle u_{E_n} | \omega(0) \rangle$ den Anfangszustand $\omega(0)$ mit der Wellenfunktion



Abb. 5.2. Energiespektrum und Wellenfunktionen des Quantons im Kastenpotential.

$$\Psi_{\omega}(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \,\psi_n(x) \tag{5.32}$$

festlegen; E_n und $\psi_n(x)$ sind gegeben durch (5.27), resp. (5.30). (Löse dazu Aufgabe 43!)

Das Quanton im Kastenpotential ist unser erstes, vollständig gelöstes quantenphysikalisches Problem. Daran können wir sehr schön frühere Regeln und Postulate illustrieren und verifizieren sowie neue Quantenphänomene in einfachster Form erläutern.

Doch zunächst eine Vorbemerkung: Die Funktionen (5.30) hatten wir schon früher angetroffen – in einem ganz anderen physikalischen Zusammenhang: bei den stehenden Wellen der beidseits eingespannten Saite [KP-1-7.1.1]! Die Wellenfunktionen beider Phänomene sind das Produkt derselben harmonischen Ortsfunktionen mit einer harmonischen Funktion in der Zeit; die Frequenz ω der klassischen Welle ebenso wie die Energie E des Quantons sind diskret. Wir sehen hier eine interessante Verwandtschaft zwischen der stehenden Welle des klassischen elastischen Kontinuums und der Wellenfunktion des stationären Zustandes des Quantons im Kastenpotential. Es gibt folgende Unterschiede: Die Wellenfunktion des klassischen Kontinuums ist reell, diejenige des Quantons komplex und normiert.

Die \hbar -Regel

Die charakteristische Länge des Problems ist die Ausdehnung a des Kastens (Abb. 5.1). Um die charakteristische Wirkung A zu erhalten, müssen wir a mit dem (charakteristischen) Impuls (5.27)

$$p_E = \frac{n\hbar\pi}{a} \tag{5.33}$$

multiplizieren, und damit ist

$$A = \pi \hbar n \quad . \tag{5.34}$$

Nach der \hbar -Regel (Abschn. 1.5) ist der klassische Grenzfall für $A \gg \hbar$, d. h. für

$$n \gg 1 \tag{5.35}$$

realisiert. Wir wollen diese Aussage anhand unserer Lösungen im Detail überprüfen.

Nach (5.11) ist, mit (5.15) und (5.30), die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ρ_n eines stationären Zustandes der Quantenzahl n zeitunabhängig und gegeben durch

$$\rho_n(x) = \frac{2}{a} \sin^2\left(n\frac{\pi}{a}x\right) \quad . \tag{5.36}$$

Die Dichte $\rho_n(x)$ ist in Abb. 5.3 für $n \gg 1$ dargestellt.

Wir betrachten ein festes Intervall $\Delta x \ll a$ an beliebiger Stelle x im Kasten. Für jedes beliebig kleine (aber endliche) Intervall Δx ist für $n \gg a/(\Delta x)$ die örtlich gemittelte Dichte nach (5.36)

$$\overline{\rho_n} = \frac{1}{\Delta x} \int_x^{x + \Delta x} \rho_n(x) \, dx \simeq \frac{1}{a} \quad . \tag{5.37}$$

Der Wert (5.37) entspricht aber genau der zeitlich gemittelten Aufenthaltshäufigkeit (pro Längeneinheit) des Teilchens im *klassischen* Problem



Abb. 5.3. Wahrscheinlichkeitsdichte (und Mittelwert) des Quantons im Kastenpotential für $n \gg 1$.

(Abb. 5.1). Wir könnten auch sehr viele klassische Teilchen fester Energie betrachten mit beliebigen (unterschiedlichen) Anfangsbedingungen, die sich zwischen den Platten bewegen. Dann wäre die örtlich gemittelte Teilchendichte für jeden Zeitpunkt gleich dem Wert (5.37) (das Scharmittel ist gleich dem Zeitmittel)³.

Die Nullpunktsenergie

Jedes gebundene Quanton (oder quantenphysikalische System) hat einen Zustand kleinster Energie, den *Grundzustand*, der in der Regel nach genügend langer Zeit erreicht wird und die physikalischen Eigenschaften vieler Systeme (beispielsweise der Atome) bestimmt. Der Grundzustand hat eine quantenphysikalische Besonderheit: Seine Gesamtenergie E ist immer größer als die minimale potentielle Energie U, d. h. er besitzt immer kinetische Energie, die wir als "*Nullpunktsenergie*" bezeichnen. (Die Bezeichnung erinnert an ein klassisches System im thermischen Gleichgewicht bei T = 0 K, welches *keine* kinetische Energie hat [KP-2-14.3].) Im Beispiel des Quantons im Kastenpotential ist die Energie des Grundzustandes (5.27)

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad , \tag{5.38}$$

bei einer potentiellen Energie U = 0; die Differenz ist die kinetische Energie. Im klassischen Grenzfall ist der Zustand der kleinsten Gesamtenergie das ruhende Pendel (Abb. 5.1) mit kinetischer Energie Null.

Der Unterschied des klassischen und quantenphysikalischen Verhaltens kann allgemein auf die Heisenbergsche Ungleichung zurückgeführt werden. Der klassische Grundzustand ist charakterisiert durch feste Position des Teilchens und festen Impuls (p = 0). Ein solcher Zustand ist mit der Heisenbergschen Ungleichung im Impuls und Ort (4.111)

$$\Delta P \cdot \Delta X \ge \hbar/2 \tag{5.39}$$

unverträglich, denn fester Impuls und Ort bedeuten verschwindende spektrale Breiten ($\Delta P = \Delta X = 0$).

Wir zeigen nun, dass für den Grundzustand des Quantons im unendlich tiefen Kastenpotential die Ungleichung (5.39) erfüllt ist. Die Berechnung der spektralen Breite ΔX nehmen wir am besten im Schwerpunktsystem vor. Mit $x_S = x - a/2$ folgt aus (5.36)

$$\rho_1(x_S) = \frac{2}{a} \cos^2\left(\frac{\pi}{a}x_S\right) \quad . \tag{5.40}$$

Aus (5.40) folgt für den Mittelwert

³ Wir berühren hier einen Zusammenhang zwischen dem klassischen Grenzfall der Quantenmechanik und der klassischen statistischen Mechanik [KP-2-14.2; 14.3].

200 5 Die Schrödinger-Wellengleichung

$$\langle X \rangle = \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} x_S \,\rho_1(x_S) \, dx_S = 0 \quad .$$
 (5.41)

Das Quadrat der spektralen Breite ΔX ist mit (5.41) (verifiziere!)

$$(\Delta X)^2 = \langle (x_S - \langle X \rangle)^2 \rangle = \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} x_S^2 \rho_1(x_S) \, dx_S$$
$$= \frac{2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} x_S^2 \cos^2\left(\frac{\pi}{a}x_S\right) \, dx_S = \frac{\pi^2 - 6}{12\pi^2} \, a^2 \quad , \qquad (5.42)$$

und damit ist die spektrale Breite selbst

$$\Delta X = \sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{12}} \frac{a}{\pi} \simeq 0.57 \frac{a}{\pi} \quad . \tag{5.43}$$

Die spektrale Impulsbreite ΔP bestimmem wir approximativ. Die Wellenfunktion (5.30) lässt sich schreiben als (verifiziere!)

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ -\frac{i}{\sqrt{a}} e^{ik_1x} + \frac{i}{\sqrt{a}} e^{-ik_1x} \right\} \quad ; \quad k_1 = \frac{\pi}{a} \quad . \tag{5.44}$$

Jede der beiden Funktionen in der Klammer von (5.44) ist die normierte Wellenfunktion eines Impulseigenzustandes (vgl. *Fußnote 2*) mit Eigenwert

$$p_{1,2} = \pm p_1 = \pm \hbar k_1 \quad . \tag{5.45}$$

Der durch die (normierte) Wellenfunktion (5.44) repräsentierte stationäre Zustand hat also die Impulswerte p_1 und p_2 , die je mit der Wahrscheinlichkeit 1/2 auftreten. Da das Impulsspektrum symmetrisch ist bezüglich p = 0, verschwindet der Erwartungswert von P und wir haben mit (5.45)

$$\Delta P = \sqrt{\langle (p - \langle P \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle p^2 \rangle} = \hbar \frac{\pi}{a} \quad . \tag{5.46}$$

Aus (5.43) und (5.46) folgt schließlich

$$\Delta P \cdot \Delta X \simeq 0.57 \,\hbar > \hbar/2 \quad . \tag{5.47}$$

Damit ist die Aussage (5.39) für unser Beispiel bestätigt.

Die Nullpunktsenergie ist ein *physikalisch beobachtbarer Effekt*. Er wurde erstmals durch R.S. Mulliken in den Energiespektren zweiatomiger Moleküle nachgewiesen⁴.

⁴ *R.S. Mulliken*, Nature **114** (1924) 350.

5.1.2 Die Parität

Das einfache Problem des Quantons im unendlich tiefen Kastenpotential führt uns zu einer wichtigen Charakterisierung vieler gebundener, stationärer Zustände der Quantenphysik.

Wir schreiben die Wellenfunktionen der stationären Zustände des Quantons im Kastenpotential als Funktion der Schwerpunktskoordinate $x_S = x - a/2$. Aus (5.15) und (5.30) erhalten wir für Quantenzahlen

n ungerade :
$$\Psi_n(x_S, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} (-1)^{\frac{n+3}{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(n\frac{\pi}{a}x_S\right)$$
 ;
n gerade : $\Psi_n(x_S, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} (-1)^{\frac{n}{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\frac{\pi}{a}x_S\right)$. (5.48)

Aus (5.48) geht hervor, dass die Wellenfunktionen die Eigenschaft haben

$$\Psi_n(-x_S,t) = (-1)^{n+1} \Psi_n(x_S,t) \quad . \tag{5.49}$$

Es sind gerade Funktionen in x_S für n ungerade und *ungerade* Funktionen für n gerade (siehe auch Abb. 5.2). Aus (5.49) folgt für die entsprechenden Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten (5.11), die hier zeitunabhängig sind, die einfache Relation

$$\rho_n(-x_S) = \rho_n(x_S) \quad . \tag{5.50}$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist eine gerade Funktion in x_S . Die Eigenschaft (5.50) bringt offensichtlich die Spiegel- oder Inversionssymmetrie des Problems zum Ausdruck. Das Kastenpotential (Abb. 5.1(b)) ist symmetrisch bezüglich einer Spiegelung am Schwerpunkt (x = a/2):

$$U(-x_S) = U(x_S) \quad . \tag{5.51}$$

Diese Symmetrie manifestiert sich in den Wellenfunktionen durch die Eigenschaft (5.49): Die Wellenfunktionen sind entweder gerade oder ungerade Funktionen im Ort; im ersten Fall sagen wir, der Zustand des Quantons hat gerade Parität, im zweiten Fall sprechen wir von ungerader Parität.

Wir sind hier auf eine sehr allgemeine Symmetrieeigenschaft von Wellenfunktionen gebundener, stationärer Zustände gestoßen, die immer dann zum Zuge kommt, wenn das Problem inversionssymmetrisch ist. Die Paritätseigenschaft gilt auch für (inversionssymmetrische) Probleme im dreidimensionalen Ortsraum. In den Gleichungen (5.49), (5.50) und (5.51) müssen wir für diesen Fall einfach x_S ersetzen durch die räumliche Schwerpunktskoordinate \mathbf{r}_S ; der Index *n* charakterisiert dann allgemein die gebundenen, stationären Zustände. Die Wellenfunktionen der stationären Zustände inversionssymmetrischer Probleme bilden also eine Art "Zweiklassengesellschaft"; es gibt solche mit gerader und solche mit ungerader Parität.

Formal können wir die Situation mit Hilfe des **Paritätsoperators** Pbeschreiben. Der Paritätsoperator wirkt auf eine Ortsfunktion $F(\mathbf{r})$ und ist definiert durch die Relation 202 5 Die Schrödinger-Wellengleichung

$$\boldsymbol{P} F(\mathbf{r}) \equiv F(-\mathbf{r}) \quad . \tag{5.52}$$

Die gebundenen, stationären Zustände sind *"Eigenzustände der Parität"*; für ihre Wellenfunktionen gilt

$$\boldsymbol{P} \boldsymbol{\Psi}_n(\mathbf{r}, t) = \boldsymbol{\Psi}_n(-\mathbf{r}, t) = \alpha \boldsymbol{\Psi}_n(\mathbf{r}, t) \quad , \tag{5.53}$$

wobei α die Werte $\alpha_{1,2} = \pm 1$ annimmt. Im Fall $\alpha_1 = +1$ sprechen wir von einem Zustand *positiver* (gerader) Parität und für $\alpha_2 = -1$ hat der Zustand *negative* (ungerade) Parität⁵.

5.1.3 Die allgemeinste Bewegung des freien Quantons

Ausgangspunkt dieses Abschnitts war die Wellenfunktion (5.6) eines Impuls-Energie-Eigenzustandes des freien Quantons, die wir schreiben als

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t) = B \, e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \frac{p^2}{2m}t)} \quad . \tag{5.54}$$

Da die Schrödinger-Gleichung (5.9) linear und homogen ist, ist die Superposition der Wellenfunktionen von Impulseigenzuständen mit beliebigem Eigenwert **p** wiederum Lösung der Gleichung. Ferner ist die partielle Differentialgleichung (5.9) erster Ordnung in der Zeit, sodass die Lösung für alle Zeiten durch die Wellenfunktion z.Zt. t = 0,

$$\Psi_{\omega}(\mathbf{r}, t=0) = \psi_{\omega}(\mathbf{r}) \quad , \tag{5.55}$$

vollständig bestimmt ist. Die allgemeinste Wellenfunktion im Ortsraum ist nach (4.123) und (4.124) als inverse Fourier-Transformierte einer Wellenfunktion im Impulsraum $\hat{\psi}_{\omega}(\mathbf{p})$ darstellbar:

$$\psi_{\omega}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \iiint \hat{\psi}_{\omega}(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} d^3p \quad .$$
 (5.56)

Die Wellenfunktion $\hat{\psi}_{\omega}(\mathbf{p})$ beschreibt ein beliebiges Impulsspektrum mittels der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\sigma_{\omega}(\mathbf{p}) = |\hat{\psi}_{\omega}(\mathbf{p})|^2 \quad . \tag{5.57}$$

Wir kombinieren die Zeitabhängigkeit in (5.54) mit der Ortsabhängigkeit (5.56) über die Relation (5.55) und erhalten die Wellenfunktion eines freien Quantons im beliebigen Zustand $\omega(t)$

$$\underline{\Psi_{\omega}(\mathbf{r},t) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \iiint \hat{\psi}_{\omega}(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \frac{p^2}{2m}t\right)} d^3 p \quad , \qquad (5.58)$$

⁵ Wir hatten mit (5.48) angenommen, dass der ortsabhängige Teil der Wellenfunktion reell ist. Für reelle Potentiale $U(\mathbf{r})$ kann man die Ortsfunktion immer reell wählen (vgl. Aufgabe 46).

wobei $\hat{\psi}_{\omega}(\mathbf{p})$ über die Beziehung (5.57) das Impulsspektrum im Anfangszustand $\omega(0)$ beschreibt. Die Integration in (5.58) erstreckt sich über den ganzen Impulsraum.

Speziell für eindimensionale Probleme ist die Wellenfunktion eines Quantons im beliebigen Zustand $\omega(t)$

$$\Psi_{\omega}(x,t) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int \hat{\psi}_{\omega}(p) \, e^{\frac{i}{\hbar} \left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)} dp \quad , \tag{5.59}$$

wobei $\hat{\psi}_{\omega}(p)$ wiederum mittels der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\sigma_{\omega}(p) = |\hat{\psi}_{\omega}(p)|^2 \tag{5.60}$$

das Impulsspektrum des Anfangszustandes $\omega(0)$ darstellt.

Beispiel: Das zerfließende Wellenpaket

Ein Quanton sei zur Zeit t = 0 in einem Zustand, dessen örtliche Wellenfunktion durch die Gauss-Verteilung

$$\Psi(x,0) = B \, e^{-\frac{x^2}{\lambda^2}} \tag{5.61}$$

gegeben ist (λ ist reell und positiv). Diese Angabe genügt, um die Eigenschaften des Quantons *für alle Zeiten t* zu bestimmen. Wir fragen: Wie "bewegt sich" das Quanton als Funktion der Zeit? Wir fragen also nach der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x,t)$ (5.11). Dazu brauchen wir die zeitabhängige Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ (5.59), die durch die Wellenfunktion im Impulsraum $\hat{\psi}(p)$ gegeben ist.

In der Aufgabe 39(b) hatten wir den Anfangszustand (t = 0) eingehend untersucht und u. a. Folgendes gefunden:

$$\hat{\psi}(p) = (2\pi)^{-1/4} \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{1/2} e^{-(\frac{\lambda}{2\hbar})^2 p^2} \quad .$$
 (5.62)

Die Wellenfunktion im Impulsraum ist also ebenfalls eine Gauss-Verteilung. Durch Einsetzen von (5.62) in (5.59) und Integration im Impulsraum erhalten wir die zeitabhängige Wellenfunktion $\Psi(x,t)$. Das Betragsquadrat davon liefert schließlich die zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x,t)$.

Wir geben hier das interessante Resultat (ohne Beweis). Man findet

$$\rho(x,t) = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{2}{\pi(1+t^2/\tau^2)}} e^{-\frac{2x^2}{\lambda^2(1+t^2/\tau^2)}} , \qquad (5.63)$$

wobei die charakteristische Zeit τ definiert ist als

$$\tau \equiv \frac{m\lambda^2}{2\hbar} \quad . \tag{5.64}$$



Abb. 5.4. Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des zerfließenden Wellenpakets für verschiedene Zeiten t.

Die zeitabhängige Aufenthaltswahrscheinlichkeit (5.63) ist in Abb. 5.4 für verschiedene Zeiten dargestellt.

Die Bewegung des freien Quantons können wir als ein "Zerfließen" bezeichnen, wobei die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im ganzen Raum zeitlich konstant bleibt (siehe Aufgabe 44 und 45). Das Zerfließen des Quantons steht im krassen Gegensatz zum Verhalten des klassischen Teilchens!

5.2 Die Schrödinger-Gleichung mit Potential

Wir wollen die Schrödinger-Gleichung (5.9), die die Wellenfunktion des freien Teilchens bestimmt, auf die Bewegung des Quantons im *äußeren, zeitunabhängigen Kraftfeld* erweitern. Wir betrachten allgemein ein Kraftfeld $\mathbf{F}(\mathbf{r})$, welches durch ein *Potentialfeld* darstellbar ist, entsprechend der Relation [KP-1-2.4]

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\operatorname{\mathbf{grad}} U(\mathbf{r}) = -\left(\frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial x}, \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial y}, \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial z}\right) \quad . \tag{5.65}$$

Hier ist $U(\mathbf{r})$ die potentielle Energie eines (klassischen) Teilchens⁶ an der Stelle \mathbf{r} .

⁶ Dieser Kraftbegriff entstammt der klassischen Mechanik. Es gibt auch in der Quantenphysik allgemeinere (nicht äußere) Kräfte, welche beispielsweise die Streuung zweier Quantonen aneinander bestimmen. Auf solche Situationen gehen wir im Kap. 8 ein.



Abb. 5.5. (a) Quanton Q (Ladung +e) im Innern zweier, unter Spannung stehender Metallrohre. (b) Potentielle Energie U(x) des Quantons.

Anhand eines einfachen **Beispiels** wollen wir versuchen, eine Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung (5.9) für Quantonen in Potentialen zu finden.

Ein positiv geladenes Quanton Q der Elementarladung e (beispielsweise ein Positron – das Antiteilchen des Elektrons) befinde sich in einem Metallrohr, das am Ort $x \approx 0$ unterbrochen ist (siehe Abb. 5.5).

Zwischen den beiden Rohrteilen, die je durch ein feines Metallgitter abgeschlossen sind, ist eine zeitlich konstante Spannung V_0 angebracht (Abb. 5.5(a)). Das Quanton bewege sich in positiver bzw. negativer x-Richtung. Wir suchen die Wellenfunktion des Quantons Q, in der Umgebung des unterbrochenen Rohres, für einen stationären Zustand der Energie E ($E > eV_0$).

Da der Rohrdurchmesser viel größer ist als der Abstand d der Metallgitter, können wir das Problem *eindimensional* behandeln (die gesuchte Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ hängt von *einer* Ortsvariablen ab). Der stationäre Zustand der Energie E hat die Wellenfunktion (5.15)

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(x) \quad . \tag{5.66}$$

Das Innere beider Rohre (Bereiche I, II) ist je ein Faraday-Käfig [KP-2-9.6] mit verschwindendem elektrischen Feld. Deshalb sind beide Bereiche für das Quanton kräftefrei; sie haben nach (5.65) je konstantes Potential. Im Gebiet zwischen den beiden Metallgittern herrscht ein homogenes **E**-Feld (Abb. 5.5(a)), sodass die potentielle Energie des Teilchens zwischen den Bereichen I und II linear ansteigt. Wir normieren das Potential im Bereich I zu null und erhalten damit den in Abb. 5.5(b) dargestellten Verlauf U(x), wobei das Potential im Bereich II den Wert $U = eV_0$ annimmt.
Im (kräftefreien) Bereich I gilt die Schrödinger-Gleichung (5.9). Einsetzen von (5.66) in (5.9) ergibt die Differentialgleichung

$$E\psi_{\rm I}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_{\rm I}''(x)$$
 (5.67)

für den örtlichen Teil der Wellenfunktion.

Im (kräftefreien) Bereich II gilt ebenfalls die Schrödinger-Gleichung (5.9); die Energie des Quantons ist aber um die potentielle Energie U_0 kleiner als im Bereich I:

$$E' = E - eV_0 = E - U_0 \quad . \tag{5.68}$$

Einsetzen von (5.66) in (5.9) ergibt hier die Differentialgleichung

$$E'\psi_{\rm II}(x) = (E - U_0)\psi_{\rm II}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_{\rm II}''(x) \quad . \tag{5.69}$$

Wir schließen zunächst das Gebiet $-d/2 \le x \le d/2$ aus. Dann können wir die Gleichungen (5.67) und (5.69) in *eine* Differentialgleichung zusammenfassen:

$$(E - U(x))\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) \quad , \tag{5.70}$$

wobei $\psi(x) \equiv \psi_{\rm I}(x)$ im Bereich I und $\psi(x) \equiv \psi_{\rm II}(x)$ im Bereich II. Nun treffen wir die Annahme, dass die Differentialgleichung (5.70) für ein beliebiges Potential U(x) gelten soll (– insbesondere auch für das Potential U(x) der Abb. 5.5(b)).

Als Nächstes stellen wir die Frage: Wie müssen wir die Schrödinger-Gleichung (5.9) (in eindimensionaler Form) abändern, damit die örtliche Wellenfunktion $\psi(x)$ eines stationären Zustandes der Energie E der Differentialgleichung (5.70) genügt? Die Antwort lautet:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x,t) \quad , \tag{5.71}$$

wie man sich durch Einsetzen von (5.66) leicht überzeugt. Wir machen die zusätzliche Annahme, dass die entsprechende partielle Differentialgleichung auch im dreidimensionalen Raum gelten soll und erhalten das Resultat:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r},t) + U(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r},t)$$
(5.72)

Damit haben wir die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung mit Potential gefunden.

Es stellt sich heraus, dass diese "Bewegungsgleichung" für die Quantenphysik von vergleichbarer Bedeutung ist wie die Newtonsche Gleichung für die klassische Mechanik. Die Physik des 20. Jahrhunderts ist von der Schrödinger-Gleichung und ihren Anwendungen stark geprägt worden⁷. Genauso wenig wie man die Newtonsche Gleichung allgemein "beweisen" kann, können wir dies für die Schrödinger-Gleichung tun. Der überwältigende *Erfolg* zwingt uns in beiden Fällen, die allgemeine Gültigkeit der Bewegungsgleichungen zu akzeptieren.

Im Gegensatz zur Newtonschen Gleichung kommt in der Schrödinger-Gleichung die Kraft nicht direkt vor; sie wird repräsentiert durch das Potentialfeld $U(\mathbf{r})$.

Bevor wir uns den eigentlichen Anwendungen der Schrödinger-Gleichung zuwenden können, brauchen wir noch zwei theoretische Elemente, nämlich die *Kontinuitätsgleichung* (Abschn. 5.2.1) sowie die *Stetigkeitsbedingungen* an Potentialstufen (Abschn. 5.2.2).

5.2.1 Die Kontinuitätsgleichung

Ausgangspunkt ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (5.11)

$$\rho(\mathbf{r},t) = |\Psi(\mathbf{r},t)|^2 = \overline{\Psi(\mathbf{r},t)}\Psi(\mathbf{r},t) \quad . \tag{5.73}$$

Wir bilden die zeitliche Änderung der Größe (5.73)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \left(\frac{\partial \overline{\Psi}}{\partial t}\right) \Psi + \overline{\Psi} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right) \tag{5.74}$$

und setzen auf der rechten Seite die Schrödinger-Gleichung (5.72) bzw. das Konjugiert-Komplexe der Schrödinger-Gleichung ein:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{1}{-i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \,\Delta \overline{\Psi} + U\overline{\psi} \right) \Psi + \frac{1}{i\hbar} \overline{\Psi} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U\Psi \right) \quad . \tag{5.75}$$

Die Terme mit U in (5.75) heben sich auf und wir erhalten

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\hbar}{2mi} \left[(\Delta \overline{\Psi}) \Psi - \overline{\Psi} (\Delta \Psi) \right] \quad . \tag{5.76}$$

Nun definieren wir die Vektorgröße

$$\mathbf{j} \equiv \frac{\hbar}{2mi} \left[\overline{\Psi} (\mathbf{grad}\Psi) - (\mathbf{grad}\overline{\Psi})\Psi \right] \quad , \tag{5.77}$$

und bilden davon die Divergenz. Nach einer längeren, aber einfachen Rechnung finden wir (verifiziere!)

⁷ Zur historischen Entwicklung verweisen wir auf die Referenzen unter Fußnote 1-3. Vergleiche auch Anhang E.

208 5 Die Schrödinger-Wellengleichung

$$div \mathbf{j} = -\frac{\hbar}{2mi} \left[(\Delta \overline{\Psi}) \Psi - \overline{\Psi} (\Delta \Psi) \right] \quad . \tag{5.78}$$

Der Vergleich von (5.78) und (5.76) ergibt schließlich das Resultat

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r},t) + div\,\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = 0 \tag{5.79}$$

Die Relation (5.79) ist die **Kontinuitätsgleichung**. Wir hatten genau diese Gleichung bereits in der klassischen Elektrodynamik angetroffen [KP-2-10.1]. Dabei war $\rho(\mathbf{r}, t)$ die elektrische Ladungsdichte und $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ (genauer $\mathbf{i}(\mathbf{r}, t)$) die elektrische Stromdichte. Die Kontinuitätsgleichung in der Elektrodynamik drückt die Erhaltung der elektrischen Ladung aus: In einem beliebigen Volumen ist die Abnahme der Ladung innerhalb des Volumens gleich der durch die Oberfläche ausströmenden Ladung.

In der Quantenmechanik gilt die Erhaltung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit:

In einem beliebigen Volumen ist die Abnahme der Aufenthaltswahrscheinlichkeit innerhalb des Volumens gleich der durch die Oberfläche "ausströmenden Aufenthaltswahrscheinlichkeit".

Da $\rho(\mathbf{r}, t)$ in (5.79) die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ist, müssen wir $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ (5.77) als Aufenthaltswahrscheinlichkeitsstromdichte – kurz Wahrscheinlichkeitsstromdichte interpretieren, und die Kontinuitätsgleichung (5.79) beschreibt die Erhaltung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

Die Analogie zwischen der klassischen Elektrodynamik und der Quantenmechanik ist in Tabelle 5.1 zusammengefasst.

Für stationäre Zustände (siehe z.B. (5.15)) ist sowohl die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\mathbf{r}, t)$ (5.11) als auch die Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ (5.77) zeitunabhängig. Damit folgt aus (5.79)

$$div \mathbf{j}(\mathbf{r}) \equiv 0 \quad . \tag{5.80}$$

Ist die ortsabhängige Wellenfunktion reell, dann folgt aus (5.77)

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) \equiv 0 \quad . \tag{5.81}$$

 Tabelle 5.1. Kontinuitätsgleichung in klassischer Elektrodynamik und Quantenmechanik.

	Elektrodynamik	Quantenmechanik
$\rho({f r},t)$	Ladungsdichte	$\label{eq:automatical} Aufenthalts wahrscheinlichkeits dichte$
$\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$	Stromdichte	Wahrscheinlichkeitsstromdichte
Erhaltungsgröße	elektrische Ladung	${\it Aufenthaltswahrscheinlichkeit}$

5.2.2 Stetigkeitsbedingungen

In den nachfolgenden (örtlich eindimensionalen) Anwendungsbeispielen werden wir Bereiche haben, für welche die Potentialfunktion U(x) stetig ist. Dort, wo angrenzende Bereiche zusammentreffen, treten Unstetigkeiten in U(x) auf, z. B. *Potentialsprünge*. An solchen Stellen müssen wir das Verhalten der Wellenfunktion $\Psi(x)$ kennen.

Potentialsprünge bedeuten immer eine Vereinfachung der physikalischen Wirklichkeit. Dies gilt insbesondere für das Kastenpotential (Abschn. 5.1.1) und ebenso für die Potentialstufe, die wir beispielsweise mit der Anordnung der Abb. 5.5 und $d \rightarrow 0$ realisieren können; der Grenzfall $d \rightarrow 0$ bedeutet ein unendlich großes **E**-Feld an der Sprungstelle!

Wir betrachten einen stationären Zustand der Energie E. Die zugehörige Wellenfunktion hat die Form (5.15) und die Differentialgleichung für den ortsabhängigen Teil $\psi(x)$ lautet (Einsetzen von (5.15) in die Schrödinger-Gleichung (5.71))

$$\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - U(x) \right) \,\psi(x) \quad . \tag{5.82}$$

Nun wollen wir zeigen, dass sowohl $\psi(x)$ als auch $\psi'(x)$ stetig sein müssen, falls das Potential höchstens endliche Unstetigkeitssprünge aufweist.

Wir studieren einen endlichen Potentialsprung an der Stelle x = a, welche die Stetigkeitsbereiche I und II der Potentialfunktion U(x) begrenzt (siehe Abb. 5.6).

Hätte nun $\psi'(x)$ an der Stelle x = a einen Unstetigkeitssprung (wie er für U(x) vorliegt), dann hätte $\psi(x)$ an der Stelle x = a einen Knick – wäre aber stetig und $\psi''(x)$ hätte bei x = a eine Unendlichkeitsstelle. Dies ist aber nach (5.82), für einen endlichen Potentialsprung bei x = a, nicht möglich! Daraus folgt die 1. Stetigkeits- oder Anschlussbedingung:

$$\psi'_{\rm I}(x)|_{x=a} = \psi'_{\rm II}(x)|_{x=a}$$
 . (5.83)

Hätte $\psi(x)$ an der Stelle x = a einen (endlichen) Unstetigkeitssprung, dann wäre sowohl $\psi'(x)$ als auch $\psi''(x)$ bei x = a unendlich; Letzteres ist



Abb. 5.6. Endlicher Potentialsprung.

aber nach (5.82) wiederum ausgeschlossen. Somit gilt die 2. Stetigkeits- oder Anschlussbedingung:

$$\psi_{\rm I}(x=a) = \psi_{\rm II}(x=a)$$
 . (5.84)

Ist der Unstetigkeitssprung im Potential an der Stelle x = a unendlich, dann bricht die Beweisführung, die zu den Resultaten (5.83) und (5.84) führte, zusammen. Wir werden im Abschn. 5.2.3 zeigen, dass für diesen Fall die Stetigkeitsbedingung (5.84) für die örtliche Wellenfunktion $\psi(x)$ nach wie vor gilt, dass aber die Ableitung $\psi'(x)$ im Allgemeinen unstetig ist. Ein Beispiel dafür ist das unendlich tiefe Kastenpotential (Abschn. 5.1.1).

5.2.3 Streuung an der Potentialstufe

Wir betrachten etwa die Streuung von Positronen der Energie E an der Potentialstufe der Abb. 5.5, wobei wir den Potentialverlauf idealisiert als unendlich steile Stufe ansehen $(d \rightarrow 0)$. Wir müssen grundsätzlich unterscheiden, ob die Energie E des Quantons größer oder kleiner ist als die Potentialstufe U_0 .

1. Fall: $E > U_0$

Diese Situation ist in der Abb. 5.7 dargestellt.

Klassisch ist das Problem sehr einfach. Ein von links einfallendes Teilchen der kinetischen Energie $E = p^2/2m$ (Bereich I) erfährt an der Potentialstufe eine abbremsende Kraft; aus der Energieerhaltung folgt, dass im (kräftefreien) Bereich II seine kinetische Energie $(E - U_0)$ ist. Das einfallende Teilchen wird die Potentialstufe überwinden.

Quantenphysikalisch müssen wir zunächst die Randbedingungen des Streuproblems festlegen. Bei $x \to -\infty$ (links) sei eine Quelle von monochromatischen Quantonen der Energie E; rechts sei weder eine Quelle noch eine reflektierende Wand. Die Quellstärke sei charakterisiert durch die Wahrscheinlichkeitsstromdichte j_0 . (Die Größe j_0 hat nach der eindimensionalen Form der Definition (5.77) die Dimension [Länge]⁻¹×[Zeit]⁻¹.)

Wir suchen in der Umgebung der Potentialstufe die *stationäre Lösung* der Schrödinger-Gleichung (5.71), welche zur Energie E gehört. Durch Einsetzen



Abb. 5.7. Endlicher Potentialsprung.

der Wellenfunktion (5.15) in die Schrödinger-Gleichung erhalten wir wieder die Differentialgleichung (5.82) für den ortsabhängigen Teil $\psi(x)$ der Wellenfunktion. Die allgemeinste Lösung im Bereich I ist identisch mit (5.20), Abschn. 5.1.1. Wir schreiben sie in der Form

$$\psi_{\rm I}(x) = A \left(e^{ikx} + R e^{-ikx} \right) \quad ; \quad k \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (>0) \quad .$$
 (5.85)

Da auch der Bereich II kräftefrei ist, hat die allgemeinste Lösung dort ebenfalls die Struktur der Lösung (5.85). Die Randbedingungen sind aber verschieden: das Medium ist bei x = 0 "harmonisch angeregt", und nach rechts ist es offen. Wir werden anschließend zeigen, dass der zweite Term in (5.85) einem nach links fließenden Wahrscheinlichkeitsstrom entspricht. Weil rechts keine Quelle ist und keine Reflektion stattfindet, fehlt der entsprechende Term im Bereich II, sodass dort der ortsabhängige Teil der Wellenfunktion geschrieben werden kann als

$$\psi_{\text{II}}(x) = A T e^{iqx} \quad ; \quad q \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)} \quad (>0) \quad .$$
 (5.86)

Die Wellenzahl q in (5.86) entspricht der kinetischen Energie $T = E - U_0$.

Wir wenden nun an der Stelle x = 0 die Stetigkeitsbedingungen (5.84) und (5.83) an. Aus (5.84) folgt

$$1 + R = T \tag{5.87}$$

und aus (5.83)

$$k(1-R) = qT$$
 . (5.88)

Die Relationen (5.87) und (5.88) sind Bestimmungsgleichungen für die Konstanten R und T. Man findet (verifiziere!)

$$R = \frac{k-q}{k+q}$$
; $T = \frac{2k}{k+q}$. (5.89)

Beide Amplitudenfaktoren sind also *reell*. Damit haben wir die stationären Lösungen der Schrödinger-Gleichung (bis auf den unwesentlichen Amplitudenfaktor A) gefunden.

Um die physikalische Bedeutung der einzelnen Terme klar zu erkennen, berechnen wir die Wahrscheinlichkeitsstromdichten (5.77). Für stationäre Zustände ist \mathbf{j} zeitunabhängig. Im räumlich eindimensionalen (stationären) Fall erhalten wir aus (5.77) allgemein

$$j(x) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\overline{\psi}(x) \,\psi'(x) - \overline{\psi}'(x) \,\psi(x) \right] \quad . \tag{5.90}$$

Wir berechnen die Wahrscheinlichkeitsstromdichte im Bereich I. Aus (5.90) folgt mit (5.85)

$$j_{\rm I}(x) = \frac{\hbar}{2mi} |A|^2 \left[\left(e^{-ikx} + R e^{ikx} \right) (ik) \left(e^{ikx} - R e^{-ikx} \right) + \\ + (ik) \left(e^{-ikx} - R e^{ikx} \right) \left(e^{ikx} + R e^{-ikx} \right) \right] \\ = \frac{\hbar}{2mi} |A|^2 (ik) 2 \left(1 - R^2 \right) = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} \left(1 - R^2 \right) \quad .$$
(5.91)

Für den Bereich II erhalten wir aus (5.86) (verifiziere!)

$$j_{\rm II} = |A|^2 \frac{\hbar q}{m} T^2$$
 . (5.92)

Beide Ausdrücke (5.91) und (5.92) sind unabhängig von x, wie wir nach der allgemeinen Relation (5.80) erwarten.

Es ist nützlich auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x, t)$ auszurechnen. Für stationäre Zustände ist ρ zeitunabhängig und gegeben durch

$$\rho(x) = \overline{\psi}(x) \,\psi(x) \quad . \tag{5.93}$$

Wir finden aus (5.85) und (5.86) einerseits

$$\rho_{\rm I}(x) = |A|^2 \left(e^{-ikx} + R e^{ikx} \right) \left(e^{ikx} + R e^{-ikx} \right)$$

= $|A|^2 \left[1 + R e^{-i2kx} + R e^{i2kx} + R^2 \right]$
= $|A|^2 \left[1 + R^2 + 2R \cos(2kx) \right]$ (5.94)

und andererseits

$$\rho_{\rm II} = |A|^2 T^2 \quad . \tag{5.95}$$

Für $x \ge 0$ ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eine Konstante, und es folgt aus (5.94) (wegen (5.87))

$$\rho_{\rm I}(0) = \rho_{\rm II} \quad .$$
(5.96)

Es ist interessant am Potentialsprung bei x = 0 die Wahrscheinlichkeitsstromdichten genauer zu untersuchen. Da $\rho(x)$ zeitlich konstant ist, folgt aus der Wahrscheinlichkeitserhaltung

$$j_{\rm I} = j_{\rm II}$$
 , (5.97)

wobei $j_{\rm I}, j_{\rm II}$ die Wahrscheinlichkeitsstromdichten links bzw. rechts der Potentialstufe sind; siehe Abb. 5.8. (Die Wahrscheinlichkeitserhaltung bezüglich eines infinitesimalen Volumenelements bei x = 0 liefert das Resultat (5.97).)

Die Gleichheit der Ströme (5.97) folgt auch direkt aus den berechneten Stromdichten (5.91) und (5.92): Multiplikation der Gleichungen (5.87) und (5.88) ergibt

$$k(1 - R^2) = q T^2 \quad , \tag{5.98}$$



Abb. 5.8. Wahrscheinlichkeitsstromdichten an der Potentialstufe.

und damit folgt in der Tat die Gleichheit der Stromdichten (5.97).

Wir können nun die beiden Terme

$$\psi_0(x) = A e^{ikx} ; \quad \psi_R = A R e^{-ikx}$$
 (5.99)

der Wellenfunktion $\psi_{I}(x)$ (5.85) interpretieren. Die den beiden Termen entsprechenden Wahrscheinlichkeitsstromdichten sind (verifiziere!)

$$j_0 = |A|^2 \frac{\hbar k}{m}$$
; $j_R = -|A|^2 \frac{\hbar k}{m} R^2$ (< 0). (5.100)

Aus (5.100) folgt mit (5.91) (siehe Abb. 5.8)

$$j_{\rm I} = j_0 - |j_R| \quad . \tag{5.101}$$

Damit ergibt sich folgende Interpretation. Der Anteil ψ_0 der Wellenfunktion ψ_I beschreibt den Teilchenstrom der Quelle bei $x = -\infty$. Die entsprechende Wahrscheinlichkeitsstromdichte j_0 ist positiv; ψ_0 ist die Wellenfunktion eines Eigenzustandes des Impulses mit $p = +\hbar k$.

Der Anteil ψ_R dagegen beschreibt die Reflexion der Quantonen an der Potentialstufe. Die entsprechende Wahrscheinlichkeitsstromdichte j_R ist negativ; ψ_R ist die Wellenfunktion eines Impulseigenzustandes mit $p = -\hbar k$. Die Reflexion der Quantonen an der Potentialstufe ist ein rein quantenphysikalischer Effekt; klassisch gibt es für $E > U_0$ keine Reflexion von Teilchen!

Schließlich beschreibt die (positive) Wahrscheinlichkeitsstromdichte $j_{\text{II}} \equiv j_T$ den transmittierten Teilchenstrom im Bereich II. Die Wellenfunktion $\psi_{\text{II}}(x)$ (5.86) entspricht einem Impulseigenzustand mit $p = +\hbar q$.

Die Verwandtschaft zwischen der Streuung von Quantonen an der Potentialstufe und dem klassischen Wellenproblem der Reflexion an einer Mediengrenze [siehe KP-1-7.2.4] ist unverkennbar.

Wir betrachten den Grenzfall $E \gg U_0$. Wegen (5.85) und (5.86) strebt dann $q \to k$, und damit folgt aus (5.87) und (5.88) $R \to 0$. Wir können vermuten, dass wir mit $E \gg U_0$ (keine Reflexion) im klassischen Grenzfall sind.

Was sagt die \hbar -Regel (Abschn. 1.5) dazu? Hier müssen wir festhalten, dass unsere Idealisierung $d \to 0$ (Abb. 5.7) sehr grob ist; sie lässt sich physikalisch nie exakt realisieren. Es zeigt sich (sowohl theoretisch wie experimentell), dass die Bedingung für die Realisierung des klassischen Grenzfalls für den festen Potentialsprung U_0 entscheidend von d abhängt. In der charakteristischen Wirkung A muss deshalb d vorkommen. Wir haben

$$A \approx p \, d = \hbar \, k \, d = \hbar \, \frac{2\pi d}{\lambda} \quad , \tag{5.102}$$

wobe
i λ die De-Broglie-Wellenlänge der einlaufenden Quant
onen ist. Der klassische Grenzfall ist also nur realisiert für

$$\lambda \ll d \quad . \tag{5.103}$$

In gewissen Fällen wird die Bedingung (5.103) eher erfüllt sein als $E \gg U_0$.

In diesem Beispiel haben wir das Normierungsproblem der "ebenen Wellen" (Abschn. 4.2.1) dadurch umgangen, dass wir einerseits die Normierungskonstante (A) offen gelassen haben und andererseits nur normierungsunabhängige Größen und Relationen betrachtet haben.

2. Fall: $0 < E < U_0$

Klassisch ist in diesem Fall der Bereich II verboten: das Teilchen wird an der Potentialstufe elastisch gestreut (siehe Abb. 5.9).

Im Bereich I hat die Lösung *quantenphysikalisch* nach wie vor die Struktur (5.85).

Im Bereich II ist die Differentialgleichung nach (5.82)

$$\psi_{\rm II}''(x) - \kappa^2 \,\psi_{\rm II}(x) = 0 \quad ,$$
 (5.104)

wobei

$$\kappa \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \quad (>0) \quad .$$
(5.105)

Die allgemeinste Lösung von (5.104) hat die Form



Abb. 5.9. Streuung an der Potentialstufe von Quantonen der Energie $E < U_0$.

5.2 Die Schrödinger-Gleichung mit Potential 215

$$\psi_{\rm II}(x) = a \, e^{-\kappa x} + b \, e^{\kappa x} \quad .$$
 (5.106)

Der zweite Term in (5.106) würde Anlass geben zu einer unendlich großen Wahrscheinlichkeitsdichte für $x \to +\infty$. Die Randbedingung verlangt aber eine *endliche* Wahrscheinlichkeitsdichte, sodass wir b = 0 setzen müssen. Wir schreiben den ortsabhängigen Teil der Wellenfunktion im Bereich II als

$$\psi_{\rm II}(x) = A T e^{-\kappa x}$$
 . (5.107)

Die Stetigkeitsbedingung (5.84) fordert mit (5.85) und (5.107) wiederum

$$1 + R = T$$
 , (5.108)

und die zweite Stetigkeitsbedingung (5.83) ergibt

$$ik(1-R) = -\kappa T$$
 . (5.109)

Die Gleichungen (5.108) und (5.109) lösen wir nach R und T auf und erhalten

$$R = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \quad ; \quad T = \frac{2k}{k + i\kappa} \quad . \tag{5.110}$$

Damit ist die stationäre Lösung festgelegt. (Die Amplituden R, T sind hier komplex.)

Wir erhalten die Wahrscheinlichkeitsstromdichten (verifiziere!)

$$j_{\rm II} = 0 \quad ; \quad j_0 = -j_R \quad .$$
 (5.111)

Dieses Resultat bedeutet *Totalreflexion* an der Potentialstufe – wie im klassischen Problem.

Andererseits ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Bereich II gegeben durch

$$\rho_{\mathrm{II}}(x) = |A|^2 \frac{4k^2}{k^2 + \kappa^2} e^{-2\kappa x} = |A|^2 \frac{4}{1 + \left(\frac{U_0}{E} - 1\right)} e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}x} \quad (x \ge 0).$$
(5.112)

In (5.112) haben wir (5.107), (5.110) und (5.105) verwendet. Aus (5.112) geht hervor, dass das Quanton in das *klassisch verbotene Gebiet eindringt!*

Im Grenzfall $U_0 \gg E$ folgt aus (5.112), dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im klassisch verbotenen Gebiet gegen null geht, d. h. die Wahrscheinlichkeitsdichte ist viel kleiner als die Dichte $\rho_0 = |A|^2$ des von links einlaufenden Teilchenstrahls.

Im Zusammenhang mit den Stetigkeitsbdingungen bei unendlich großen Potentialsprüngen (Abschn. 5.2.2) ist es interessant, den Grenzfall $U_0 \to \infty$ zu diskutieren. Aus (5.110) erhalten wir (verifiziere!)

$$R = -1 \quad ; \quad T = 0 \quad . \tag{5.113}$$

Aus T = 0 folgt mit (5.107), dass $\psi(x)$ im Bereich II identisch verschwindet und natürlich auch seine Ableitungen. Aus R = -1 folgt mit (5.85), dass auch $\psi_I(0)$ verschwindet – nicht aber die Ableitung von $\psi_I(x)$ an der Stelle x = 0. Damit ist gezeigt, dass die Stetigkeitsbedingung (5.83) für die Ableitung der Wellenfunktion bei unendlich großen Potentialsprüngen nicht mehr gilt. Die einzige *Randbedingung* im Fall $U_0 \to \infty$ lautet somit:

$$\psi(0) = 0$$
 . (5.114)

5.2.4 Der Tunneleffekt

Anstelle der Potential*stufe* (Abschn. 5.2.3) betrachten wir nun eine Potential*schwelle* der endlichen Breite 2a (siehe Abb. 5.10).

Wiederum befinde sich weit weg links (im Bereich I) eine Quelle von Quantonen der Energie E, welche auf die Potentialschwelle der Höhe $U_0 > E$ (Bereich II) einfallen. Wir interessieren uns für eine stationäre Lösung der Schrödinger-Gleichung, wobei das Medium rechts (Bereich III) wiederum gegen rechts offen ist.

Aufgrund der Überlegungen von Abschn. 5.2.3 können wir die allgemeine Struktur der zeitunabhängigen Wellenfunktion für die drei Bereiche I, II, III direkt festhalten:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx} & ; \quad x < -a \\ C e^{-\kappa x} + D e^{\kappa x} & ; \quad -a < x < a \\ A S e^{ikx} & ; \quad x > a \\ \end{cases}$$
(5.115)

wobei

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$$
; $\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}$. (5.116)

Im Bereich III (x > a) fehlt (gegenüber Bereich I) die nach links laufende Welle, weil das Medium rechts offen ist. Die Konstanten B, C, D und Smüssen wir aus den Stetigkeitsbedingungen (5.84) und (5.83) bestimmen, die an den Stellen x = -a und x = a zu formulieren sind. Dies macht keine



Abb. 5.10. Streuung an der Potentialschwelle von Quantonen der Energie $E < U_0$.

grundsätzlichen Probleme. Die Durchführung der Rechnung ist etwas aufwendig⁸, weshalb wir sie hier nicht vorführen.

Die interessante Frage lautet: Ist der *Transmissionskoeffizient S* in (5.115) von null verschieden? Wäre dies der Fall, dann würde im Bereich III ein nach rechts orientierter Wahrscheinlichkeitsstrom fließen: das Quanton hätte eine endliche Wahrscheinlichkeit dafür, die klassisch unüberwindliche Potentialschwelle zu "durchdringen"!

Man findet tatsächlich einen von null verschiedenen Transmissionskoeffizienten S. In der Näherung hoher und breiter Potentialschwellen , d. h. für

$$\kappa a = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \gg 1 \tag{5.117}$$

ist das Verhältnis zwischen auslaufendem und einlaufendem Wahrscheinlichkeitsstrom

$$|S|^2 = \frac{j_{III}}{j_0} \simeq \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2} e^{-\frac{4a}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}} \quad . \tag{5.118}$$

Man nennt dieses rein quantenphysikalische Phänomen Tunneleffekt.

In allen Bereichen der Quantenphysik ist der Tunneleffekt von großer Bedeutung.

1. Beispiel: Das Elektron im Metall

Metalle bestehen aus dem Ionengitter und den Leitungselektronen, welche sich als ein quasifreies Elektronengas verhalten [siehe z.B. KP-2-9.4].

Wir betrachten ein einzelnes Leitungselektron des Metalls. Vom Photoeffekt (Abschn. 1.3) wissen wir, dass Energie erforderlich ist, um das Elektron aus dem Metall zu entfernen, die so genannte Austrittsarbeit P. Ein Elektron der Ladung -e im Abstand x von der (idealen) Metalloberfläche erfährt die Spiegelbildkraft [KP-2-9.6]

$$F(x) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{(2x)^2}$$
(5.119)

in Richtung der Metalloberfläche (siehe Abb. 5.11).

Die Austrittsarbeit P ist die gegen die Spiegelbildkraft aufzuwendende Arbeit bei der Entfernung der Ladung vom Metall.

Wir können die Existenz einer Austrittsarbeit vereinfachend darstellen als Potentialstufe an der Metalloberfläche in der Verteilung der potentiellen Energie U(x) des Elektrons (siehe Abb. 5.12(a)); E ist die kinetische Energie des Elektrons im Metall.

Nun stellen wir die Frage: Wie können wir das Elektron dazu bringen, das Metall *spontan* zu verlassen? Antwort: indem wir die Potential*stufe* in

⁸ Siehe z. B. F. Schwabl, Quantenmechanik, Springer-Verlag (1992) S. 61.



Abb. 5.11. Spiegelbildkraft des Elektrons an der Metalloberfläche.



Abb. 5.12. Potentialverteilung für das Leitungselektron, (a) ohne äußeres E-Feld; (c) mit äußerem E-Feld.

eine Potentialschwelle umwandeln und auf den Tunneleffekt setzen! Diese Umwandlung des Potentials kann man durch ein äußeres elektrisches Feld **E** erreichen, welches unmittelbar an der Metalloberfläche wirksam ist. Eine Realisierungsmöglichkeit – das Anlegen einer Spannung V_0 – ist in Abb. 5.12(b) dargestellt. Das äußere **E**-Feld bewirkt einen Abfall der potentiellen Energie

des Elektrons nach außen (Abb. 5.12(c)). Sobald das Potential den Wert E unterschreitet, kann der Tunneleffekt stattfinden. Der Tunnelstrom ist umso größer, je stärker das **E**-Feld ist.

Wir diskutieren zwei wichtige Anwendungen des Tunneleffekts mit Elektronen.

• Feldemissionsmikroskopie. Die quantenphysikalischen Rechnungen zeigen, dass sehr hohe elektrische Felder nötig sind, um messbare "Elektronenfeldemission" zu erzeugen. Genügend hohe **E**-Felder lassen sich an Spitzen von (negativ geladenen) Metallnadeln realisieren. Die aus der Oberflächenschicht der Metallspitzen emittierten Elektronen bewegen sich längs der Feldlinien radial nach außen. Auf einem Fluoreszenzschirm lassen sich die Intensitäten der emittierten Elektronen als Funktion des Ortes messen. Die Intensitätsverteilung ist ein stark vergrößertes Abbild der Oberflächenschicht der Metallnadel. An Spitzen und Kanten der Metallnadel ist die Feldemission besonders groß, weil dort das **E**-Feld am stärksten ist. Deshalb ist die Intensitätsverteilung auf dem Fluoreszenzschirm ein Abbild der lokalen Unebenheiten der Metalloberfläche. Mit dem *Elektronen-Feldemissionsmokroskop* können nahezu atomare Dimensionen der Struktur von Metalloberflächen aufgelöst werden.

Die Auflösung des Elektronen-Feldemissionsmikroskops kann auf folgende Art wesentlich verbessert werden. Das Vakuum im Außenraum der Metallnadel wird durch Heliumgas kleiner Dichte ersetzt und die Richtung des **E**-Feldes wird invertiert (die Metalloberfläche ist nun positiv geladen). Die Heliumatome des Gases erfahren eine Streuung an der Metallnadel. Dabei werden die Atome im starken elektrischen Feld ionisiert und die Heliumionen im **E**-Feld radial nach außen beschleunigt. In dieser Anordnung sind es die *Ionen*, welche auf dem Leuchtschirm ein Abbild der Oberfläche der Metallnadel erzeugen. Die Ionen bilden atomare Bereiche unterschiedlicher Ionisationswahrscheinlichkeit ab; die Anordnung heißt *Feldionenmikroskop*. Da die Masse der Heliumionen viel größer ist als die Masse der Elektronen, ist ihre De-Broglie-Wellenlänge entsprechend kleiner. Und weil nach der λ -Regel (Abschn. 2.2.2) die De-Broglie-Wellenlänge die räumliche Auflösung bestimmt, sind die Ionen den Elektronen überlegen. Mit dem Feldionenmikroskop wurden erstmals einzelne Atome einer Metalloberfläche "sichtbar" gemacht.

• Das Tunnel-Raster-Mikroskop. Der eigentliche Durchbruch in der Mikroskopie der Festkörperoberflächen wurde von Gerd Binnig und Heinrich Rohrer 1982 erzielt. Diese Forscher benutzen wiederum den Tunneleffekt und erreichen mit ihrem Tunnel-Raster-Mikroskop ("Scanning Tunneling Microscope") subatomare Genauigkeiten im direkten Abtasten von Festkörperoberflächen. Eine feine Metallnadel mit einem Krümmungsradius an der Spitze von ca. 1 nm (1nm = 10^{-9} m) wird unter (konstante) negative Spannung bezüglich der zu untersuchenden Festkörperoberfläche gebracht. Es fließt ein Strom als Folge des Tunneleffekts, der mit zunehmendem Abstand zur Oberfläche sehr stark abnimmt. Eine piezoelektri-



Abb. 5.13. Xenonatome auf einer einkristallinen Nickeloberfläche. Der Abstand benachbarter Xe-Atome im Schriftzug "IBM" beträgt ca. 13 Å $(1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m})$. [Nach Donald M. Eigler und Erhard K. Schweizer, IBM Almaden Research Center.]

sche Steuerung erlaubt es, die Position der Metallspitze in drei zueinander senkrechten Richtungen mit einer Genauigkeit von 0.01 nm gezielt zu verändern. Zur Vermessung einer Oberfläche wird an jedem Ort der Oberfläche der Abstand Metallspitze-Oberfläche konstant gehalten. Dies geschieht mit Hilfe einer Rückkopplung, die durch den Tunnelstrom gesteuert wird. Die effektive Bewegung der Spitze in Richtung senkrecht zur Oberfläche – in Funktion der Oberflächenposition – bestimmt dann die Oberflächenstruktur der Probe.

Die Abb. 5.13 zeigt das Tunnel-Raster-Mikroskop-Bild der einkristallinen Nickeloberfläche, auf welcher einzelne Xenonatome mit Hilfe eines speziellen Tunnel-Raster-Mikroskops zum Schriftzug "IBM" zusammengesetzt wurden.

Die Erfindung des Tunnel-Raster-Mikroskops markiert den Beginn der neuen, vielversprechenden Forschungsrichtung **Nanotechnologie**. Aus Atomen und Molekülen werden *neue Strukturen* geschaffen, beispielsweise "*Nanoteilchen"*, die kleiner sind als 100 nm $(1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m})$ und veränderte physikalische Eigenschaften aufweisen. Das Anwendungspotential der Nanotechnologie in Technik und Wissenschaft wird als sehr hoch eingestuft.

2. Beispiel: Der α -Zerfall

Der α -Zerfall ist eine spontan ablaufende Umwandlung eines Atomkerns, bei welcher ein α -Teilchen (der Atomkern ⁴₂He des Heliumatoms) emittiert wird. Ein Beispiel ist der α -Zerfall des Americiumisotops

$$^{241}_{95}\text{Am} \rightarrow ^{237}_{93}\text{Np} + ^{4}_{2}\text{He}$$
 . (5.120)

Dabei wandelt sich der $^{241}\mathrm{Am}$ -Kern in das Neptuniumisotop $^{237}_{93}\mathrm{Np}$ um. Die mittlere Lebensdauer eines $^{241}\mathrm{Am}$ -Kerns beträgt 660 Jahre.

Demonstrationsexperiment: In einer Nebelkammer können wir die α -Teilchen einzelner ²⁴¹Am-Zerfälle direkt beobachten. Das Medium der Kammer ist Luft mit Methanol, welches als Flüssigkeit im oberen Teil der Kammer verdampft wird. Vertikal von oben nach unten herrscht ein Temperaturabfall. Darin sinkt der Methanoldampf ab und entwickelt eine Schicht, welche an Dampf übersättigt ist. Im Zentrum dieser Schicht wird eine radioaktive Quelle von ²⁴¹Am plaziert. Die von der Quelle emittierten α -Teilchen ionisieren die Atome im übersättigten Dampf und werden dabei abgebremst. Die Ionen wirken als Kondensationskerne, welche eine Perlenkette von Flüssigkeitstropfen erzeugen, die wir als Projektil der α -Teilchen wahrnehmen. Die Teilchenspuren sind gradlinig und gehen alle vom Ort der Quelle aus.

Werden die α -Teilchen in horizontaler Richtung emittiert, können wir die ganze Länge ihrer Teilchenspur verfolgen. (Die α -Teilchen mit vertikaler Geschwindigkeitskomponente erzeugen eine kürzere Spur, weil sie die übersättigte Schicht verlassen, bevor sie ihre kinetische Energie vollständig verloren haben.) Aus der Länge der Teilchenspur kann man im Prinzip die kinetische Energie der α -Teilchen bestimmen. Für die α -Teilchen des ²⁴¹Am-Zerfalls findet man

$$E \simeq 5.5 \,\mathrm{MeV}$$
 . (5.121)

Wie können wir den Prozess des α -Zerfalls von ²⁴¹Am erklären?

Unter den leichten Atomkernen zeichnet sich der ⁴₂He-Kern dadurch aus, dass die vier Nukleonen (zwei Protonen und zwei Neutronen) durch die anziehenden Kernkräfte besonders stark gebunden sind. Wir können uns deshalb vorstellen, dass aus den 241 Nukleonen von $^{241}_{95}\mathrm{Am}$ (95 Protonen und 146 Neutronen) im Innern des schweren Kerns α -Teilchen teilweise vorgebildet sind. Ein solches α -Teilchen steht unter dem Einfluss der anziehenden (kurzreichweitigen) Kernkräfte der übrigen Nukleonen. Die Gesamtkraft wird im Zentrum des kugelsymmetrischen Kerns null sein und gegen den Kernrand hin stark zunehmen; außerhalb des Kerns verschwindet die kurzreichweitige Kraft. Ähnlich wie für den Fall des Elektrons im Metall (Abb. 5.12) können wir auch hier die Situation durch eine (mittlere) potentielle Energieverteilung $U_{\alpha}^{(\text{stark})}(r)$ des α -Teilchens darstellen, welche eine steile Potentialstufe am Kernrand R aufweist (siehe Abb. 5.14(a)). Das Potential ist für $r \to \infty$ auf null normiert. Die Potentialtiefe U_0 entspricht der Energie, die aufzuwenden ist, um das α -Teilchen (verschwindender kinetischer Energie) vom Kernzentrum gegen die anziehenden Kernkräfte abzulösen.

Das α -Teilchen erfährt aber zusätzlich die abstoßenden (langreichweitigen) Coulomb-Kräfte, die von den restlichen Protonen des ²⁴¹Am-Kerns herrühren. Zur Berechnung der entsprechenden potentiellen Energie $U_{\alpha}^{(\text{Coul.})}(r)$ (Abb. 5.14(b)) können wir den Kern in guter Näherung als homogen geladene Kugel der Gesamtladung Z - 2 = 93 betrachten (siehe Aufgabe 48).



Abb. 5.14. Schematische Darstellung der Potentiale des α -Teilchens im ²⁴¹Am-Kern; (a) als Folge der Kernkräfte; (b) als Folge der Coulomb-Kräfte; (c) Gesamtpotential $U_{\alpha}(r)$.

Die gesamte potentielle Energie des α -Teilchens ist dann gleich der Summe der beiden Anteile (Abb. 5.14(c)):

$$U_{\alpha}(r) = U_{\alpha}^{(\text{stark})}(r) + U_{\alpha}^{(\text{Coul.})}(r) \quad . \tag{5.122}$$

Wir wollen nun zeigen, dass es unmöglich ist, den
 $\alpha\mathchar`-Zerfall von \end{241} Am klassisch zu erklären.$

Das Argument basiert auf dem Wert der so genannten Coulomb-Barriere U_C (Abb. 5.14(c)). Die Coulomb-Barriere ist der Maximalwert des Potentials am Kernrand

$$U_C = U_\alpha(R) = U_\alpha^{(\text{Coul.})}(R) \simeq 24 \,\text{MeV} \quad . \tag{5.123}$$

Da $U_{\alpha}^{\text{stark}}$ am Kernrand verschwindet (Abb. 5.14(a)), ist U_C auch gleich dem Coulomb-Potential $U_{\alpha}^{(\text{Coul.})}$ am Kernrand und nummerisch gleich 24 MeV (Aufgabe 48).

Der Wert von U_C ist $grö\beta er$ als die gemessene kinetische Energie (5.121) der α -Teilchen (5.5 MeV). Eine klassische Erklärung des α -Zerfalls wäre aber nur dann möglich, wenn die kinetische Energie mindestens 24 MeV betragen würde, denn das α -Teilchen muss mindestens die Energie U_C haben, um den Potentialwall $U_{\alpha}(r)$ klassisch überschreiten zu können. Diese potentielle Energie würde dann sukzessive in kinetische Energie umgewandelt, um schließlich den Wert U_C anzunehmen. (Wir können uns modellmäßig vorstellen, dass das α -Teilchen den Potentialwall reibungsfrei heruntergleitet and dabei stetig kinetische Energie gewinnt.)

Die einzig mögliche Erklärung des α -Zerfalls ist der quantenphysikalische Tunneleffekt (Abb. 5.14(c))! Diese These wurde erstmals von George Gamov sowie Eduard V. Condon und Ronald W. Gurnay 1928 ausgesprochen und bedeutete damals eine der ersten quantenphysikalischen Anwendungen in der Kernphysik. Detaillierte Rechnungen bestätigen die These voll und ganz.

3. Beispiel: Die Energieerzeugung in den Sternen

Das Innere der Sterne enthält *Wasserstoff*, also Protonen, und befindet sich auf hoher Temperatur. Die Temperatur im Zentrum unserer Sonne beispielsweise beträgt $T = 1.5 \times 10^7$ K. Teilchen im thermischen Gleichgewicht bei dieser Temperatur besitzen eine mittlere kinetische Energie [KP-2-14.3]

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2} kT = 3.10 \times 10^{-16} \,\mathrm{J} = 0.19 \,\mathrm{MeV}$$
 (5.124)

Bei massenreicheren Sternen sind die Temperaturen noch höher.

Wie können aus Protonen thermischer Energie die von den Sternen emittierten großen Energiemengen entstehen? (Unsere Sonne beispielsweise strahlt die Energie von 3.8×10^{26} J/s aus!)

Ein vom energetischen Standpunkt aus interessanter Prozess wäre die Umwandlung von vier Protonen in einen ⁴₂He-Kern, weil dieser ein sehr stark gebundenes System ist. (Für ⁴₂He beträgt die Bindungsenergie pro Nukleon 7.0 MeV [KP-1-8.11, Fig. 8.32].) Dazu müsste man zwei der vier Protonen (p) in Neutronen (n) umwandeln. Dies ist möglich durch den β^+ -Zerfall der Atomkerne, entsprechend der bekannten Reaktion der schwachen Wechselwirkung

$$p \to n + e^+ + \nu_e \quad , \tag{5.125}$$

wobei ein Positron (e^+) und ein Neutrino (ν_e) emittiert werden. Da die Summe der Ruheenergien der Teilchen auf der rechten Seite von (5.125) größer ist als $m_p c^2$, kommt die Reaktion (5.125) nur in Kernen vor – nicht aber als Reaktion freier Teilchen. Der hypothetische Prozess wäre also

$$4^{1}_{1}\text{H} \rightarrow {}^{4}_{2}\text{He} + 2e^{+} + 2\nu_{e}$$
 (5.126)

Die Frage stellt sich: Wie bringen wir vier Protonen thermischer Energie dazu, sich in ein α -Teilchen zu verwandeln? Das Problem ist die Coulomb-



Abb. 5.15. Inverser Tunneleffekt eines Protons der Energie E an einem Atomkern.

Abstoßung zwischen den Protonen. Damit beispielsweise zwei zentral zusammenstoßende Protonen sich gegenseitig "berühren", müssten sie eine kinetische Energie von 0.7 MeV haben (Aufgabe 49) – mehr als (5.124).

Hier erinnern wir uns an den *Tunneleffekt*. Die erstmals von *Robert* d'E. Atkinson und Fritz G. Houtermans 1929 formulierte Idee bestand darin, den *inversen* Tunneleffekt heranzuziehen, um sukzessive Protonen in einem schwereren Kern einzufangen⁹ (siehe Abb. 5.15).

Im Kern bildet sich schliesslich ein α -Teilchen, das wiederum durch Tunneleffekt emittiert wird (nach dem bekannten Muster des α -Zerfalls).

Es dauerte dann weitere zehn Jahre, bis *Hans Bethe* (1939) eine vollständige Folge von Reaktionen für den Prozess (5.126), den so genannten **Kohlenstoffzyklus** (CNO-Zyklus), ausgearbeitet hatte:

$$\frac{{}^{1}_{\underline{1}}\underline{\mathrm{H}}}{{}^{1}_{7}\underline{\mathrm{H}}} + \frac{{}^{12}_{7}\underline{\mathrm{C}}}{{}^{13}_{7}N} \rightarrow \frac{{}^{13}_{6}\underline{\mathrm{C}}}{{}^{6}_{6}\underline{\mathrm{C}}} + \frac{{}^{e}\underline{\mathrm{e}}}{{}^{e}\underline{\mathrm{+}}} + \frac{{}^{\nu}\underline{\mathrm{e}}}{{}^{1}_{7}N} + \frac{{}^{13}_{6}\underline{\mathrm{C}}}{{}^{1}_{7}N} + \frac{{}^{14}_{7}}{{}^{11}_{7}N} \rightarrow \frac{{}^{15}_{8}\underline{\mathrm{O}}}{{}^{15}_{7}N} + \frac{{}^{e}\underline{\mathrm{e}}}{{}^{1}_{7}N} + \frac{{}^{e}\underline{\mathrm{e}}}{{}^{11}_{8}} + \frac{{}^{15}_{8}\underline{\mathrm{O}}}{{}^{15}_{7}N} + \frac{{}^{e}\underline{\mathrm{e}}}{{}^{1}_{8}\underline{\mathrm{He}}} + \frac{{}^{12}_{8}\underline{\mathrm{C}}}{{}^{11}_{7}N} \rightarrow \frac{{}^{16}_{6}\underline{\mathrm{C}}}{{}^{16}_{6}\underline{\mathrm{C}}} + \frac{{}^{4}_{8}\underline{\mathrm{He}}}{{}^{2}_{8}} \qquad (5.127)$$

Bei den ersten fünf Prozessen handelt es sich entweder um den inversen Tunneleffekt des Protons oder den β^+ -Zerfall. Der letzte Prozess ist der inverse Tunneleffekt des Protons gefolgt vom α -Zerfall (direkter Tunneleffekt). Jeder Prozess in (5.127) ist die Umwandlung des im vorangehenden Prozess entstandenen Atomkerns. Als Gesamtbilanz des CNO-Zyklus (5.127) erhalten wir

$$4^{1}_{1}\mathrm{H} + {}^{12}_{6}\mathrm{C} \rightarrow {}^{12}_{6}\mathrm{C} + {}^{4}_{2}\mathrm{He} + 2\,e^{+} + 2\,\nu_{e} + 3\,\gamma \quad , \qquad (5.128)$$

⁹ Die Autoren nannten ihren Artikel ursprünglich "How can one cook Helium in a potential pot?"; die Zeitschrift für Physik hat den Titel nachträglich abgeändert in "Zur Frage der Aufbaumöglichkeit der Elemente in den Sternen".

womit die Umwandlung (5.126) realisiert ist. Der Kohlenstoffkern spielt die Rolle eines Katalysators. Wir nennen das Phänomen **thermonukleare Fusion.**

Nun wollen wir die beim CNO-Zyklus erzeugte Energie E bestimmen, welche zum Aufheizen der Sterne zur Verfügung steht. Für jeden der Prozesse (5.127) ist die Zunahme an kinetischer Energie gleich der Differenz zwischen den Ruheenergien der Objekte im Anfangs- und Endzustand. Um die gesamte Zunahme T an kinetischer Energie des CNO-Zyklus zu erhalten, subtrahieren wir von der Summe der Ruheenergien der Objekte im Anfangszustand von (5.128) die Ruheenergien der Objekte des Endzustandes und erhalten (Neutrinos und γ -Quanten sind masselos):

$$T = 4 m_p c^2 - M_{He} c^2 + 2 m_e c^2 \quad , \tag{5.129}$$

wobei M_{He} die Masse des ⁴₂He-Kerns ist $(m_p, m_e \text{ sind die Proton- und Positronmasse})$. Die Ruheenergie (Mc^2) eines Systems ist gleich der Ruheenergie seiner Bestandteile minus die Bindungsenergie B [KP-1-8.11]. Somit können wir $M_{He}c^2$ in (5.129) durch die Bindungsenergie des α -Teilchens $B(^4_2\text{He}) = 28 \text{ MeV}$ ausdrücken und erhalten

$$T = 4 m_p c^2 - [2 m_p c^2 + 2 m_n c^2 - B(^4_2 \text{He})] - 2 m_e c^2$$

= $B(^4_2 \text{He}) - 2(m_n - m_p)c^2 - 2 m_e c^2$
= $28 \text{ MeV} - 2 \times 1.29 \text{ MeV} - 1.02 \text{ MeV} \simeq 24.4 \text{ MeV}$, (5.130)

wobei m_n die Masse des Neutrons ist.

Es gibt zwei subtile Korrekturen zum Wert (5.130), die sich in ihrer Auswirkung praktisch kompensieren. Erstens müssen wir berücksichtigen, dass die Neutrinos eine extrem kleine Wechselwirkung mit Materie haben und deshalb zur Aufwärmung der Sterne nicht beitragen. Dieser Effekt reduziert Tum ca. 6%. Zweitens ist zu beachten, dass jedes im CNO-Zyklus entstehende Positron – zusammen mit einem Elektron des Mediums – den Annihilationsprozess $e^+ + e^+ \rightarrow 2\gamma$ auslöst [KP-1-8.11]. Dieser Prozess bewirkt eine Zunahme an kinetischer Energie von $2 m_e c^2 = 1.022$ MeV. Da pro CNO-Zyklus zwei Positronen entstehen, ist die gesuchte Energie E um 2.04 MeV größer. Beide Korrekturen zusammen führen schließlich auf die pro Zyklus vom Stern aufgenommene Enegie E = 25 MeV.

Der CNO-Zyklus dominiert in Sternen, deren Masse größer ist als die der Sonne; in diesen Sternen sind auch die Temperaturen höher.

Nun wenden wir uns den thermonuklearen Reaktionen zu, die für die Energieerzeugung in unserer Sonne maßgebend sind; wir sprechen von der **Proton-Proton-Kette** (P-P-Kette).

Wir betrachten Proton-Proton-Stöße in der Sonne. Wegen des quantenphysikalischen Tunneleffekts kommen sich zwei Protonen gelegentlich so nahe, dass sie ein $(^{1}_{1}H, ^{1}_{1}H)$ -System bilden. Dieses System hat keinen gebundenen Zustand. Es kann aber passieren, dass eines der Protonen sehr schnell die Reaktion (5.125) ausführt und das entstehende Neutron sich mit dem zweiten Proton zu einem Deuteron $\binom{2}{1}H$ verbindet, sodass insgesamt die Reaktion

$$\frac{{}^{1}_{1}}{\underline{1}}\underline{H} + \underline{{}^{1}_{1}}\underline{H} \rightarrow {}^{2}_{1}\underline{H} + \underline{e^{+}} + \underline{\nu_{e}}$$
(5.131)

abläuft. Die Reaktion (5.131) ist energetisch möglich, denn das (schwach gebundene) Deuteron hat die Bindungsenergie $B(_1^2\text{H}) = 2.2 \text{ MeV}$, die größer ist als die Ruheenergie des Positrons ($m_e c^2 = 0.511 \text{ MeV}$).

Das Deuteron seinerseits stößt mit einem Proton zusammen und bildet – wiederum durch Tunneleffekt – das Isotop Helium-3 ($^{3}_{2}$ He),

$${}^{1}_{\underline{1}}\underline{\mathrm{H}} + {}^{2}_{\underline{1}}\underline{\mathrm{H}} \rightarrow {}^{3}_{\underline{2}}\underline{\mathrm{He}} + \underline{\gamma} \quad , \qquad (5.132)$$

wobei ein γ -Quant emittiert wird.

Schließlich werden zwei $^3_2\mathrm{He}\text{-}\mathrm{Kerne}$ gelegentlich zusammenstoßen und die Reaktion

$${}_{2}^{3}\text{He} + {}_{2}^{3}\text{He} \rightarrow {}_{\underline{2}}^{4}\text{He} + 2{}_{\underline{1}}^{1}\text{H}$$
(5.133)

auslösen. Aus (5.131), (5.132) und
(5.133) folgt also die Gesamtbilanz der P-P-Kette

$$6_{1}^{1}H \rightarrow {}_{2}^{4}He + 2_{1}^{1}H + 2e^{+} + 2\nu_{e} + 2\gamma \quad .$$
 (5.134)

Im Hinblick auf die total zu gewinnende kinetische Energie T ist (5.134) äquivalent zum Prozess (5.126) bzw. (5.128). Deshalb ist auch hier die kinetische Energie näherungsweise gegeben durch (5.130).

Der CNO-Zyklus und die hier behandelte Variante der P-P-Kette sind die wichtigsten, nicht aber die einzigen thermonuklearen Reaktionen in den Sternen.

Die Vorstellung, dass wir die lebensspendende Sonnenenergie – und damit auch unsere Existenz – dem quantenphysikalischen Tunneleffekt verdanken, ist faszinierend!

5.2.5 Der harmonische Oszillator

Das Standardbeispiel des *linearen* harmonischen Oszillators der *klassischen* Mechanik ist das Federpendel [KP-1-1.5] (Abb. 5.16).

Die Newtonsche Bewegungsgleichung

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -f x(t) \tag{5.135}$$

hat als allgemeinste Lösung die harmonische Funktion $x(t) = x_0 \cos(\omega_0 t + \delta)$, mit der Eigenfrequenz

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{f}{m}} \qquad (>0) \quad . \tag{5.136}$$

Die potentielle Energie des Massenpunkts



Abb. 5.16. Lineares harmonisches Pendel der Masse m. (a) Ruhelage; (b) allgemeine Bewegung (Federkonstante f).

$$U(x) = \frac{1}{2}fx^2 = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$$
(5.137)

vermittelt die Verbindung zum *quantenphysikalischen* harmonischen Oszillator. Die Schrödinger-Gleichung (5.71) nimmt mit (5.137) die Form an

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 \Psi(x,t) \quad , \tag{5.138}$$

wobei ω_0 die klassische Eigenfrequenz ist.

Wir suchen die *stationäre* Lösung der Energie *E*. Die ortsabhängige Wellenfunktion $\psi_E(x)$ genügt der Differentialgleichung (verifiziere!)

$$E\psi_E(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_E''(x) + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 \psi_E(x) \quad . \tag{5.139}$$

Es handelt sich hier um eine lineare Differentialgleichung mit *nicht konstanten* Koeffizienten (im Gegensatz etwa zur klassischen Bewegungsgleichung (5.135)).

Eine nützliche Strategie besteht darin, zuerst die Lösung im asymptotischen Bereich, d. h. für sehr große Werte von x zu suchen. Für die feste Energie E gibt es einen ausgezeichneten Ort x_0 , der als Grenze zum klassisch verbotenen Bereich definiert ist (Abb. 5.17). Der Ort x_0 entspricht der Amplitude der klassischen Lösung. (Modellmäßig können wir die klassische Bewegung als reibungsfreies Gleiten der Masse m auf der Potentialfläche auffassen.)

Im Bereich $x \gg x_0$ gilt (Abb. 5.17)

$$U(x) \gg U(x_0) = E$$
 . (5.140)

Der erste Term der Differentialgleichung (5.139) ist wegen (5.140) und (5.137) gegenüber dem letzten Term vernachlässigbar. Die Differentialgleichung ist also



Abb. 5.17. Potentielle Energie U(x) des harmonischen Oszillators.

$$\psi''(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\right)^2 x^2 \,\psi(x) \qquad (x \gg x_0) \quad , \tag{5.141}$$

wobei die Wellenfunktion $\psi(x)$ unabhängig von E ist. Im asymptotischen Bereich $x \gg a$ ist die allgemeine Lösung der Differentialgleichung (5.141)

$$\psi(x) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2}} + B e^{\frac{x^2}{2a^2}} \quad , \tag{5.142}$$

wobei

$$a^2 \equiv \frac{\hbar}{m\omega_0} \quad , \tag{5.143}$$

und A, B sind beliebige Konstanten (verifiziere!).

Der zweite Term in (5.142) würde eine Normierung der Wellenfunktion verhindern und muss deshalb verschwinden (B = 0).

Nun kehren wir zurück zur allgemeinen Differentialgleichung (5.139). Da *jede* Wellenfunktion $\psi_E(x)$ die asymptotische Form (5.142) hat (mit B = 0), ist der Produktansatz naheliegend

$$\psi_E(x) = f_E(x) e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$$
, (5.144)

wobei die Funktion $f_E(x)$ (abhängig von der Energie E) noch zu bestimmen ist.

Da unser Problem bezüglich x = 0 inversionssymmetrisch ist (es gilt U(-x) = U(x)), muss die Wellenfunktion entweder gerade oder ungerade sein (Abschn. 5.1.2). Dies bedeutet

$$\psi_E(-x) = \pm \psi_E(x) \tag{5.145}$$

oder, da der asymptotische Faktor in (5.144) gerade ist,

$$f_E(-x) = \pm f_E(x)$$
 . (5.146)

Es gibt eine ganze Klasse von einfachen Funktionen, welche die Eigenschaft (5.146) besitzen, nämlich die *Polynome* x^n , wobei *n* eine positive ganze Zahl ist. Die Differentialgleichung für $f_E(x)$, welche wir durch Einsetzen von (5.144) in (5.139) erhalten, ist linear. Deshalb ist jede Linearkombination von Lösungen ebenfalls eine Lösung. Mögliche Funktionen *positiver* Parität sind somit

$$f_E^{(+)}(x) = a_0 + a_2 x^2 + a_4 x^4 + \dots , \qquad (5.147)$$

wobei a_n Konstanten sind. Entsprechend haben Funktionen, die zu Zuständen negativer Parität gehören, die Form

$$f_E^{(-)}(x) = a_1 x + a_3 x^3 + a_5 x^5 + \dots (5.148)$$

Man kann mathematisch zeigen, dass die Polynome (5.147) und (5.148) aus *endlich* vielen Termen bestehen müssen, damit die entsprechenden Wellenfunktionen $\psi_E(x)$ normierbar sind¹⁰.

Die einfachste Wellenfunktion des harmonischen Oszillators wäre also nach (5.147) (n=0) und (5.144)

$$\psi_0(x) = a_0 \, e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \quad . \tag{5.149}$$

Ist die Gauss-Funktion (5.149) wirklich eine Lösung von (5.139)?

Für die nachfolgende Rechnung ist es nützlich, die Differentialgleichung (5.139) in a^2 (5.143) auszudrücken. Wir multiplizieren die Gleichung mit $2/(\hbar\omega_0)$ und erhalten

$$\frac{2E}{\hbar\omega_0}\psi_E(x) = -a^2\psi_E''(x) + \frac{x^2}{a^2}\psi_E(x) \quad . \tag{5.150}$$

Aus (5.149) folgt

$$\psi_0''(x) = \frac{a_0}{a^2} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \left(\frac{x^2}{a^2} - 1\right) \quad . \tag{5.151}$$

Nun setzen wir (5.151) in (5.150) ein und finden

$$\frac{2E}{\hbar\omega_0}\,\psi_0(x) = -\psi_0(x)\left(\frac{x^2}{a^2} - 1\right) + \frac{x^2}{a^2}\,\psi_0(x)$$

oder

$$\frac{2E}{\hbar\omega_0} = 1 \quad . \tag{5.152}$$

Aus (5.152) folgt

$$E = E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \quad . \tag{5.153}$$

Damit haben wir gezeigt, dass $\psi_0(x)$ die Wellenfunktion einer stationären Lösung des harmonischen Oszillators ist – und (5.153) ist der zugehörige Energieeigenwert!

Nach dem gleichen Schema können wir Polynomansätze für die Funktion $f_E(x)$ machen, die entsprechende Wellenfunktion in die Differentialgleichung

¹⁰ Siehe z. B. *L.I. Schiff*, Quantum Mechanics, McGraw-Hill (1955), p. 60 ff.

(5.150) einsetzen und verlangen, dass die resultierende Gleichung identisch in x erfüllt ist. Dies liefert im Allgemeinen mehrere Bedingungen, nämlich für jede auftretende Potenz von x eine Gleichung. Diese Gleichungen werden einerseits verwendet zur Bestimmung des entsprechenden Energieeigenwerts (wie in obigem Beispiel) und andererseits zur Festlegung der in der Wellenfunktion auftretenden Koeffizienten (a_n) (Aufgabe 50).

Die nach zunehmender Komplexität geordeneten Polynomansätze sind

$$\begin{aligned}
f_0^{(+)}(x) &= a_0 \\
f_1^{(-)}(x) &= a_1 x \\
f_2^{(+)}(x) &= a_0 + a_2 x^2 \\
f_3^{(-)}(x) &= a_1 x + a_3 x^3 \\
f_4^{(+)}(x) &= a_0 + a_2 x^2 + a_4 x^4 , etc.
\end{aligned}$$
(5.154)

Die Resultate dieses Programms sind in Tabelle 5.2 zusammengestellt, einschließlich der Normierungen der Wellenfunktionen. Wir bezeichnen die örtlichen Wellenfunktionen stationärer Zustände mit

$$\psi_E(x) = f_E(x)\,\psi(x) \equiv \psi_n(x) = f_n^{(\pm)}(x)\,e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$$
 (5.155)

Die unterstrichenen Teile der Wellenfunktionen (Tabelle 5.2) nennt man Hermitesche Polynome. Die Größe a beschreibt die Eindringtiefe in das klassisch verbotene Gebiet (siehe auch Abbildungen 5.18 und 5.19).

Für die **Energieeigenwerte** des harmonischen Oszillators entnimmt man der Tabelle 5.1 folgendes Gesetz:

$$E = \underline{E_n = E_0 + n \hbar \omega_0} \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad , \tag{5.156}$$

 Tabelle
 5.2.
 Wellenfunktionen und Energieeigenwerte der tiefst liegenden stationären Zustände des harmonischen Oszillators.

n	Parität	Energie	$\psi_n(x)$
0	+	$\frac{1}{2}\hbar\omega_0$	$\left(\frac{1}{a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$
1	-	$\frac{3}{2}\hbar\omega_0$	$\left(\frac{1}{2a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \underline{2\left(\frac{x}{a}\right)} e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$
2	+	$\frac{5}{2}\hbar\omega_0$	$\left(\frac{1}{8a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \left[2 - 4\left(\frac{x}{a}\right)^2\right] e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$
3	_	$\frac{7}{2}\hbar\omega_0$	$\left(\frac{1}{48a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \underbrace{\left[12\left(\frac{x}{a}\right) - 8\left(\frac{x}{a}\right)^3\right]}_{2a^2} e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$
4	+	$\frac{9}{2}\hbar\omega_0$	$\left(\frac{1}{384a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \left[12 - 48\left(\frac{x}{a}\right)^2 + 16\left(\frac{x}{a}\right)^4\right] e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$

wobei n die höchste Potenz des Hermiteschen Polynoms ist; n stellt also die Quantenzahl des harmonischen Oszillators dar. Der Wert E_0 ist die Nullpunktsenergie (Abschn. 5.1.1). Die Energieniveaus des harmonischen Oszillators sind *äquidistant*. Ebenfalls angegeben in der Tabelle 5.2 sind die Paritätswerte der Zustände.

Die Abb. 5.18 zeigt die Wellenfunktion $\psi_n(x)$ der stationären Zustände n = 0 (Grundzustand), n = 1 und n = 2.

Die Abb. 5.19 stellt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\rho_n(x) = |\psi_n(x)|^2$ des Quantons in den stationären Zuständen n = 1 (erster angeregter Zustand) und n = 10 dar, zusammen mit der gemittelten Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens im klassischen harmonischen Oszillator. Der klassische Grenzfall ist für $n \gg 1$ realisiert.



Abb. 5.18. Das Potential U(x) mit den Energieeigenwerten E_0 , E_1 und E_2 des harmonischen Oszillators zusammen mit den entsprechenden Wellenfunktionen $\psi_0(x)$, $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$. Die klassisch verbotenen Bereiche sind schraffiert.



Abb. 5.19. Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\rho_n(x)$ des Quantons im harmonischen Oszillator für die stationären Zustände (a) n = 1 und (b) n = 10. Die gemittelte Aufenthaltswahrscheinlichkeit des klassischen Teilchens ist schraffiert. [Nach Franz Schwabl, Quantenmechanik, Springer-Verlag (1992), Abb. 3.3.]

Dem harmonischen Oszillator begegnen wir in praktisch allen Gebieten der Physik. Wir erinnern an die (klassischen) *atomaren Oszillatoren*, d. h. die Schwingungen der Ladungen in den Atomen, welche für die Lichtemission verantwortlich sind. Dem atomaren Oszillator sind wir hier im Planckschen Strahlungsgesetz begegnet (Abschn. 1.2)¹¹. Dann gibt es die Oszillationen der Atome in den *Molekülen*; wir denken etwa an die Beiträge zu den spezifischen Wärmen der Gase. Entsprechende harmonische Oszillationen treten auch in den *Festkörpern* auf; Stichwort: Einstein-Modell des Festkörpers als

¹¹ Wir haben nun gezeigt, dass die Energien der (linearen) harmonischen Oszillatoren tatsächlich in Portionen $\varepsilon = \hbar \omega_0$ auftreten, wie im Quantenpostulat gefordert (*Planck* hatte Glück!).



Abb. 5.20. Schwingung im Potential U(x) mit lokalem Minimum bei x = 0.

Beispiel eines harmonischen Oszillators in drei Dimensionen. Gitterschwingungen spielen eine zentrale Rolle für das Phänomen des Mössbauer-Effekts (Abschn. 2.3.2), das wir aufgrund der quantenphysikalischen Eigenschaften des Oszillators verstehen können.

Warum kommt der harmonische Oszillator in den meisten Schwingungsproblemen der Physik vor? Dafür gibt es einen einfachen Grund. Alle Schwingungen können wir in guter Näherung als Bewegung eines Objekts in einem Potential beschreiben, das an einer Stelle (beispielsweise bei x = 0) ein lokales Minimum hat (Abb. 5.20).

Die allgemeine Taylor-Reihenentwicklung des Potentials an einer beliebigen Stelle x = 0 ist

$$U(x) = U_0 + x U'(0) + \frac{1}{2}x^2 U''(0) + \frac{1}{6}x^3 U'''(0) + \dots$$
 (5.157)

Da bei x = 0 ein Minimum ist, haben wir U'(0) = 0 und damit

$$U(x) \simeq U_0 + \frac{1}{2}x^2 U''(0) + O(x^3) \quad . \tag{5.158}$$

Für genügend kleine Schwingungsamplitude x_0 sind also praktisch *alle* Schwingungen harmonisch. Umgekehrt treten für Orte weit weg vom Minimum des Potentials *immer* Abweichungen vom harmonischen Verhalten auf – sogar beim Federpendel!

5.2.6 Der doppelte Potentialtopf

Wir betrachten als konkretes Beispiel mit Anwendungspotential das **Ammo**niakmolekül NH_3 (Abb. 5.21).

Im klassischen Modell des NH₃-Moleküls gibt es zwei mögliche Konfigurationen: Das Stickstoffatom ist entweder oberhalb oder unterhalb der Ebene der drei Wasserstoffatome (Abb. 5.21(a))¹². Im ersten Fall ist der Massenschwerpunkt S oberhalb der H-Ebene (das entsprechende elektrische Dipolmoment **p** des Moleküls zeigt nach unten) und im zweiten Fall unterhalb

 $^{^{12}}$ Diese Ausage wird quantenphysikalisch zu präzisieren sein!



Abb. 5.21. Ammoniakmolekül NH₃ (a); Potential des Stickstoffatoms N längs der Symmetrieachse (b).

(das Dipolmoment zeigt nach oben). Die N-H-Bindungen können wir vereinfacht durch Federkräfte beschreiben (das Dreieck der H-Atome denken wir als starr). Wir beschränken uns auf Bewegungen des N-Atoms längs der Symmetrieachse, welche beide Positionen des N-Atoms verbindet und senkrecht zur H-Ebene steht (Koordinate s). Hat das System kinetische Energie (z.B. thermische Energie), dann führt das N-Atom klassisch eine periodische Bewegung längs der Symmetrieachse aus, die wir als Bewegung mit der Gesamtenergie E im Potential U(s) der Abb. 5.21(b) darstellen können – entweder um die Position $s = a_0$ oder um $s = -a_0$. (Modellmäßig lässt sich die Bewegung als reibungsfreies Gleiten der Masse m des N-Atoms auf der Potentialfläche vorstellen.)

Die *quantenphysikalische* Behandlung des Ammoniakmoleküls basiert auf der potentiellen Energie des Stickstoffatoms (Abb. 5.21(b)). Um die wesentli-



Abb. 5.22. Approximatives Potential des Stickstoffatoms von Ammoniak.

chen Eigenschaften des NH₃-Moleküls in möglichst einfacher Form darzustellen, betrachten wir die Bewegung des N-Atoms im eindimensionalen Modell (Koordinate x längs der Symmetrieachse). Wir approximieren den Potentialverlauf durch das stückweise konstante Potential der Abb. 5.22 und suchen die **stationären Zustände** der Energie E.

Das Problem ist inversionssymmetrisch bezüglich des Punktes x = 0. Deshalb müssen die (ortsabhängigen) Wellenfunktionen entweder eine positive oder eine negative Parität haben, d. h. es muss gelten

$$\psi^{(+)}(-x) = \psi^{(+)}(x) \quad \text{oder} \quad \psi^{(-)}(-x) = -\psi^{(-)}(x) \quad .$$
 (5.159)

Wir beschränken uns auf die stationären Lösungen der Energie $\underline{E} < U_0$ (Abb. 5.22). Die mit den Eigenschaften (5.159) verträglichen (reellen!) örtlichen Wellenfunktionen für die drei Bereiche I, II, III (Abb. 5.22) sind in Tabelle 5.3 zusammengestellt, wobei (verifiziere!)

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$$
; $\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}$. (5.160)

Zur Bestimmung der Konstanten $A, B, C, D, \alpha, \beta$ der Wellenfunktionen in Tabelle 5.3 stehen uns die Randbedingungen und die Normierungsbedingungen der Wellenfunktionen zur Verfügung. Wir konkretisieren das Modell, indem wir <u>d = a</u> wählen (Abb. 5.22) und formulieren die Randbedingungen an den Stellen x = d/2 + a = 3a/2 und x = d/2 = a/2.

Tabelle 5.3. Wellenfunktionen positiver $(\psi^{(+)})$ und negativer $(\psi^{(-)})$ Parität im Potential der Abb. 5.22 für Energien $E < U_0$.

Bereich	$\psi^{(+)}(x)$	$\psi^{(-)}(x)$
Ι	$A\cos(kx+\alpha)$	$C\sin(kx+\beta)$
II	$B\left(e^{\kappa x} + e^{-\kappa x}\right)$	$D\left(e^{\kappa x} - e^{-\kappa x}\right)$
III	$A\cos(kx-\alpha)$	$C\sin(kx-\beta)$

236 5 Die Schrödinger-Wellengleichung

Zuerst beschränken wir uns auf die Lösungen *positiver* Parität und kennzeichnen die Wellenfunktionen mit dem entsprechenden Bereich.

 $\psi^{(+)}(x)$: Die Randbedingung (5.114) ergibt

$$\psi_{\text{III}}\left(\frac{3a}{2}\right) = A\cos\left(k\frac{3a}{2} - \alpha\right) = 0$$
 . (5.161)

Aus (5.161) folgt

$$k\frac{3a}{2} - \alpha = \frac{\pi}{2}(1+2n)$$
; $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ (5.162)

Die Stetigkeitsbedingung (5.84) bedeutet

$$\psi_{\text{II}}\left(\frac{a}{2}\right) = \psi_{\text{III}}\left(\frac{a}{2}\right) \quad ,$$
(5.163)

d.h.

$$B\left(e^{\kappa\frac{a}{2}} + e^{-\kappa\frac{a}{2}}\right) = A\cos\left(k\frac{a}{2} - \alpha\right) \quad . \tag{5.164}$$

Schließlich ergibt die Stetigkeitsbedingung (5.83)

$$\psi'_{\rm II}(x)|_{x=\frac{a}{2}} = \psi'_{\rm III}(x)|_{x=\frac{a}{2}} \quad ,$$
 (5.165)

und damit ist

$$B\kappa\left(e^{\kappa\frac{a}{2}} - e^{-\kappa\frac{a}{2}}\right) = -kA\sin\left(k\frac{a}{2} - \alpha\right) \quad . \tag{5.166}$$

Wir dividieren die Gleichungen (5.166) und (5.164) durcheinander und erhalten

$$\kappa \frac{e^{\kappa \frac{a}{2}} - e^{-\kappa \frac{a}{2}}}{e^{\kappa \frac{a}{2}} + e^{-\kappa \frac{a}{2}}} = -k \tan\left(k\frac{a}{2} - \alpha\right) \quad . \tag{5.167}$$

Aus (5.162) folgt

$$\tan\left(k\frac{a}{2}-\alpha\right) = \tan\left(k\frac{3a}{2}-\alpha-ka\right) = \tan\left(\frac{\pi}{2}(1+2n)-ka\right) = \frac{1}{\tan(ka)},$$
(5.168)

und damit können wir (5.167) schreiben als

$$\kappa \tanh\left(\kappa \frac{a}{2}\right) = -\frac{k}{\tan(ka)}$$
(5.169)

Da die Größen κ und k nach (5.160) Funktionen der Energie sind, ist (5.169) die Bestimmungsgleichung für die Energie E. Es ist zweckmäßig, die Relation (5.169) dimensionsunabhängig zu formulieren. Dazu definieren wir

$$\epsilon \equiv \frac{E}{U_0} \quad ; \quad 0 \le \epsilon \le 1 \tag{5.170}$$

sowie

$$\gamma \equiv \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mU_0} \quad . \tag{5.171}$$

Aus (5.160) folgt einerseits

$$ka = \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mU_0\epsilon} = \gamma\sqrt{\epsilon} \tag{5.172}$$

und andererseits

$$\kappa \frac{a}{2} = \frac{a}{2\hbar} \sqrt{2mU_0(1-\epsilon)} = \frac{\gamma}{2} \sqrt{1-\epsilon} \quad . \tag{5.173}$$

Zudem ist

$$\frac{\kappa}{k} = \sqrt{\frac{1-\epsilon}{\epsilon}} \quad . \tag{5.174}$$

Mit (5.172), (5.173) und (5.174) lautet die Gleichung (5.169), gültig für $\psi^{(+)}(x)$

$$\sqrt{\frac{1-\epsilon}{\epsilon}} \tanh\left(\frac{\gamma}{2}\sqrt{1-\epsilon}\right) = -\frac{1}{\tan\left(\gamma\sqrt{\epsilon}\right)} \quad ; \quad (\psi^{(+)}(x)) \quad . \tag{5.175}$$

Die Relation (5.175) ist also die Bestimmungsgleichung für die Energiewerte (ϵ).

Nun wenden wir uns den Zuständen *negativer* Parität zu. Die letzte Spalte der Tabelle 5.3 enthält die entsprechenden Wellenfunktionen für die Bereiche I,II,III.

 $\psi^{(-)}(x)$: Die Rand- und Stetigkeitsbedingungen (5.161), (5.163) und (5.165) führen in diesem Fall auf die drei Beziehungen

$$C\sin\left(k\frac{3a}{2} - \beta\right) = 0 \quad , \tag{5.176}$$

$$D\left(e^{\kappa\frac{a}{2}} - e^{-\kappa\frac{a}{2}}\right) = C\,\sin\left(k\,\frac{a}{2} - \beta\right) \tag{5.177}$$

und

$$D\kappa\left(e^{\kappa\frac{a}{2}} + e^{-\kappa\frac{a}{2}}\right) = Ck\,\cos\left(k\,\frac{a}{2} - \beta\right) \quad . \tag{5.178}$$

Aus (5.177) und (5.178) folgt durch Division

$$\frac{1}{\kappa} \frac{e^{\kappa \frac{a}{2}} - e^{-\kappa \frac{a}{2}}}{e^{\kappa \frac{a}{2}} + e^{-\kappa \frac{a}{2}}} = \frac{1}{k} \tan\left(k\frac{a}{2} - \beta\right) \quad . \tag{5.179}$$

Der Gleichung (5.176) entnehmen wir

$$k\frac{3a}{2} - \beta = n\pi$$
; $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, (5.180)

und damit ist

238 5 Die Schrödinger-Wellengleichung

$$\tan\left(k\frac{a}{2}-\beta\right) = \tan\left(k\frac{3a}{2}-\beta-ka\right) = \tan(n\pi-ka) = -\tan(ka) \quad .$$
(5.181)

Mit (5.181) lässt sich (5.179) schreiben als

$$\tanh\left(\kappa\frac{a}{2}\right) = -\frac{\kappa}{k}\,\tan(ka) \quad . \tag{5.182}$$

Wir führen wieder die dimensionslosen Größen ϵ und γ ein und erhalten mit (5.172), (5.173) und (5.174)

$$\tanh\left(\frac{\gamma}{2}\sqrt{1-\epsilon}\right) = -\sqrt{\frac{1-\epsilon}{\epsilon}} \tan\left(\gamma\sqrt{\epsilon}\right) \quad ; \quad (\psi^{(-)}(x)) \quad . \tag{5.183}$$

Die Relation (5.183) ist die Bestimmungsgleichung der Energien (ϵ) für die Zustände negativer Parität.

Nach (5.175) und (5.183) sind die Energiewerte des Stickstoffatoms im Ammoniakmolekül abhängig vom dimensionslosen Modellparameter γ (5.171). Die Masse m des N-Atoms beträgt 15 atomare Masseneinheiten, also $m = 15 \times 1.66 \times 10^{-27}$ kg. Die Kombination von Längenparameter a (= d) und Potentialschwelle U_0 (Abb. 5.22) wählen wir derart, dass

$$\gamma = 5.5$$
 . (5.184)

In dieser Umgebung von γ -Werten ist nämlich garantiert, dass die Anzahl der Energieniveaus im Bereich $0 \leq E \leq U_0$ gleich der experimentell bekannten Zahl von vier Niveaus ist, wie die nachfolgenden Berechnungen zeigen werden. Gehen wir aus von einem Wert a = 0.38 Å ($\equiv a_0$), so entspricht (5.184) einer Potentialschwelle von $U_0 = 2.9 \times 10^{-2}$ eV.

Zur graphischen Bestimmung der Energie
eigenwerte schreiben wir $\left(5.175\right)$ in der Form

$$\tan(\gamma\sqrt{\epsilon}) = f_{\gamma}^{(+)}(\epsilon) \tag{5.185}$$

und (5.183) als

$$\tan(\gamma\sqrt{\epsilon}) = f_{\gamma}^{(-)}(\epsilon) \quad . \tag{5.186}$$

Die Größen $\tan(\gamma\sqrt{\epsilon}), f_{\gamma}^{(+)}(\epsilon)$ und $f_{\gamma}^{(-)}(\epsilon)$ sind in Abb. 5.23 als Funktion von ϵ (5.170) dargestellt.

Die Schnittpunkte der Kurve $\tan(\gamma\sqrt{\epsilon})$ mit den Kurven $f_{\gamma}^{(+)}(\epsilon)$ bzw. $f_{\gamma}^{(-)}(\epsilon)$ bestimmen die vier Energieeigenwerte in Einheiten U_0 :

$$\epsilon_1^{(+)} = 0.230 \quad ; \quad \epsilon_1^{(-)} = 0.231 \quad ; \quad \epsilon_2^{(+)} = 0.842 \quad ; \quad \epsilon_2^{(-)} = 0.884 \quad . \tag{5.187}$$

Die Zahl der gebundenen, stationären Zustände im Bereich $0 \le E \le U_0$ hängt ab vom γ -Wert des Modells; große γ -Werte bedeutet mehr Zustände, kleinere γ -Werte weniger.



(a)



Abb. 5.23. (a) Graphische Bestimmung der Energiewerte des N-Atoms (siehe Text); (b) Energiespektrum (schematisch).

Der Grundzustand der Energie $E_1^{(+)} = \epsilon_1^{(+)} U_0$ ist ein Zustand positiver Parität, der (energetisch benachbarte) erste angeregte Zustand der Energie $E_1^{(-)} = \epsilon_1^{(-)} U_0$ ein solcher negativer Parität. Nun wollen wir die *Wellenfunktionen* $\psi_1^{(+)}(x)$ und $\psi_1^{(-)}(x)$ dieser beiden

Nun wollen wir die Wellenfunktionen $\psi_1^{(+)}(x)$ und $\psi_1^{(-)}(x)$ dieser beiden stationären Zustände bestimmen. Da ihre Energiewerte sehr benachbart sind, genügt es für diesen Zweck den mittleren Energieparameter,

$$\epsilon_1 \equiv \frac{1}{2} \left(\epsilon_1^{(+)} + \epsilon_1^{(-)} \right) = 0.230 \quad ,$$
 (5.188)

zu verwenden. Aus (5.172) folgt mit (5.187) die entsprechende Wellenzahl (k_1) bzw. die Wellenlänge (λ_1) für die Bereiche I und III (Tabelle 5.3):

$$k_1 a = \gamma \sqrt{\epsilon_1} = 2.638$$
 ; $\frac{\lambda_1}{a} = \frac{2\pi}{k_1 a} = 2.382$. (5.189)

Für den Bereich II erhalten wir aus (5.173) mit (5.188)

$$\kappa_1 a = \gamma \sqrt{1 - \epsilon_1} = 4.826$$
(5.190)

In Abb. 5.24 sind die zugehörigen Wellenfunktionen, zusammen mit den entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichten $\rho_1^{(+)}(x)$, $\rho_1^{(-)}(x)$, dargestellt.

Dies ist – im Vergleich zum klassischen Verhalten – ein äußerst merkwürdiges Resultat. Es bedeutet nämlich, dass das N-Atom für diese Zustände mit gleicher Wahrscheinlichkeit in der linken bzw. rechten Potentialmulde anzutreffen ist! Die Zustände sind stationär; ihre Energie ist kleiner als die Potentialschwelle U_0 . Ein solches Verhalten ist klassisch undenkbar.

Nun betrachten wir Zustände, deren Wellenfunktionen einfache Linearkombinationen der Wellenfunktionen $\psi_1^{(+)}$ und $\psi_1^{(-)}$ sind, nämlich

$$\psi_1^{(r)}(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1^{(+)}(x) + \psi_1^{(-)}(x) \right)$$
(5.191)

und

$$\psi_1^{(l)}(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1^{(+)}(x) - \psi_1^{(-)}(x) \right) \quad . \tag{5.192}$$



Abb. 5.24. Wellenfunktion des Grundzustandes $(\psi_1^{(+)})$ und des ersten angeregten Zustandes $(\psi_1^{(-)})$ mit den entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichten. Die Potentialverteilung ist eingezeichnet.



Abb. 5.25. Wellenfunktionen und Wahrscheinlichkeitsdichten der Zustände "rechts"(r) (a) und "links"(l) (b). Die Potentialverteilung ist eingezeichnet.

Der Faktor $1/\sqrt{2}$ garantiert, dass auch die neuen Wellenfunktionen $\psi_1^{(r)}, \psi_1^{(l)}$ normiert sind (verifiziere!).

In Abb. 5.25 sind die neuen Wellenfunktionen und die zugehörigen Wahrscheinlichkeitsdichten dargestellt.

Die neuen Zustände sind dadurch charakterisiert, dass für sie das N-Atom fast vollständig in der rechten bzw. linken Potentialmulde anzutreffen ist. Wir nennen sie deshalb die "rechts"(r)- und "links"(l)-Zustände.

Wir stellen uns nun vor, das Ammoniakmolekül sei zur Zeit t = 0 im l-Zustand präpariert, d. h.

$$\Psi(x,0) = \psi_1^{(l)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1^{(+)}(x) - \psi_1^{(-)}(x) \right) \quad . \tag{5.193}$$

Da die beiden stationären Zustände in (5.193) unterschiedliche Energien haben $(E_1^{(+)} \neq E_1^{(-)})$, ist der *l*-Zustand *nicht stationär*! Wir erinnern uns an die allgemeine Zeitabhängigkeit (4.65) einer Quantenamplitude und spezialisieren den Ausdruck für $v \equiv u_x$, w(0) = l und $\langle |u_{E_1^{(+)}}|l\rangle = \langle u_{E_1^{(-)}}|l\rangle = 1/\sqrt{2}$. Zusammen mit (5.193) erhalten wir die zeitabhängige Wellenfunktion

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_1^{(+)}(x) e^{-i\frac{E_1^{(+)}}{\hbar}t} - \psi_1^{(-)}(x) e^{-i\frac{E_1^{(-)}}{\hbar}t} \right]$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \left[\psi_1^{(+)}(x) e^{i\frac{\delta E}{2\hbar}t} - \psi_1^{(-)}(x) e^{-i\frac{\delta E}{2\hbar}t} \right] \quad , \quad (5.194)$$

wobei
$$\delta E = E_1^{(-)} - E_1^{(+)}$$
; $E_1 = E_1^{(+)} + \frac{\delta E}{2} = E_1^{(-)} - \frac{\delta E}{2}$. (5.195)

Aus (5.191) und (5.192) folgt

$$\psi_1^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1^{(r)}(x) + \psi_1^{(l)}(x) \right) \quad ;$$

$$\psi_1^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1^{(r)}(x) - \psi_1^{(l)}(x) \right) \quad . \tag{5.196}$$

Wir setzen (5.196) in (5.194) ein und erhalten

$$\Psi(x,t) = e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \left[\cos\left(\frac{\delta E}{2\hbar}t\right) \psi_1^{(l)}(x) + i\sin\left(\frac{\delta E}{2\hbar}t\right) \psi_1^{(r)}(x) \right] \quad . \tag{5.197}$$

Die entsprechende Wahrscheinlichkeitsdichte ist nach (5.11) (die Wellenfunktionen sind reell)

$$\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = \cos^2\left(\frac{\delta E}{2\hbar}t\right) \left|\psi_1^{(l)}(x)\right|^2 + \sin^2\left(\frac{\delta E}{2\hbar}t\right) \left|\psi_1^{(r)}(x)\right|^2.$$
(5.198)

Die Integration der Wahrscheinlichkeitsdichte (5.198) über den Ortsraum zeigt, dass die zeitabhängigen Faktoren die Wahrscheinlichkeiten sind, das N-Atom im l- bzw. r-Zustand zu finden, unabhängig vom Ort. Diese Wahrscheinlichkeiten,

$$P_l(t) = \cos^2\left(\frac{\delta E}{2\hbar}t\right) \quad \text{und} \quad P_r(t) = \sin^2\left(\frac{\delta E}{2\hbar}t\right) \quad ,$$
 (5.199)

sind in Abb. 5.26 als Funktion der Zeit dargestellt.

Dieses erstaunliche Resultat bedeutet Folgendes. Falls es gelingt, ein Ammoniakmolekül zu präparieren, dessen N-Atom in einem l-Zustand (oder r-Zustand) ist, dann pendelt das N-Atom mit einer Periode von

$$T = \frac{2\pi\hbar}{\delta E} \tag{5.200}$$



Abb. 5.26. Wahrscheinlichkeit dafür, das N-Atom im l- bzw. r-Zustand zu finden.

zwischen diesen beiden Zuständen hin und her, wobei δE die Energieaufspaltung (5.195) der benachbarten stationären Zustände negativer und positiver Parität ist. Das Phänomen kann als **Tunneleffekt des N-Atoms** bezüglich der Potentialbarriere U_0 (Abb. 5.22) aufgefasst werden.

Für das Ammoniakmolekül ist der experimentelle Wert $\delta E \simeq 10^{-4} \,\mathrm{eV}$. Damit erhalten wir aus (5.200) eine Periode von $T \simeq 4 \times 10^{-11} \,\mathrm{s}$.

Der Tunneleffekt des N-Atoms im NH₃-Molekül ist physikalisch verwandt mit dem μ SR-Experiment (Abschn. 4.1.2). In beiden Fällen wird das System in einem Zustand präpariert, der die Überlagerung zweier stationärer Zustände benachbarter Energie ist. Es resultieren quantenphysikalische Schwebungen, welche auf der Interferenz der beiden stationären Zustände beruhen. Die Schwebungsfrequenz ist immer durch die Energieaufspaltung der stationären Zustände (und \hbar) bestimmt. Die Situation des N-Atoms im Ammoniakmolekül ist insofern einfacher als diejenige des μ^+ im **B**-Feld, weil das N-Atom (im Gegensatz zum Müon) stabil ist.

Wir studieren noch den **Grenzfall** $d \rightarrow \infty$ unseres Potentialmodells (Abb. 5.22): Die Potential*schwelle* wird zur Potential*stufe*. Dieser Grenzfall bedeutet physikalisch, dass das Geschehen in den beiden Potentialmulden völlig entkoppelt ist (eine Mulde sei in Zürich, die andere in New York). Es sollte also keinen Tunneleffekt geben!

Wir bestimmen die Wellenfunktionen und Energien der stationären Zustände wie im Fall d = a. Dabei vereinfachen sich die Wellenfunktionen im Bereich II (siehe Tabelle 5.4).

Anstelle der beiden Gleichungen (5.175) und (5.183) für die Energiewerte (ϵ) erhalten wir nun eine *einzige* Gleichung, nämlich

$$\tan(\gamma\sqrt{\epsilon}) = -\sqrt{\frac{\epsilon}{1-\epsilon}} \quad , \tag{5.201}$$

welche sowohl für die Zustände positiver Parität $(\psi^{(+)}(x))$ als auch für die Zustände negativer Parität $(\psi^{(-)}(x))$ gültig ist (verifiziere!). Dies bedeutet, dass die entsprechenden Energiewerte zusammenfallen; wir sprechen von **Entartung**. In der graphischen Darstellung der Energiewerte (Abb. 5.23) bedeutet es, dass die beiden Funktionen $f_{\gamma}^{(+)}(\epsilon)$ und $f_{\gamma}^{(-)}(\epsilon)$ zusammenfallen und gegeben sind durch $-\sqrt{\epsilon/(1-\epsilon)}$ (gestrichelte Kurve in Abb. 5.23).

Tabelle 5.4. Wellenfunktionen des Potentials der Abb. 5.22 für $d \to \infty$ und Energien $E < U_0$.

Bereich	$\psi^{(+)}(x)$	$\psi^{(-)}(x)$	
Ι	$A\cos(kx+\alpha)$	$C\sin(kx+\beta)$	
II	$B e^{\kappa x}$	$D e^{\kappa x}$	
III	$A\cos(kx-\alpha)$	$C\sin(kx-\beta)$	



Abb. 5.27. Ammoniakmaser (schematisch).

Welches sind die Konsequenzen für den Tunneleffekt? Sowohl die Zustände fester Parität der Wellenfunktionen $\psi_1^{(+)}$, $\psi_1^{(-)}$ als auch die Zustände l, rder Wellenfunktionen $\psi_1^{(l)}$, $\psi_1^{(r)}$ sind nun *stationär* und haben *dieselbe* Energie. Die Energieaufspaltung zwischen den Zuständen l, r ist also aufgehoben $(\delta E = 0)$ und damit strebt nach (5.200) die Tunnelperiode $T \to \infty$ – also kein Tunneleffekt für $d \to \infty$.

Die wichtigste Anwendung der Eigenschaften des NH₃-Moleküls ist der Ammoniakmaser ("Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation"). Dies war der erste Verstärker zur Erzeugung elektromagnetischer Strahlung (im Mikrowellenbereich), der auf der *induzierten* (erzwungenen) *Emission* beruht¹³. Der NH₃-Maser wurde von *Ch.H. Townes* und Mitarbeitern sowie *N.G. Basov* und *A.M. Prokhorov* zu Beginn der Fünfzigerjahre des 20. Jahrhunderts entwickelt. Die Anordnung ist in Abb. 5.27 schematisch dargestellt.

Wir beschreiben die Funktionsweise des NH₃-Masers, ohne auf die Herleitung aller Resultate einzugehen¹⁴. Der Ammoniakmaser wird betrieben bei der Frequenz $\nu = 2.387 \times 10^{10}$ Hz, welche der Energiedifferenz $\delta E = h\nu = E_1^{(-)} - E_1^{(+)}$ zwischen erstem angeregten Zustand und Grundzustand des Moleküls entspricht. Die Anordnung (Abb. 5.27) hat zwei wesentliche Elemente.

Das erste Ziel besteht darin, die NH₃- Moleküle, welche im Zustand $1^{(+)}$ bzw. $1^{(-)}$ sind, räumlich voneinander zu trennen. Dies geschieht mittels eines elektrischen Feldes, das durch die Elektroden der Abb. 5.27 erzeugt wird.

Wir betrachten zunächst das NH_3 -Molekül im äußeren **E**-Feld (Stark-Effekt). Die quantenmechanische Berechnung zeigt, dass für das NH_3 -Molekül mit den bei-

¹³ Heute bezeichnen wir mit dem Oberbegriff Laser ("Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation") jedes System der Verstärkung elektromagnetischer Strahlung, das auf der induzierten Emission basiert (unabhängig von der Frequenz; siehe Abschn. 6.2.2).

¹⁴ Siehe dazu C.H. Townes and A.L. Schawlow "Microwave spectroscopy" McGraw-Hill (1955).

den eng benachbarten Energieniveaus die Energie
eigenwerte im Feld gegeben sind durch [siehe Referenz $Fu\betanote 14$, Kap. 10]

$$E = E_0 \pm \sqrt{\left(\frac{\delta E}{2}\right)^2 + p_{ab}^2 \mathbf{E}^2} \quad , \qquad (5.202)$$

wobei $E_0 = \frac{1}{2} \left(E_1^{(-)} + E_1^{(+)} \right)$ der Mittelwert der Energie ohne **E**-Feld ist. Der Parameter p_{ab} ist proportional zum elektrischen Dipolmoment p des Moleküls und hängt ab von den räumlichen (dreidimensionalen) Wellenfunktionen von Grundzustand und angeregtem Zustand ohne **E**-Feld. Das **E**-Feld der Anordnung in Abb. 5.27 ist ein so genanntes elektrisches Quadrupolfeld, dessen Potential gegeben ist durch

$$V(x, y, z) = axy \quad . \tag{5.203}$$

Die Äquipotentialflächen sind also Hyperbelflächen. Ein solches Feld wird durch vier Elektroden realisiert, deren Oberflächen approximativ als Hyperbelflächen ausgebildet sind und die Spannungen $\pm V_0$ tragen (gegenüberliegende Elektroden haben gleiches Vorzeichen der Spannung; Abb. 5.27). Aus (5.203) folgt für die Komponenten des **E**-Feldes ($\mathbf{E} = -\nabla V$)

$$E_x = -ay$$
 ; $E_y = -ax$; $E_z = 0$ (5.204)

und daraus

$$|\mathbf{E}| = |a|\sqrt{(x^2 + y^2)} = |a|r \quad . \tag{5.205}$$

Der Betrag des \mathbf{E} -Feldes ist also proportional zum Abstand r von der z-Achse.

Wir können die Änderung der Energie E (5.202) des Moleküls im Quadrupolfeld nun folgendermaßen interpretieren. Da das **E**-Feld keine z-Komponente hat und die Moleküle praktisch parallel zur z-Achse fliegen, wird ihre kinetische Energie durch das Feld (5.203) nicht verändert. Die Änderung der Gesamtenergie E können wir deshalb als Änderung der potentiellen Energie U des Moleküls im äußeren elektrischen Feld interpretieren. Diese Änderung ist nach (5.202) eine monotone Funktion von \mathbf{E}^2 . Wegen (5.205) ist diese Größe allein eine Funktion des Abstandes r von der z-Achse, sodass auch die potentielle Energie U = U(r) nur von r abhängt. Mit der Änderung der potentiellen Energie ist aber eine radiale Kraft

$$F(r) = -\frac{dU(r)}{dr} \tag{5.206}$$

verbunden, die auf das Molekül wirken muss. Die Richtung dieser Kraft hängt nun davon ab, ob U(r) mit wachsendem r zunimmt oder abnimmt. Für den ersten angeregten Zustand des NH₃-Moleküls nimmt die potentielle Energie nach (5.202) zu. Deshalb ist die Kraft (5.206) gegen die z-Achse hin orientiert. Das bedeutet, dass das Quadrupolfeld die Moleküle, die sich im Zustand 1⁽⁻⁾ befinden, in Richtung der z-Achse ablenkt. Die NH₃-Moleküle im ersten angeregten Zustand werden dadurch in den Resonator hinein fokussiert (Strahl in Abb. 5.27). Umgekehrt nimmt die Energie der Moleküle, die sich im Grundzustand 1⁽⁺⁾ befinden, nach (5.202) ab. Entsprechend ist die Kraft (5.206) radial nach außen gerichtet und die Molekülbahnen entfernen sich von der z-Achse (diese Bahnen sind in Abb. 5.27 nicht eingezeichnet). Nur ein sehr kleiner Teil der Moleküle im Grundzustand erreicht deshalb den Resonator. Das Quadrupolfeld erzeugt also eine räumliche Trennung von Molekülen der beiden Zustände, die im Resonator zu einer Überbevölkerung der Moleküle im ersten angeregten Zustand gegenüber dem Grundzustand führt: wir sprechen von *"Inversion"*. Wie wir sehen werden (Abschn. 6.2.2) ist die Inversion die Voraussetzung dafür, dass der Molekülstrahl im Resonator die Maser-(oder Laser-) Wirkung auslösen kann.

Das zweite Ziel der Anordnung der Abb. 5.27 ist es, elektromagnetische Strahlung der Frequenz $\nu = 2.387 \times 10^{10}$ Hz zu erzeugen und zu verstärken. Dies geschieht im *Resonator*, der als Strahlungshohlraum ausgebildet ist. Die Abstände gegenüberliegender Innenwände betragen ein ganzes Vielfaches der Wellenlänge $\lambda = c/\nu = 1.256$ cm. Die einzelnen Strahlungsprozesse und die Mechanismen, die zur Erzeugung und Verstärkung eines Strahlungsfeldes hoher Kohärenz führen, werden im Kap. 6, Abschn. 6.2.2 behandelt.

5.2.7 Das Wasserstoffatom

Es gibt verschiedene Wasserstoffatome. Zunächst denken wir an den elektronischen Wasserstoff (p, e^-) (Abb.1.8), der uns bereits im Abschn. 1.4 beschäftigt hatte. Daneben gibt es aber auch verschiedene "exotische" Wasserstoffatome, etwa den müonischen Wasserstoff (p, μ^-) und den pionischen Wasserstoff (p, π^-) . Hier ist das Elektron durch das negativ geladene Müon (μ^-) bzw. das negativ geladene Pion (π^-) ersetzt. Nicht zu vergessen ist der Antiwasserstoff (\overline{p}, e^+) , ein gebundenes System, das aus den Antiteilchen des elektronischen Wasserstoffatoms, dem negativ geladenen Antiproton (\overline{p}) und dem Positron (e^+) zusammengesetzt ist. Antiwasserstoff wurde am CERN (Centre Européen pour la Recherche Nucléaire) in Genf erzeugt¹⁵.

All diesen gebundenen Zweiteilchensystemen ist Folgendes gemeinsam.

- Die *Coulomb-Kraft* ist die dominante Wechselwirkung zwischen den beiden Quantonen.
- Die Masse des Protons (m_p) ist wesentlich größer als die Masse des zweiten Teilchens (m). Deshalb ist im Schwerpunktsystem das Proton in guter Näherung in Ruhe und wird (im klassischen Bild) vom zweiten Teilchen "umkreist".

Das Wasserstoffatom ist wahrscheinlich das am genauesten untersuchte physikalische System schlechthin. Dafür gibt es gewichtige Gründe.

- 1. Der elektronische Wasserstoff ist der *Schlüssel zum Verständnis der Materie*; Stichwort: periodisches System der Elemente (siehe Abschn. 7.3.1).
- 2. Als gebundenes Zwei-Quanton-System ist der Wasserstoff ein begehrtes Objekt der experimentellen *Präzisionsphysik* zum Studium der *Wechselwirkungen* zwischen den beiden Quantonen. In dem Zusammenhang muss vor allem die *Quantenelektrodynamik* (QED) erwähnt werden, deren Vorhersagen die höchsten Genauigkeiten irgendeiner physikalischen

¹⁵ Allen "exotischen" Atomen (ausgenommen Antiwasserstoff) ist gemeinsam, dass sie eine sehr kurze Lebensdauer haben.

Theorie erreicht haben. Die QED ist die quantenphysikalische Feldtheorie der elektromagnetischen Wechselwirkung. Wichtige Studienobjekte dafür sind der elektronische und der müonische Wasserstoff. In den letzten Jahren entwickelte sich der pionische Wasserstoff zu einem wichtigen Studienobjekt der QCD (Quantenchromodynamik), der Quantenfeldtheorie der starken Wechselwirkung¹⁶.

In diesem Abschnitt studieren wir in erster Linie die Eigenschaften der gebundenen stationären Zustände von Wasserstoff in der Näherung eines nichtrelativistischen (beliebigen) Quantons mit Spin Null, das sich im Coulomb-Feld eines ruhenden (punktförmigen) Protons befindet. Die Resultate liefern die Grundlagen einerseits zum Verständnis der Struktur der Atome und andererseits zur Berechnung der präzisen Eigenschaften von Wasserstoff. Korrekturen zu den hier getroffenen Näherungen werden im Abschn. 7.1.4 diskutiert.

In der Näherung $m_p \gg m$ bewegt sich das "umlaufende" Quanton im festen *äußeren* Coulomb-Feld der Punktladung (e) des im Zentrum des Schwerpunktsystems plazierten Protons. Die potentielle Energie des Quantons (Ladung -e) ist

$$U(\mathbf{r}) = U(r) = -\frac{\alpha\hbar c}{r} \quad , \tag{5.207}$$

wobei $\alpha = e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar c$ die Feinstrukturkonstante ist; siehe Abb. 5.28.



Abb. 5.28. Potentielle Energie U(r) des Quantons im Coulomb-Feld des Protons. *E*: totale Energie im gebundenen Zustand.

Wir studieren stationäre, gebundene¹⁷ Zustände der Energie E (< 0) des Quantons. Setzen wir die räumliche zeitabhängige Wellenfunktion des stationären Zustandes der Energie E,

¹⁶ *H.-Ch. Schröder* et al., Eur. Phys. J. C**21** (2001) 473.

 $^{^{17}}$ Das System hat auch Streuzustände (klassisch sind dies die Hyperbelbahnen), die durch E>0 charakterisiert sind. Die zwei Typen von (stationären) Lösungen unterscheiden sich durch die räumlichen asymptotischen Randbedingungen.

248 5 Die Schrödinger-Wellengleichung

$$\Psi(\mathbf{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(\mathbf{r}) \quad , \tag{5.208}$$

in der Schrödinger-Gleichung (5.72) ein, erhalten wir die Differentialgleichung für den ortsabhängigen Anteil:

$$E\psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}) - \frac{\alpha\hbar c}{r}\psi(\mathbf{r}) \quad . \tag{5.209}$$

Da das Potential (5.207) sphärisch symmetrisch ist, drängt sich die Einführung von Kugelkoordinaten auf: $\psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \theta, \phi)$. Der Term mit dem Laplace-Operator in (5.209) hat dann die Form

$$\Delta\psi(r,\theta,\phi) = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right].$$
(5.210)

Das Auffinden der allgemeinen Lösung der Differentialgleichung (5.209) ist mathematisch ziemlich aufwendig. Deshalb beschränken wir uns zunächst auf **sphärisch symmetrische Lösungen** $\psi(r, \theta, \phi) = \psi(r)$ (klassisch entspricht dies den Kreisbahnen). Dadurch wird die partielle Differentialgleichung (5.209) eine gewöhnliche Differentialgleichung. Mit der Substitution

$$u(r) \equiv r \,\psi(r) \tag{5.211}$$

folgt aus (5.209) und (5.211) die Differentialgleichung für die radiale Funktion $\boldsymbol{u}(r)$

$$E u(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) - \frac{\alpha \hbar c}{r} u(r) \quad .$$
 (5.212)

Entsprechend unserer bisherigen Erfahrung sind es die *Randbedingungen*, welche die physikalisch gewünschten Lösungen der Differentialgleichungen festlegen.

Für jeden endlichen Wert von E und sehr $gro\beta e$ Werte von r können wir den letzten Term in (5.212) gegenüber dem ersten vernachlässigen und die Differentialgleichung wird

$$E u(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) \qquad (r \to \infty) \quad .$$
 (5.213)

Die allgemeine Lösung von (5.213) ist von der Form

$$u(r) = A e^{-\beta r} + B e^{\beta r} \quad (\beta > 0) \quad ,$$
 (5.214)

wobe
iA,BKonstanten sind. Damit die zugehörige Wellenfunktion normierbar
ist, mussBverschwinden. Für β erhalten wir durch Eins
etzen von (5.214) in (5.213)

$$\beta^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} \qquad (E < 0) \quad . \tag{5.215}$$

Das asymptotische Verhalten der Wellenfunktion ist also energieabhängig.

Wir fordern, dass die Wellenfunktion überall *endlich* sein soll. (Dies garantiert eine endliche Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho = |\psi|^2$, und folglich geht die lokale Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\rho d^3 r \to 0$ für $d^3 r \to 0$.) Damit lässt sich die Wellenfunktion $\psi(r)$ für *kleine* Werte von r in eine Taylor-Reihe entwickeln:

$$\psi(r) = \alpha_0 + \alpha_1 r + \alpha_2 r^2 + \dots \quad . \tag{5.216}$$

Der naheliegende Ansatz für die einfachste Wellenfunktion des Wasserstoffatoms ist also nach (5.214), (5.215) und (5.216)

$$\psi_1(r) = \alpha_0 \, e^{-\beta_1 r} = \alpha_0 \, e^{-\frac{\sqrt{-2mE_1}}{\hbar}r} \quad , \tag{5.217}$$

wobei E_1 die Energie des entsprechenden Zustandes ist. Die zugehörige radiale Funktion ist nach (5.211) von der Form

$$u_1(r) = r A e^{-\beta_1 r} \quad . \tag{5.218}$$

Diese Funktion müsste also eine Lösung der allgemeinen Gleichung (5.212) sein – ist sie es? Wir differenzieren (5.218) und erhalten

$$u_1''(r) = u_1(r) \left[\beta_1^2 - \frac{2\beta_1}{r} \right] = u_1(r) \left[-\frac{2mE_1}{\hbar^2} - \frac{2}{r} \frac{\sqrt{-2mE_1}}{\hbar} \right] \quad . \tag{5.219}$$

Nun setzen wir (5.219) in (5.212) ein, verwenden (5.218), kürzen den gemeinsamen Faktor $A\,e^{-b_1r}$ heraus und finden

$$E_1 r = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{2mE_1}{\hbar^2} r - 2\frac{\sqrt{-2mE_1}}{\hbar} \right] - \alpha \hbar c \quad .$$
 (5.220)

Die beiden Terme in r heben sich auf und aus (5.220) folgt

$$E_1 = -\frac{1}{2}mc^2 \alpha^2 \quad . \tag{5.221}$$

Dies ist genau die Energie des Grundzustandes im Bohrschen Atommodell! Die zugehörige räumlich normierte Wellenfunktion ist nach (5.217) (verifiziere!)

wobei

$$a_0 = \frac{\hbar}{mc} \frac{1}{\alpha} = \frac{1}{\beta_1} \tag{5.223}$$

der Bohrsche Radius ist. Dieser einfachste Zustand ist der *Grundzustand* des Wasserstoffatoms.

Die Wahrscheinlichkeit dafür, das Elektron im Intervall zwischen r und r + dr zu finden ist mit (5.222)

250 5 Die Schrödinger-Wellengleichung

$$|\psi_1(r)|^2 4\pi r^2 dr = \varrho_1(r) dr = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr \quad . \tag{5.224}$$

Die radiale Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho_1(r)$ zusammen mit der Wellenfunktion $\psi_1(r)$ sind in Abb. 5.29 dargestellt.

Das Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte liegt beim Bohrschen Radius!

Nach dem gleichen Schema finden wir weitere kugelsymmetrische Lösungen der Schrödinger-Gleichung, indem wir sukzessive höhere Terme in der Taylor-Reihenentwicklung (5.216) mitnehmen.

Für kleine Werte von
r $(r\ll a_0)$ haben die entsprechenden radialen Wellenfunktionen die Struktur

$$u_1(r) = r \alpha_0^{(1)}$$

$$u_2(r) = r \left(\alpha_0^{(2)} + \alpha_1^{(2)} r \right)$$

$$u_3(r) = r \left(\alpha_0^{(3)} + \alpha_1^{(3)} r + \alpha_2^{(3)} r^2 \right) , \text{ etc. } (r \ll a_0) \quad (5.225)$$

Wir verallgemeinern den Ansatz (5.117), indem wir für jeden stationären Zustand die vollständige radiale Wellenfunktion $u_n(r)$ als Produkt der asymptotischen Formen (5.214) und (5.225) für große bzw. kleine Werte von ransetzen. Vom Produktansatz müssen wir verlangen, dass er die Differentialgleichung (5.212) identisch in r erfüllt. Die resultierenden Bedingungen sind Bestimmungsgleichungen einerseits für die Energiewerte E_n und andererseits für die Koeffizienten der radialen Funktionen.

Wir fassen die Resultate dieses Verfahrens zusammen. Für die *Energieei*genwerte findet man



Abb. 5.29. Grundzustand von Wasserstoff. (a) Wellenfunktion, (b) radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte.

Tabelle 5.5. Die Wellenfunktionen der kugelsymmetrischen Zustände für die Hauptquantenzahlen n = 1, 2, 3.

$$\frac{n}{2} \frac{\psi_n(r)}{\sqrt{4\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} \frac{\psi_n(r)}{\sqrt{4\pi (2a_0)^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \frac{\psi_n(r)}{\sqrt{4\pi (3a_0)^3}} \left(1 - 2\frac{r}{3a_0} + \frac{2}{3}\left(\frac{r}{3a_0}\right)^2\right) e^{-\frac{r}{3a_0}}$$

d. h. die Formel von Bohr (!) (Abschn. 1.4), wobei n die Hauptquantenzahl ist. Die entsprechenden normierten Wellenfunktionen sind für n = 1, 2, 3 in Tabelle 5.5 aufgeführt.

Die zugehörigen radialen Wahrscheinlichkeitsdichten sind in Abb. 5.30 dargestellt.

Nun wenden wir uns dem Studium der allgemeinen, **nicht kugelsymmetrischen** Lösungen der gebundenen Zustände des Wasserstoffatoms zu. Die entsprechenden Wellenfunktionen $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ sind im Anhang B hergeleitet. Sie sind von der Form

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$
(5.227)

wobei $R_{nl}(r)$ die radialen Wellenfunktionen (B.65) und $Y_{lm}(\theta, \phi)$ die normierten Kugelfunktionen (B.30) sind. Der Index n bezeichnet die Hauptquantenzahl (n = 1, 2, 3,), welche mit (5.226) bzw. (B.57) die Energie des stationären Zustandes festlegt.

Schließen wir die nicht kugelsymmetrischen Lösungen ein, dann sind die Energien des Wasserstoffatoms (mit Ausnahme des Grundzustandes) *entartet.* Dies bedeutet, dass alle nicht kugelsymmetrischen Lösungen die gleiche Energie haben wie die kugelsymmetrische Lösung mit derselben Hauptquantenzahl n. Die entarteten Zustände sind charakterisiert durch die (ebenfalls ganzzahligen) Quantenzahlen l (l = 0, 1, 2, ..., n - 1) und m ($m = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm l$).

Die Hauptquantenzahl legt also die Energie des Systems fest. Wir fragen: Beschreiben auch die Quantenzahlen l und m spezifische physikalische Eigenschaften des Atoms und wenn ja – welche?

Wir gehen aus von der Quantenzahl m, welche nach (B.16), (B.26) und (5.227) die ϕ -Abhängigkeit der Wellenfunktion vollständig festlegt:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) \propto \Phi_m(\phi) = e^{im\phi} \qquad (m=0,\pm 1,\pm 2,...,\pm l) \quad .$$
 (5.228)

Für feste Werte r, θ ist die ϕ -Abhängigkeit in (5.228) nach (B.14) eine Folge der Stetigkeit und Eindeutigkeit der Wellenfunktion. Aus (5.228) folgt die Rotationssymmetrie der Wahrscheinlichkeitsdichte bezüglich der z-Achse. Die



Abb. 5.30. Die radialen Wahrscheinlichkeitsdichten der kugelsymmetrischen stationären Zustände von Wasserstoff für die Hauptquantenzahlen n = 1, 2, 3 mit den entsprechenden Energien. Die klassisch verbotenen Bereiche sind schraffiert.

Quantenzahl m multipliziert die Variable ϕ der Symmetrieoperation in der Wellenfunktion. Sie entspricht der "azimutalen Wellenzahl m" (Tabelle 2.1) und legt nach der entsprechenden Teilchen-Wellen-Symmetrierelation (Abschn. 2.2),

$$J_z = m\hbar \quad , \tag{5.229}$$

die z-Komponente des Drehimpulses fest; m ist also die magnetische Quantenzahl.

Der Maximalwert von m ist (nach (5.228)) gleich der Quantenzahl l. Somit ist l die Quantenzahl des Bahndrehimpulses. (Die Beschreibung des Wasserstoffatoms mittels der Schrödinger-Gleichung beinhaltet die Vernachlässigung des Eigendrehimpulses (Spin) des umlaufenden Quantons – falls vorhanden.) Die kugelsymmetrischen Lösungen (Tabelle 5.5) haben alle Drehimpuls l = 0; man nennt die entsprechenden Zustände "*s-Zustände*". Wie im Anhang B gezeigt wird, sind die (2l + 1) m-Zustände (für den festen Wert von $l \neq 0$) entartet; man spricht von der Richtungsentartung. Diese ist eine direkte Folge der Rotationssymmetrie des Coulomb-Potentials. Zusätzlich sind auch alle *l*-Zustände (für den festen Wert der Hauptquantenzahl n) entartet. Die *l*-Entartung ist eine Folge der Näherungen, welche in der Behandlung des Wasserstoffatoms durch die Schrödinger-Wellengleichung begründet sind (nicht-relativistisches Quanton mit Spin Null).

Abbildung 5.31 zeigt das Energieniveauschema von Wasserstoff.

Verschiedene *l*-Zustände sind durch die üblichen spektroskopischen Symbole gekennzeichnet:

$$l = 0 : s-\text{Zustand}$$

$$l = 1 : p-\text{Zustand}$$

$$l = 2 : d-\text{Zustand}$$

$$l = 3 : f-\text{Zustand}$$

$$l = 4 : g-\text{Zustand} \text{ etc.} (5.230)$$

Die entsprechende Hauptquantenzahl n ist dem Symbol vorangestellt. Einige Strahlungsübergange (so genannte elektrische Dipolübergänge, vgl. Abschn. 6.2.1) sind eingezeichnet.

Zur Veranschaulichung der Wellenfunktionen tiefliegender gebundener Zustände sind in Abb. 5.32 die mit r^2 gewichteten Aufenthaltswahrscheinlichkeits-



Abb. 5.31. Die Energien E_n der gebundenen Zustände von Wasserstoff in Einheiten der Energie E_1 des Grundzustandes $(E_1 = -\frac{mc^2}{2}\alpha^2)$.



Abb. 5.32. Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten der gebundenen Zustände (nlm) von Wasserstoff, gewichtet mit dem Quadrat des Abstandes r vom Proton (siehe Text). Der Maßstab wurde um den Faktor n^2 verkleinert. [Nach A. Grammel, M. Rubly, H.J. Korsch und H.-J. Jodl, Fachbereich Physik der Universität Kaiserslautern].

dichten in der (y, z)-Ebene (Abb. B.1), also die Größen $r^2 |\psi_{nlm}(r, \theta, \pi/2)|^2$, dargestellt.

Zunächst drängt sich eine generelle Bemerkung zu den Wellenfunktionen (5.227) auf. Die entsprechenden Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten sind im Allgemeinen nicht kugelsymmetrisch – obschon das zugehörige Coulomb-Potential kugelsymmetrisch ist. Wegen der ϕ -Abhängigkeit sind sie aber rotationssymmetrisch bezüglich der z-Achse. Wie wir gesehen haben ist dies verknüpft mit der Tatsache, dass jeder gebundene Zustand ein Eigenzustand des Drehimpulses J_z ist. Da aber ein solcher Zustand nicht gleichzeitig ein Eigenzustand von J_x oder J_y sein kann (2. Satz in Abschn. 2.3.4), gibt es im Allgemeinen keine Rotationssymmetrie der Wahrscheinlichkeitsdichte bezüglich der x- oder y-Achse. Die Wellenfunktionen (5.227) gelten für jede beliebig wählbare, aber feststehende z-Achse, bezüglich der die Kugelkoordinaten definiert sind. Im Jargon heißt dies: "Die gewählte z-Achse ist die Quantisierungsachse (bezüglich J_z)".

Den Bildern der Abb. 5.32 entnehmen wir folgende Eigenschaften. Die Wahrscheinlichkeitsdichten der Zustände mit der magnetischen Quantenzahl m = 0 sind entweder kugelsymmetrisch (im Fall der *s*-Zustände) oder längs der *z*-Achse konzentriert (Aufgabe 60). Andererseits sind die Wahrscheinlichkeitsdichten für die Zustände mit dem Maximalwert m = l = n - 1konzentriert längs einer Kreisbahn in der (x, y)-Ebene (Aufgabe 59) und dies umso deutlicher, je größer die Quantenzahlen sind (klassischer Grenzfall!). Die Zustände m = l = n - 1 gehen also für $n \gg 1$ in diejenigen des Bohrschen Atommodells über, dessen Kreisbahnen als klassisch angenommen wurden. Alle übrigen gebundenen Zustände des Wasserstoffatoms sind im Bohrschen Atommodell nicht enthalten.

Abschließend wenden wir uns der Frage zu: Welche **Parität** haben die gebundenen Zustände des Wasserstoffatoms? Dazu untersuchen wir die Eigenschaften der Wellenfunktionen $\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = \psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ (B.66) unter der Transformation der *räumlichen Inversion*

$$\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$$
 . (5.231)

Dabei transformieren sich die Polarkoordinaten (Abb. B.1) und ω (B.17) als

$$\begin{array}{l} r \to r \\ \theta \to \pi - \theta \qquad (\omega \to -\omega) \\ \phi \to \phi + \pi \quad . \end{array}$$
 (5.232)

Aus (B.24) und (B.21) folgt mit (5.232)

$$P_{l|m|}(\omega) \to (-1)^{l+|m|} P_{l|m|}(\omega)$$
 (5.233)

und aus (B.16)

$$e^{im\phi} \to (-1)^{|m|} e^{im\phi}$$
 . (5.234)

Aus (5.233) und (5.234) erhalten wir die Transformationseigenschaft der Kugelfunktionen

$$Y_{lm}(\theta,\phi) \to (-1)^l Y_{lm}(\theta,\phi) \quad . \tag{5.235}$$

Weil sich die Radialfunktionen bei der Inversion nicht ändern, folgt aus (5.235) direkt das Schlussresultat

256 5 Die Schrödinger-Wellengleichung

$$\boldsymbol{P}\,\psi_{nlm}(\mathbf{r}) \equiv \psi_{nlm}(-\mathbf{r}) = \alpha_l\,\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = (-1)^l\,\psi_{nlm}(\mathbf{r}) \quad , \qquad (5.236)$$

wobei \mathbf{P} der Paritätsoperator ist und $\alpha_l = (-1)^l$ als *Parität* des stationären Zustandes (n, l, m) bezeichnet wird.

Dem Ausdruck (5.236) entnehmen wir, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte *invariant* ist gegenüber einer räumlichen Inversion. Diese Eigenschaft ist eine Folge der Inversionssymmetrie des Coulomb-Potentials.

Die Paritätseigenschaft (5.236) spielt eine wichtige Rolle bei den so genannten "Auswahlregeln" für Strahlungsübergänge zwischen stationären Zuständen (siehe dazu Abschn. 6.2.1).

Aufgabe 42 Orthogonalität.

- 1. Schreibe die Orthogonalitätsrelation für die Energie
eigenzustände u_E auf und drücke sie aus mit Hilfe der örtlichen Wellen
funktionen $\psi_E(\mathbf{r})$ der stationären Zustände.
- 2. Verifiziere die Orthogonalitätsrelation für die Wellenfunktionen des Quantons im unendlich tiefen Kastenpotential.

Aufgabe 43 Schwebung. Ein Quanton der Masse m befindet sich in einem unendlich tiefen Kastenpotential

U(x) = 0 für 0 < x < a; $U(x) = +\infty$ sonst.

Zur Zeit t = 0 ist es im Zustand mit der Wellenfunktion

$$\Psi(x,0) = C(\psi_1(x) + \psi_2(x))$$

wobei $\psi_1(x)$ und $\psi_2(x)$ die Wellenfunktionen des Grundzustandes bzw. des ersten angeregten Zustandes sind, und C ist eine Konstante.

- 1. Bestimme die Konstante C.
- Berechne die Wellenfunktion Ψ(x, t) sowie die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ρ(x, t) des Quantons. *Hinweis*: Führe die Frequenz ω ≡ ħπ²/2ma² ein.
- Verifiziere, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Quantons im Kasten zeitunabhängig ist.
- 4. Berechne die mittlere Position $\langle X \rangle$ des Quantons als Funktion der Zeit (Erwartungswert).
- 5. Das Quanton sei ein Elektron (Masse $m = 0.511 \,\mathrm{MeV/c^2}$), das sich in einem Kastenpotential der Breite $a = 5 \,\mathrm{\AA}$ befindet. Berechne die Periode T der Schwebung.

Aufgabe 44 Zerfließendes Wellenpaket I. Ein atomares Quanton, z.B. ein Cs-Atom (Masse $m = 2.21 \times 10^{-25}$ kg), sei in einem Potentialtopf U(x) gebunden, dessen Kräfte gegen das Zentrum (bei x = 0) gerichtet sind. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Quantons sei

$$\rho(x) = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-\frac{2x^2}{\lambda^2}} \quad ; \quad \lambda = 50 \,\mu\mathrm{m}.$$

Nun denken wir uns das Potential U(x) zur Zeit t = 0 plötzlich entfernt. Die räumliche Ausdehnung der Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit sei zu jedem Zeitpunkt durch die Breite Δx charakterisiert; Δx ist der Ort, an welchem die Verteilungsfunktion auf den *e*-ten Teil des Wertes bei x = 0 abgeklungen ist.

Bestimme die Zeit $t_0,$ nach welcher die Breite $\varDelta x$ um den Faktor 2 zugenommen hat.

Hinweis: Benütze die Gleichung (5.63).

Aufgabe 45 Zerfliessendes Wellenpaket II. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte eines freien Quantons zur Zeit t = 0 ist gegeben durch die Gauss-Verteilung

$$\rho(x,0) = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-\frac{2x^2}{\lambda^2}} \quad ,$$

wobei λ eine Konstante ist.

Zeige, dass die gesamte Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Quantons unabhängig von der Zeittgleich eins ist.

Hinweis: Verwende die Gleichung (5.63).

Aufgabe 46 Schrödinger-Gleichung. Sei $\psi(\mathbf{r})$ die örtliche Wellenfunktion eines stationären Zustandes der Energie E.

Zeige, dass sowohl der Realteil als auch der Imaginärteil von $\psi(\mathbf{r})$ Lösungen der Schrödinger-Gleichung zur Energie E sind.

Aufgabe 47 Eindringtiefe. Wir betrachten ein an der Potentialstufe U_0 streuendes Quanton (Masse m) der Energie E, wobei $E < U_0$ (Abb. 5.9). Die Eindringtiefe x_0 in den klassisch verbotenen Bereich II ist definiert als die Tiefe x_0 , nach welcher die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $\rho_{II}(x)$ um den Faktor 1/e abgeklungen ist.

Berechne die Eindringtiefe x_0 als Funktion von E und U_0 . Wie groß ist die Eindringtiefe für ein Neutron (Masse $m = 939.6 \text{ MeV/c}^2$) der Energie E = 5 MeV, das an einer Potentialstufe von $U_0 = 20 \text{ MeV}$ gestreut wird?

Aufgabe 48 α -Zerfall. Berechne die (elektrostatische) potentielle Energie $U_{\alpha}(R)$ eines α -Teilchens (⁴₂He-Atomkern) am Rand eines schweren Atomkerns (Kernradius R), die so genannte *Coulomb-Barriere* U_C . Wir können den schweren Kern in guter Näherung als elektrisch homogen geladene Kugel mit dem Radius R ansehen und das α -Teilchen als Punktladung betrachten. Berechne U_C (in MeV) insbesondere für den ²⁴¹₉₅Am-Kern ($R \approx 11 \text{ fm}$; $1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$). (Da das α -Teilchen beim α -Zerfall aus dem ²⁴¹Am-Kern stammt, beträgt die Gesamtladung Z der Kugel Z =95 - 2 = 93 Elementarladungen.)

Aufgabe 49 *P-P-Kette.* Wir betrachten zwei zentral zusammenstoßende Protonen und fragen nach der potentiellen Energie U_C (Coulomb-Barriere) des Systems im Zustand der "Berührung" der beiden Protonen. Der Ladungsradius eines Protons beträgt $R \simeq 1 \text{ fm} (1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}).$

Vergleiche das Resultat mit der mittleren kinetischen Energie eines Protons in der Sonne $(0.19 \,\mathrm{MeV})$.

2585 Die Schrödinger-Wellengleichung

Aufgabe 50 Harmonischer Oszillator I. Bestimme die Energie E_1 und die Wellenfunktion $\psi_1(x)$ des ersten angeregten (stationären) Zustandes des linearen harmonischen Oszillators (einschließlich Normierung). Verifiziere die Orthogonalitätsrelation bezüglich der Wellenfunktion des ersten angeregten Zustandes und des Grundzustandes.

Aufgabe 51 Harmonischer Oszillator II. Berechne die spektralen Breiten des Ortes ΔX und des Impulses ΔP für

- 1. den Grundzustand,
- 2. den ersten angeregten Zustand,

und vergleiche die entsprechenden Heisenbergschen Ungleichungen untereinander.

Aufgabe 52 Doppelter Potentialtopf I. Wir betrachten ein Quanton der Masse m im Potentialtopfmodell der Abb. 5.22 mit d = a und $\gamma = \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mU_0} = 5.5$.

Bestimme die Wellenfunktionen $\psi_2^{(+)}(x)$ und $\psi_2^{(-)}(x)$ des zweiten bzw. dritten angeregten (stationären) Zustandes im Energiebereich $E < U_0$ in graphischer Form.

Aufgabe 53 Doppelter Potentialtopf II. Wir betrachten ein Quanton der Masse m im Potentialtopfmodell der Abb. 5.22 mit d = a und interessieren uns für die stationären Zustände im Energiebereich $E > U_0$.

- 1. Berechne die Bestimmungsgleichung für die Energiewerte der Zustände positiver Parität, ausgedrückt in den Parametern $\epsilon \equiv \frac{E}{U_0}$ und $\gamma \equiv \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mU_0}$. 2. Bestimme (graphisch-numerisch) den tiefst liegenden Energiewert für $\gamma = 5.5$.

Aufgabe 54 Doppelter Potentialtopf III. Wir studieren die stationären Zustände eines Quantons der Masse m im Potentialtopfmodell der Abb. 5.22 für den Grenzfall $U_0 \to \infty$ (unendlich tiefes Doppelpotential).

- 1. Bestimme die Energien und die Wellenfunktionen der stationären Zustände fester Parität. Berechne für diese Zustände die Wahrscheinlichkeit dafür, das Quanton in der linken (P_l) bzw. in der rechten Mulde (P_r) zu finden.
- 2. Schreibe die Wellenfunktionen der Zustände auf, für welche sich das Quanton in der rechten Mulde $(\psi^{(r)}(x))$ bzw. in der linken Mulde $(\psi^{(l)}(x))$ befindet und bestimme die zugehörigen Energien.
- 3. Welches ist die allgemeinste Form der Wellenfunktionen der stationären Zustände?

Diskutiere den Grad der Entartung der (stationären) Zustände.

Hinweis: Der Entartungsgrad ist allgemein die Zahl der linear unabhängigen Lösungen.

Aufgabe 55 Hohlkugel I. Ein Quanton der Masse m befindet sich im Innern einer "total reflektierenden" Hohlkugel vom Radius R, d. h. das Potential U(r) ist null für r < R und unendlich für r > R.

Bestimme die kugelsymmetrischen Wellenfunktionen der stationären Zustände und die entsprechenden Energien.

Hinweis: Verwende die radiale Funktion $u(r) \equiv r \psi(r)$.

Aufgabe 56 Hohlkugel II. Das kugelsymmetrische Potential eines Quantons hat die Form

$$U(r) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \le r \le R\\ U_0 & \text{für } r > R \end{cases}.$$

- 1. Berechne die Bestimmungsgleichung für die Energie des Quantons im (gebundenen) Grundzustand mit kugelsymmetrischer Wellenfunktion. *Hinweis*: Verwende die radiale Funktion $u(r) \equiv r \psi(r)$.
- 2. Zeige, dass für

$$\frac{8mR^2U_0}{\pi^2\hbar^2} < 1$$

sicher kein gebundener Zustand des Quantons in der Hohlkugel existiert.

Aufgabe 57 Müonisches Atom. Ein negativ geladenes Müon (Masse $m = 105.66 \text{ MeV}/c^2$) kann mit jedem Atomkern der Lagung Z e ein wasserstoffähnliches gebundenes System bilden, das so genannte müonische Atom.

- 1. Bestimme die Energien der stationären Zustände des müonischen Atoms als Funktion der Kernladungszahl Z in der Näherung eines punktförmigen Atomkerns der Masse $M \gg m$. (Da die Masse des Elektrons 207 Mal kleiner ist als die Masse des Müons, können wir die Elektronen des Atoms in guter Näherung vernachlässigen: der Bohrsche Radius des Müons ist 207 Mal kleiner als der Bohrsche Radius des Elektrons!)
- 2. Welche Energie E_{γ} hat das Photon (γ -Quant), das im Übergang vom 3*d*-Zustand zum 2*p*-Zustand eines müonischen Atoms von Silizium (Z = 14) emittiert wird?

Aufgabe 58 Wasserstoffatom I. Wir studieren Eigenschaften des Grundzustandes des Wasserstoffatoms.

Berechne die Mittelwerte $\langle R \rangle$, $\langle R^2 \rangle$, $\langle X \rangle$, $\langle Y \rangle$, $\langle Z \rangle$, $\langle X^2 \rangle$, $\langle Y^2 \rangle$ und $\langle Z^2 \rangle$ und drücke die Ergebnisse durch den Bohrschen Radius a_0 aus. Wie groß sind die spektralen Breiten ΔX und ΔR ?

Aufgabe 59 Wasserstoffatom II. Wir studieren Eigenschaften eines stationären Zustandes vom Typ (n, l, m) = (n, n - 1, n - 1), d. h. eines so genannten Zirkularbahnzustandes ("circular orbit"). Als Beispiel wählen wir den Zustand (2, 1, 1) und führen Zylinderkoordinaten (ρ, z) ein.

Berechne die Mittelwerte $\langle \rho \rangle$, $\langle Z \rangle$, die spektralen Breiten $\Delta \rho$, ΔZ und bestimme die "Radiusunschärfe" $\Delta \rho / \langle \rho \rangle$. Vergleiche die Resultate mit der entsprechenden Bahn des Bohrschen Atommodells.

Aufgabe 60 Wasserstoffatom III. Wir studieren Eigenschaften eines stationären Zustandes vom Typ (n, l, 0) und wählen als Beispiel den Zustand (2, 1, 0).

Berechne die Mittelwerte der Zylinderkoordinaten $\langle \rho \rangle$, $\langle Z \rangle$ sowie deren spektrale Breiten $\Delta \rho$, ΔZ .

6 Elektromagnetische Prozesse

Inhalt: Wir untersuchen hier Prozesse, in denen Photonen umgewandelt, vernichtet oder erzeugt werden, wobei wir uns auf Approximationen beschränken müssen. (Eine allgemeine quantenphysikalische Behandlung würde den Rahmen einer Einführung bei Weitem sprengen.)

In einem ersten Teil untersuchen wir die Grenzen der *klassischen Theorie*, zunächst am wichtigen Prozess der *spontanen Emission* von Photonen. Materielle harmonische Oszillatoren werden angeregt und strahlen. Die abgestrahlte Energie wird der Oszillatorenergie entzogen und dämpft deren Bewegung.

Den *Resonanzfluoreszenzprozess* beschreiben wir klassisch als Anregung der strahlungsgedämpften Oszillatoren durch die einfallende Strahlung.

Im zweiten Teil entwickeln wir eine halbklassische Theorie der Strahlungsprozesse, in welcher das materielle System quantenphysikalisch und das Strahlungsfeld weiterhin klassisch behandelt wird. Damit lassen sich die Frequenzen der Spektrallinien und auch die natürlichen Linienbreiten (bzw. die mittleren Lebensdauern) auf die Eigenschaften des materiellen Systems zurückführen. Wir erhalten die Auswahlregeln für elektrische Dipolstrahlung.

Schließlich behandeln wir die Prozesse der Absorption und der induzierten Emission im Strahlungsfeld und erklären das Funktionsprinzip des Lasers anhand des Ammoniakmasers.

Wie wir im letzten Kapitel gesehen haben, bestimmt die Schrödinger-Wellengleichung die Eigenschaften des (spinlosen, nicht-relativistischen) Quantons im (zeitunabhängigen) äußeren Potential. Beispielsweise sind die gebundenen Energieeigenzustände (etwa des Elektrons im Wasserstoffatom) stationär. Die Existenz einer natürlichen Linienbreite zeigt aber, dass diese letzte Aussage im Allgemeinen nicht richtig sein kann; es gibt den Prozess der *spontanen Emission von Strahlung* für isolierte, gebundene Systeme elektrisch geladener Quantonen. Wie kann man diesen Prozess verstehen?

Die Frage lässt sich viel allgemeiner stellen. Wir haben an zahlreichen Beispielen das Phänomen der Umwandlung von Quantonen kennen gelernt. Wir erinnern etwa an den Photoeffekt, die Zerfälle der Pionen $(\pi^+ \to \mu^+ + \nu_{\mu})$ und der Müonen $(\mu^+ \to e^+ + \nu_e + \overline{\nu_{\mu}})$ sowie die Kernreaktionen in den Sternen und die vielen Umwandlungs- und Zerfallsprozesse der Teilchenphysik. Wie kann man die Umwandlung (Erzeugung, Vernichtung) von Quantonen verstehen? Das ist eine ambitiöse Fragestellung. Um einen ersten Schritt hin zu einer Antwort zu tun, erinnern wir uns an das Erfolgsrezept, das uns zum Begriff der Quantenamplitude und ihrer Gesetze geführt hat. Wir sind von der *klassischen Elektrodynamik* ausgegangen und haben die Polarisationseigenschaften von Licht untersucht. Das Vorgehen war deshalb so erfolgreich, weil die Elektrodynamik eine vollständige Theorie darstellt, die im klassischen Grenzfall aus der Quantentheorie hervorgehen muss.

Aus demselben Grund konzentrieren wir uns auch hier auf *elektrodynamische* Prozesse. In einem ersten Schritt untersuchen wir, inwieweit bereits die rein klassische Elektrodynamik die spontane Emission und den Resonanzfluoreszenzprozess beschreiben kann.

6.1 Klassische Theorie

6.1.1 Spontane Emission

Nach der klassischen Elektrodynamik geht von jeder *beschleunigten* elektrischen Ladung eine elektromagnetische Welle aus [KP-2-12.4]. Das einfachste klassische Modell einer elektromagnetischen Strahlungsquelle ist ein geladener, *linearer*, *harmonischer Oszillator* (Abb. 6.1).

Die Masse m (Ladung q) bewege sich in z-Richtung unter dem Einfluss einer rücktreibenden Kraft, die proportional zum Abstand z vom Koordinatenursprung O ist. Die allgemeinste mechanische Bewegung des Oszillators, der zur Zeit t = 0 angeregt wird, ist von der Form [KP-1-1.5]

$$z(t) = z_0 \cos(\omega_0 t + \delta) \quad ; \quad t \ge 0 \quad ,$$
 (6.1)

wobei $\omega_0 = \sqrt{f/m}$ (f ist die Federkonstante) die Eigenfrequenz ist und z_0 , δ sind beliebige Konstanten.

Der E-Vektor des Strahlungsfeldes im großen Abstand **r** von der Quelle (in unserem Fall ist $r \gg z_0$) zur Zeit t ist allgemein gegeben durch [KP-2-12.4]



Abb. 6.1. Linearer harmonischer Oszillator.

6.1 Klassische Theorie 263

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = -\frac{\mu_0}{4\pi} \, q \, \frac{\mathbf{b}_{\perp}(t')}{r} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \, q \, \frac{\mathbf{b}(t')\sin\theta}{r} \quad ; \quad t' = t - \frac{r}{c} \quad . \tag{6.2}$$

Der Vektor \mathbf{b}_{\perp} ist die Komponente des Beschleunigungsvektors \mathbf{b} der Ladung q senkrecht zum Vektor \mathbf{r} (siehe Abb. 6.1). Der Beschleunigungsvektor ist zur retardierten Zeit t' = t - r/c zu nehmen. Der Ausdruck (6.2) gilt unter der Voraussetzung, dass die Geschwindigkeit der Ladung $|\mathbf{v}(t)|$ viel kleiner ist als c.

Die momentane Intensität der elektromagnetischen Welle (Energiefluss pro Zeit- und Flächeneinheit) an der Stelle **r** ist allgemein gegeben durch den Poynting-Vektor [KP-2-12.3]

$$\mathbf{S}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E}(\mathbf{r},t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r},t) \quad , \tag{6.3}$$

wobei der **B**-Vektor des Strahlungsfeldes senkrecht zum **E**-Vektor steht und mit diesem in Phase schwingt (**E**, **B**, **r** bilden ein Rechtssystem). Der Betrag des **B**-Feldes ist 1/c (= $\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$) mal Betrag des **E**-Feldes. Somit folgt aus (6.3) der Energiefluss pro Zeit- und Flächeneinheit in **r**-Richtung

$$S(\mathbf{r},t) = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} E^2(\mathbf{r},t) \quad . \tag{6.4}$$

Wir setzen (6.2) in (6.4) ein und erhalten

$$S(r,\theta,t) = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right)^2 \frac{q^2}{r^2} \sin^2\theta \ b^2(t-r/c) \quad .$$
 (6.5)

Nun integrieren wir den Betrag des Poynting-Vektors (6.5) über die Kugel vom Radius r und erhalten die durch die Kugel hindurchtretende Energie pro Zeiteinheit (verifiziere!)

$$\underline{P(r,t)} = \int_0^\pi d\theta \,\mathbf{S}(r,\theta,t) \,r^2 \sin\theta \int_0^{2\pi} d\phi \,\mathbf{b}^2(t-r/c) = \frac{2}{3} \frac{1}{c} \frac{\mu_0}{4\pi} \,q^2 \,\mathbf{b}^2(t-r/c) \tag{6.6}$$

Speziell für die Bewegung (6.1) des linearen harmonischen Oszillators ist

$$b(t) = \ddot{z}(t) = -z_0 \omega_0^2 \cos(\omega_0 t + \delta)$$
 (6.7)

Aus (6.6) folgt mit (6.7) die zeitlich gemittelte, vom Oszillator abgestrahlte (konstante) Leistung

$$P = \frac{1}{3} \frac{1}{c} \frac{\mu_0}{4\pi} q^2 z_0^2 \omega_0^4 \quad . \tag{6.8}$$

Dieses Resultat verletzt den Energiesatz, denn die Leistung (6.8) müsste der Energie des Oszillators entzogen werden. Die Oszillatorenergie müsste also zeitlich entsprechend abnehmen – sie ist aber konstant; aus (6.1) folgt nämlich:

264 6 Elektromagnetische Prozesse

$$E = T + U = \frac{m}{2} z_0^2 \omega_0^2 \sin^2(\omega t + \delta) + \frac{f}{2} z_0^2 \cos^2(\omega t + \delta) = m z_0^2 \omega_0^2 \quad . \quad (6.9)$$

Das vom Oszillator selbst erzeugte Strahlungsfeld muss auf den Oszillator zurückwirken und dessen Bewegung dämpfen, sodass diese in Einklang mit der Energieerhaltung kommt; wir sprechen vom Phänomen der **Strahlungsdämpfung**. Dieser Effekt ist in den obigen Berechnungen offensichtlich vernachlässigt worden.

Zusätzlich zu den äußeren Kräften muss also eine Kraft auf die beschleunigte Ladung q einwirken, die ihre Bewegung modifiziert. Wir versuchen hier diese so genannte *Dämpfungskraft* $\mathbf{F_s}$ ("self force") mit Hilfe der Energiebilanz zu bestimmen.

Nach (6.6) ist die pro Zeiteinheit abgestrahlte Energie gegeben durch

$$P(r,t) = P(t') = \frac{2}{3} \frac{1}{c} \frac{\mu_0}{4\pi} q^2 b^2(t') \quad .$$
(6.10)

Wir bezeichnen im Folgenden die retardierte Zeit t' mit t.

Die ungedämpfte Bewegung (6.1) der Masse m (Ladung q) war durch die Newtonsche Gleichung

$$\mathbf{F} = m \, \mathbf{\dot{v}} \tag{6.11}$$

bestimmt, wobei \mathbf{F} die äußere Kraft darstellt (beim Oszillator ist es die rücktreibende Kraft). Die Bewegungsgleichung einschließlich der Strahlungsdämpfung lautet

$$\mathbf{F} + \mathbf{F}_{\mathbf{s}} = m \, \dot{\mathbf{v}} \quad . \tag{6.12}$$

Zur Bestimmung von $\mathbf{F}_{\mathbf{s}}$ aus der Energiebilanz betrachten wir eine spezielle Klasse von Bewegungen. Wir setzen voraus, dass zwei Zeiten t_1, t_2 existieren, für welche der *Bewegungszustand identisch* ist. Diese Voraussetzung ist erfüllt für jede exakt periodische Bewegung (etwa die ungedämpfte Oszillatorbewegung). Falls $\mathbf{F}_{\mathbf{s}}$ sehr viel kleiner ist als \mathbf{F} (wir wollen dies voraussetzen), wird die Bewegung "quasi-periodisch" und die Voraussetztung bleibt in guter Näherung erfüllt. Für die potentielle Energie der äußeren Kraft gilt dann $U(t_1) = U(t_2)$, und daraus folgt für die Arbeit der äußeren Kraft im Intervall t_1, t_2

$$\int_{t_1}^{t_2} \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} \, dt = U(t_2) - U(t_1) = 0 \quad . \tag{6.13}$$

Die im Intervall t_1, t_2 abgestrahlte Energie muss also gegeben sein durch die Arbeit der Dämpfungskraft allein:

$$\int_{t_1}^{t_2} \mathbf{F}_{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{v} \, dt = -\int_{t_1}^{t_2} P(t) \, dt = -\frac{2}{3} \frac{1}{c} \frac{\mu_0}{4\pi} q^2 \int_{t_1}^{t_2} \dot{\mathbf{v}}^2 \, dt \quad . \tag{6.14}$$

(In (6.14) wurde (6.10) verwendet.) Durch partielle Integration der rechten Seite von (6.14) erhalten wir die Relation

6.1 Klassische Theorie 265

$$\int_{t_1}^{t_2} \mathbf{F_s} \cdot \mathbf{v} \, dt = \frac{2}{3} \frac{1}{c} \frac{\mu_0}{4\pi} q^2 \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{v} \cdot \ddot{\mathbf{v}} \, dt \quad . \tag{6.15}$$

In (6.15) haben wir ausgenutzt, dass der Bewegungszustand identisch ist für t_1 und t_2 . Die Gleichung (6.15) wird gelöst durch die Dämpfungskraft

$$\mathbf{F_s} = \frac{2}{3} \frac{1}{c} \frac{\mu_0}{4\pi} q^2 \, \mathbf{\ddot{v}} \quad , \tag{6.16}$$

die also (für alle Zeiten t) proportional zur zeitlichen Änderung der Beschleunigung ist¹.

Als Nächstes untersuchen wir den Einfluss der Dämpfungskraft auf die Bewegung des (linearen) harmonischen Oszillators. Die Bewegungsgleichung – einschließlich der Dämpfungskraft (6.16) – lautet

$$m\ddot{z} = -m\,\omega_0^2 \,z + \frac{2}{3}\,\frac{1}{c}\,\frac{\mu_0}{4\pi}\,q^2\,\ddot{v} \quad . \tag{6.17}$$

Da die Dämpfungskraft viel kleiner ist als die rücktreibende Kraft, können wir \ddot{v} in (6.17) in guter Näherung durch die ungedämpfte Bewegung ersetzen. Aus (6.1) folgt

$$\ddot{v} = -\omega_0^2 \dot{z}$$
 . (6.18)

Damit wird die Differentialgleichung (6.17) der gedämpften Bewegung

$$\frac{\ddot{z} = -\omega_0^2 z - \gamma \dot{z}}{}, \qquad (6.19)$$

wobei die $D \ddot{a}mpfungskonstante \gamma$ gegeben ist durch

$$\gamma = \frac{2}{3} \frac{1}{c} \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{q^2 \,\omega_0^2}{m} \ll \omega_0 \quad . \tag{6.20}$$

Die Differentialgleichung (6.19) hat die Lösung (verifiziere!)

$$\underline{z(t)} = z_0 \, e^{-\frac{\gamma}{2}t} e^{-i(\omega_0 \, t + \delta)} \quad ; \quad t \ge 0 \quad , \tag{6.21}$$

wobei wir aus Gründen mathematischer Einfachheit die komplexe Schreibweise wählen². Die Bewegung (6.21) ist in Abb. 6.2 dargestellt.

Die Energie des Oszillators, gemittelt über eine Periode $T = \frac{2\pi}{\omega_0}$ des harmonischen Teils, ergibt sich aus (6.21) zu (verifiziere!)

$$E(t) = \frac{m}{2} \left(\dot{z}^2(t) + \omega_0^2 \, z^2(t) \right) = E_0 \, e^{-\gamma t} \quad . \tag{6.22}$$

 $^{^1}$ Eine alternative Methode zur Bestimmung von ${\bf F_s}$ besteht darin, das Strahlungsfeld am Ort der Ladung q direkt heranzuziehen. Das Resultat ist im Wesentlichen dasselbe.

 $^{^2}$ Da alle klassischen Größen *reell* sind (auch das Strahlungsfeld), verstehen wir im Folgenden unter jeder komplexen Größe immer deren Realteil, ohne explizit darauf hinzuweisen.



Abb. 6.2. Bewegung des gedämpften Oszillators.

Die Energie des Oszillators nimmt also zeitlich exponentiell ab; nach der Zeit $1/\gamma$ ist die Energie um den Faktor 1/e abgeklungen. Wir nennen $1/\gamma$ die Lebenszeit des Oszillators.

Schließlich bestimmen wir die Auswirkung der gedämpften Oszillatorbewegung auf das Strahlungsfeld. Wegen des exponentiellen Dämpfungsfaktors in (6.21) ist das Strahlungsfeld *keine* monochromatische Welle. Wir interessieren uns für die zeitlich gemittelte *Intensität* $I(\omega)$ der emittierten Strahlung als Funktion der Frequenz ω . Ausgangspunkt ist die Beschleunigung b im Ausdruck (6.6) für die Strahlungsenergie pro Zeiteinheit. Mit $\gamma \ll \omega_0$ folgt aus (6.21) (für $t \geq 0$)

$$b(t) = \ddot{z}(t) = z_0(-\omega_0^2) e^{-\frac{\gamma}{2}t} e^{-i(\omega_0 t + \delta)} = b_0 e^{-\frac{\gamma}{2}t} e^{-i\omega_0 t} \quad .$$
(6.23)

Mit Hilfe der Fourierschen Integraldarstellung [siehe z.B. KP-1-Anhang D] können wir die Beschleunigung b(t) schreiben als

$$b(t) = \int_{-\infty}^{\infty} a(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad , \qquad (6.24)$$

wobei die Spektralfunktion $a(\omega)$ gegeben ist durch das Integral

$$a(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} b(t) e^{i\omega t} dt = \frac{b_0}{2\pi} \int_{0}^{\infty} e^{-i(\omega_0 - \omega)t} e^{-\frac{\gamma}{2}t} dt$$
$$= \frac{b_0}{2\pi} \frac{1}{i(\omega_0 - \omega) + \gamma/2} \quad .$$
(6.25)

In (6.25) haben wir (6.23) verwendet.

Die gesuchte Intensität $I(\omega)$ ist mit (6.10) und (6.24) proportional zum zeitlich gemittelten Quadrat des Realteils von $a(\omega) e^{-i\omega t}$, also

$$I(\omega) \propto |a(\omega)|^2$$
 . (6.26)

Aus (6.25) folgt mit (6.26) die spektrale Intensitätsverteilung der vom Oszillator emittierten Strahlung:

$$I(\omega) = I_0 \frac{(\gamma/2)^2}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2} \quad , \tag{6.27}$$

Die Intensitätsverteilung (6.27) ist also eine Lorentz-Verteilung, deren Maximum bei $\omega = \omega_0$ liegt, und deren Breite auf halber Höhe durch die Dämpfungskonstante γ gegeben ist (siehe Abb. 6.3).

Mit Hilfe der Planck-Einstein-Beziehung (2.10)

$$E = \hbar \omega \quad , \tag{6.28}$$

und der zunächst postulierten Relation zwischen der natürlichen Linienbreite \varGamma und der Dämpfungskonstanten γ

$$\Gamma = \hbar \gamma \quad , \tag{6.29}$$

ist die spektrale Intensitätsverteilung (6.27) identisch mit der Energieverteilung im Prozess der spontanen Emission von Photonen, wie wir sie erstmals beim Mössbauer-Experiment im Abschn. 2.3.2 (Gleichung 2.87) angetroffen hatten. Dabei ist die mittlere Energie der Photonen gegeben durch

$$\overline{E} = \hbar \,\omega_0 \quad . \tag{6.30}$$

Die klassische Theorie ist also in der Lage, den Prozess der spontanen Emission von Photonen zu erklären. Dabei ist die natürliche Linienbreite



Abb. 6.3. Intensitätsverteilung der Strahlung des gedämpften Oszillators.

 \varGamma eine Folge der Strahlungsdämpfung. Aus der Energie-Zeit-Relation (2.91) folgt mit (6.29)

$$\tau = 1/\gamma \quad , \tag{6.31}$$

d. h. die mittlere Lebensdauer τ des Anfangszustandes ist identisch mit der Lebenszeit des (klassischen) Oszillators (Abklingzeit der Energie). Damit ist auch das exponentielle Zerfallsgesetz in der Zeitmessung "angeregter Zustände", die zur Zeit t = 0 präpariert wurden (Gl. (6.69), Abschn. 2.3.2), mit dem klassischen Modell erklärt.

Die mittlere Energie (6.30) entspricht nach (5.156) der Energiedifferenz benachbarter stationärer Zustände des (quantenmechanischen) Oszillators.

6.1.2 Resonanzfluoreszenzstreuung

Wir betrachten zunächst die Bewegung eines strahlungsgedämpften, linearen harmonischen Oszillators der Masse m (Ladung q, Eigenfrequenz ω_0) unter der Einwirkung einer einlaufenden monochromatischen, in z-Richtung linear polarisierten elektromagnetischen Welle der Frequenz ω (Abb. 6.4).

Die Ruheposition des Oszillators ist der Koordinatenursprung O. Die Bewegungsdifferentialgleichung ist mit (6.19)

$$\ddot{z} = -\omega_0^2 z - \gamma \dot{z} + \frac{qE_0}{m} e^{-i\omega t} \quad , \tag{6.32}$$

wobei $E(t) = E_0 e^{-i\omega t}$ der Betrag des **E**-Vektors der einlaufenden Welle am Ort des Oszillators ist.

Die stationäre Lösung der Gleichung (6.32) ist von der Form



Abb. 6.4. Streuung einer monochromatischen Welle am gedämpften harmonischen Oszillator.

6.1 Klassische Theorie 269

$$z(t) = z_0 \, e^{-i\omega t} \quad . \tag{6.33}$$

Durch Einsetzen von (6.33) in (6.32) findet man

$$z_0 = \frac{qE_0}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma \,\omega} \quad , \tag{6.34}$$

und damit ist die Bewegung des Oszillators

$$z(t) = \frac{qE_0}{m} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma \omega} \quad . \tag{6.35}$$

Nun interessieren wir uns für die vom Oszillator emittierte Strahlung. Wir können den gesamten Prozess als eine Streuung der einfallenden Strahlung am Oszillator auffassen und mittels eines differentiellen Wirkungsquerschnitts $(d\sigma/d\Omega)$ beschreiben.

Im Abschn. 2.1.2 (Abb. 2.5) wurde der differentielle Wirkungsquerschnitt für die Streuung eines klassischen *Teilchens* an einem Streuzentrum definiert. In Analogie dazu definieren wir den Wirkungsquerschnitt für eine (klassische) *Welle* folgendermaßen (Abb. 6.4). Wir ordnen dem Streuzentrum (in unserem Fall dem Oszillator) eine kleine Fläche $d\sigma$ senkrecht zur Fortpflanzungsrichtung der einlaufenden Welle zu. Die Fläche $d\sigma$ soll so bemessen sein, dass die durch sie hindurchdringende, zeitlich gemittelte Intensität der einlaufenden Welle gleich der im großen Abstand r durch die infinitesimale Fläche

$$dF = r^2 \, d\Omega = r^2 \, \sin\theta \, d\theta \, d\phi \tag{6.36}$$

hindurchtretende Intensität der Streuwelle ist. Dies bedeutet mit (6.5) und (6.36)

$$I_0 d\sigma = \overline{S(r, \theta, t)}^{t} dF = I(\theta) d\Omega \quad , \tag{6.37}$$

wobei I_0 die zeitlich gemittelte Intensität der einlaufenden Welle ist (Energiefluss pro Flächen- und Zeiteinheit) und $I(\theta)$ die zeitlich gemittelte Intensität der Streuwelle (Energiefluss pro Flächeneinheit der Einheitskugel und pro Zeiteinheit). Aus (6.4) folgt mit $E(t) = E_0 e^{-i\omega t}$

$$I_0 = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \overline{E^2(t)}^t = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} E_0^2 \frac{1}{2} \quad .$$
 (6.38)

Aus (6.5) folgt

$$I(\theta) = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right)^2 q^2 \sin^2 \theta \ \overline{b^2}^t \quad . \tag{6.39}$$

Die Definitionsgleichung (6.37) liefert den differentiellen Wirkungsquerschnitt für die Streuung am Oszillator in den Winkel θ

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{I(\theta)}{I_0} = 2\left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right)^2 \frac{q^2}{E_0^2} \sin^2\theta \ \overline{b^2}^t \quad . \tag{6.40}$$

270 6 Elektromagnetische Prozesse

In (6.40) wurden die Ausdrücke (6.38) und (6.39) verwendet.

Der totale Wirkungsquerschnitt σ für die Streuung am Oszillator ist mit (6.40)

$$\sigma = \int_0^\pi d\theta \,\sin\theta \,\frac{I(\theta)}{I_0} \int_0^{2\pi} d\phi = \frac{16\pi}{3} \left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right)^2 \frac{q^2}{E_0^2} \,\overline{b^2}^t \quad . \tag{6.41}$$

Schließlich berechnen wir $\overline{b^2}^t$. Aus (6.35) folgt

$$b(t) = \ddot{z}(t) = -\frac{qE_0}{m} \frac{\omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2) - i\gamma\,\omega} e^{-i\omega t} \quad , \tag{6.42}$$

und daraus erhält man (verifiziere!)

$$\overline{b^2}^t = \frac{q^2 E_0^2}{m^2} \frac{\omega^4}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \frac{1}{2} \quad ; \tag{6.43}$$

(6.43) ist der zeitliche Mittelwert des Quadrats des Realteils von b(r). Der totale Wirkungsquerschnitt für Streuung am harmonischen Oszillator, als Funktion der Frequenz ω der einlaufenden Welle, ist mit (6.41) und (6.43)

$$\sigma(\omega) = \frac{8\pi}{3} r_0^2 \frac{\omega^4}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \,\omega^2} \quad , \tag{6.44}$$

wobei die charakteristische Länge definiert ist als³

$$r_0 = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{q^2}{m} \quad . \tag{6.45}$$

Der Wirkungsquerschnitt (6.44) beschreibt insbesondere den Prozess der **Resonanzfluoreszenzstreuung**. Für ω in der Umgebung von ω_0 können wir den ω -abhängigen Faktor von (6.44) schreiben als

$$\frac{\omega^4}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \simeq \frac{\omega_0^2}{4(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2} \quad , \tag{6.46}$$

und damit wird (6.44)

$$\sigma_{res.}(\omega) = \frac{2\pi}{3} r_0^2 \frac{\omega_0^2}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2} \qquad (\omega \sim \omega_0)$$
(6.47)

Der Wirkungsquerschnitt für Resonanzfluoreszenzstreuung ist wiederum eine Lorentz-Verteilung (Abb. 6.3); der ausgeprägte Maximalwert liegt bei $\omega = \omega_0$ und die Breite auf halber Höhe ist die Dämpfungskonstante γ .

³ Im Fall des Oszillatormodells des Elektrons $(q = -e, m = m_e)$ wird $r_0 = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{e^2}{m_e} = 2.82 \times 10^{-15}$ m als klassischer Elektronenradius bezeichnet.

Mit Hilfe der Relation (6.28) bzw. (6.29) können wir die Frequenz ω in die Energie *E* eines einlaufenden "Photons" umwandeln und die Dämpfungskonstante γ in die "natürliche Linienbreite" Γ des "angeregten Zustandes". In diesem Sinn erklärt die *klassische Theorie* auch den Prozess der *Resonanzfluoreszenzstreuung*, wie wir ihn beispielswise an den Na-Atomen (Abschn. 1.4), Abb. 1.11) und im Mössbauer-Effekt an den Atomkernen von ⁵⁷Fe (Abschn. 2.3.2) kennen gelernt haben.

Zusammenfassend können wir feststellen, dass die klassische Theorie das Phänomen der natürlichen Linienbreite, das sich in verschiedenen elektromagnetischen Prozessen manifestiert, erfolgreich beschreiben kann. Was die klassische Theorie dagegen nicht zu leisten vermag, ist die Erklärung typischer quantenphysikalischer Effekte des materiellen Systems wie beispielsweise das Energiespektrum der gebundenen stationären Zustände oder die Berechnung von Lebensdauern quasistationärer Zustände.

Im Sinne einer nächsten Approximation kombinieren wir im folgenden Abschnitt die quantenphysikalische Behandlung des materiellen Systems mit der klassischen Theorie des Strahlungsfeldes.

6.2 Halbklassische Theorie

6.2.1 Elektrische Dipolstrahlung

In diesem Abschnitt beschäftigt uns ausschließlich der Prozess der *spontanen Emission* von Strahlung. Dabei konzentrieren wir uns auf so genannte *elektrische Dipolstrahlung*, genannt E1-Strahlung. Sowohl in den atomaren Systemen als auch im Bereich der Kernphysik dominiert die E1-Strahlung den Prozess der spontanen Emission – es sei denn, sie ist als Folge von so genannten *Auswahlregeln* verboten⁴. Die Auswahlregeln für E1-Strahlung werden hier ebenfalls behandelt.

In der klassischen Behandlung der spontanen Emission (Abschn. 6.1.1) betrachteten wir ausschließlich das einfache Modell des linearen, harmonischen Oszillators einer Punktladung q. Wir wollen zunächst dieses Modell (immer noch im Rahmen der klassischen Elektrodynamik) verallgemeinern, indem wir das materielle System durch eine räumlich ausgedehnte, zeitabhängige elektrische Ladungsverteilung $\rho_{el.}(\mathbf{r}, t)$ charakterisieren. Wir definieren das **elektrische Dipolmoment p** dieser Ladungsverteilung als das Volumenintegral

$$\mathbf{p}(t) \equiv \int \mathbf{r} \,\rho_{el.}(\mathbf{r}, t) \,d^3r \quad , \qquad (6.48)$$

⁴ Diese Einschränkung ist vor allem im Bereich der Kernphysik zu beachten. Im Fall eines Verbots der E1-Strahlung werden im Prozess der spontanen Emission höhere Komponenten der so genannten *Multipolstrahlung* emittiert (M1 (magnetische Dipolstrahlung), E2 (elektrische Quadrupolstrahlung) etc.).

272 6 Elektromagnetische Prozesse

wobei die Gesamtladung des Systems durch

$$q = \int \rho_{el.}(\mathbf{r}, t) \, d^3r \tag{6.49}$$

gegeben ist.

In unserem früheren Modell (6.1) ist die Ladung q auf den in z-Richtung harmonisch schwingenden Ortsvektor **r** konzentriert, und das elektrische Dipolmoment (6.48) ist von der Form

$$\mathbf{p}(t) = q \ (0, 0, z_0 \ \cos(\omega_0 t + \delta)) \quad . \tag{6.50}$$

Wenn eine allgemeine Ladungsverteilung $\rho_{el.}(\mathbf{r}, t)$ ein elektrisches Dipolmoment der Form (6.50) hat, dann hat die Strahlung genau die Eigenschaften, wie wir sie im Abschn. 6.1.1 diskutiert haben. Die *E*1-Strahlung ist also durch das elektrische Dipolmoment (6.48) bestimmt.

Nun behandeln wir das materielle System quantenphysikalisch. Die spontane Emission hat einen Anfangszustand i ("initial"), der zur Zeit t = 0präpariert wird und anschließend zerfällt – unter Emission eines "Photons"– in den Endzustand f ("final"). (Die Zustände i, f könnten beispielsweise quasistationäre Zustände des Wasserstoffatoms sein.) Da wir die Strahlung klassisch behandeln wollen, stellt sich die zentrale Frage: Welches ist der quantenmechanische Ausdruck des zeitabhängigen elektrischen Dipolmoments (6.50)? Aufgrund der Definitionsgleichung (6.48) könnte man versucht sein, das elektrische Dipolmoment zu definieren als

$$\mathbf{p}(t) = q \int \mathbf{r} \left| \Psi_i(\mathbf{r}, t) \right|^2 d^3 r \quad , \tag{6.51}$$

wobei

$$\Psi_i(\mathbf{r},t) = \psi_i(\mathbf{r}) e^{-i\frac{E_i}{\hbar}t} \quad , \tag{6.52}$$

die Wellenfunktion des stationären Zustandes i ist (q ist die Gesamtladung und E_i die Energie). Die Zuordnung (6.51) kann aber niemals auf die spontane Emission führen, denn das elektrische Dipolmoment wäre *zeitunabhängig*, und deshalb würde das System nicht strahlen.

Empirisch wissen wir, dass die Eigenschaften der spontanen Emission sowohl vom Anfangszustand *i* als auch vom Endzustand *f* abhängig sind. Deshalb muss im gesuchten Ausdruck für das Dipolmoment auch der Endzustand *f* eingehen. Nun wollen wir folgende intuitive – aber durch nichts begründete – Vorstellung aufgeben, nämlich die, dass der Übergang des Systems vom Zustand *i* in den Zustand *f* (unter Emission eines Photons) *instantan* erfolgt. Wir führen eine Gesamtwellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ des materiellen Systems ein, die eine Superposition der Wellenfunktionen $\Psi_i(\mathbf{r}, t)$ und $\Psi_f(\mathbf{r}, t)$ der stationären Zustände *i*, *f* darstellt:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = a_i(t) \Psi_i(\mathbf{r},t) + b_f(t) \Psi_f(\mathbf{r},t)$$

= $a_i(t) \psi_i(\mathbf{r}) e^{-i\frac{E_i}{\hbar}t} + b_f(t) \psi_f(\mathbf{r}) e^{-i\frac{E_f}{\hbar}t}$. (6.53)

Im Ausdruck (6.53) bedeutet $|a_i(t)|^2$ die Wahrscheinlichkeit dafür, das materielle System zur Zeit t im Zustand i zu finden; entsprechend ist $|b_f(t)|^2$ die Wahrscheinlichkeit, das System gleichzeitig im Zustand f zu haben. Für alle Zeiten muss gelten

$$|a_i(t)|^2 + |b_f(t)|^2 = 1 \quad , \tag{6.54}$$

und speziell für t = 0 ist

$$|a_i(0)|^2 = 1$$
; $b_f(0) = 0$. (6.55)

Die Relation (6.54) besagt, dass die Wahrscheinlichkeit dafür, das materielle System (für irgendeine Zeit t) entweder im Zustand i oder im Zustand f zu finden, eins ist. Der Ansatz (6.53) ist eine Verallgemeinerung der Relation (4.65), welche ihrerseits für eine zeitunabhängige Wechselwirkung gültig ist. Die Verallgemeinerung besteht darin, dass die Koeffizienten a_i, b_f zeitabhängig sind. (Vergleiche (6.53) beispielsweise mit dem Ausdruck (5.31), der aus (4.65) folgt.)

Mit (6.53) definieren wir den quantenphysikalischen Ausdruck des elektrischen Dipolmoments nun als

$$\mathbf{p}(t) \equiv q \int \mathbf{r} \left| \boldsymbol{\Psi}(\mathbf{r}, t) \right|^2 d^3 r \quad , \tag{6.56}$$

wobe
iqdie Gesamtladung des materiellen Systems ist. Wir setzen
 (6.53) in (6.56) ein und erhalten

$$\mathbf{p} = q \int \mathbf{r} \left[\overline{a_i} \,\overline{\psi_i} \, e^{i\frac{E_i}{\hbar}t} + \overline{b_f} \,\overline{\psi_f} \, e^{i\frac{E_f}{\hbar}t} \right] \left[a_i \psi_i \, e^{-i\frac{E_i}{\hbar}t} + b_f \psi_f \, e^{-i\frac{E_f}{\hbar}t} \right] d^3r$$
$$= q \left(|a_i|^2 \int \mathbf{r} \, |\psi_i|^2 \, d^3r + |b_f|^2 \int \mathbf{r} \, |\psi_f|^2 \, d^3r \right) +$$
$$+ q \left(\int \mathbf{r} \,\overline{a_i} a_f \, \overline{\psi_i} \psi_f \, e^{\frac{i}{\hbar}(E_i - E_f)t} \, d^3r + \int \mathbf{r} \, a_i \overline{a_f} \, \psi_i \overline{\psi_f} \, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_i - E_f)t} \, d^3r \right) (6.57)$$

Wegen der angenommenen Inversionssymmetrie des Problems gilt

$$|\psi_i(-\mathbf{r})|^2 = |\psi_i(\mathbf{r})|^2$$
; $|\psi_f(-\mathbf{r})|^2 = |\psi_f(\mathbf{r})|^2$. (6.58)

Damit verschwinden die ersten beiden Integrale in (6.57) (die Beträge an den Stellen **r** und $-\mathbf{r}$ heben sich auf), und das (reelle!) elektrische Dipolmoment lässt sich schreiben als

$$\mathbf{p}(t) = 2 \operatorname{Re}\left\{\overline{a_i}(t) \, b_f(t) \, \mathbf{p}_{if} \, e^{i\omega_0 t}\right\}$$
(6.59)

wobei \mathbf{p}_{if} definiert ist als das Raumintegral (genannt *Überlappungsintegral*)

$$\mathbf{p}_{if} = q \int \mathbf{r} \,\overline{\psi_i}(\mathbf{r}) \,\psi_f(\mathbf{r}) \,d^3r \tag{6.60}$$

274 6 Elektromagnetische Prozesse

und

$$\hbar\,\omega_0 = E_i - E_f \tag{6.61}$$

ist die (mittlere) Energie des Photons. Wegen des zeitabhängigen Faktors $\overline{a_i}(t) b_f(t)$ ist das Dipolmoment (6.59) nur dann verschieden von null, wenn beide Koeffizienten ungleich null sind, d. h. wenn beide Zustände (*i* und *f*) beitragen, und nur in diesem Fall strahlt das System.

Mit unserem einfachen halbklassischen Ansatz wird es nicht möglich sein, die explizite Zeitabhängigkeit der Koeffizienten $a_i(t)$, $b_f(t)$ zu bestimmen. Wir werden aber in der Lage sein, erstens eine Abschätzung für die mittlere Lebensdauer τ der spontanen Emission elektrischer Dipolstrahlung zu geben und zweitens Auswahlregeln für elektrische Dipolübergänge herzuleiten. Das Überlappungsintegral (6.60) enthält die Abhängigkeit von Anfangsund Endzustand und ist ein Maß für die Amplitude des mit der Frequenz ω_0 oszillierenden Dipolmoments. Die Auswahlregeln werden wir allein aus der Struktur von \mathbf{p}_{if} herleiten.

Mittlere Lebensdauer

Wie schon im Abschn. 6.1.1 setzen wir voraus, dass die Strahlungsdämpfung schwach sei. Das bedeutet, dass die zeitliche Änderung des Faktors $\overline{a_i}(t) b_f(t)$ in (6.59) "langsam" erfolgt; dieser Faktor ist praktisch konstant während der Periode $T = 2\pi/\omega_0$ des harmonischen Anteils.

Wir suchen eine Abschätzung für die mittlere Lebensdauer τ der spontanen Emission. Dazu nehmen wir näherungsweise an

$$\overline{a_i}(t) b_f(t)| \simeq 1 \quad \text{für} \quad 0 < t \le \tau$$

$$\overline{a_i}(t) b_f(t) = 0 \quad \text{sonst} \quad . \tag{6.62}$$

Damit nimmt das Dipolmoment (6.59) die einfache Form des Dipolmoments eines linearen harmonischen Oszillators an, der in Richtung des \mathbf{p}_{if} -Vektors schwingt:

$$p(t) = 2\mathbf{p}_{if} \cos\left(\omega_0 t + \delta\right) \quad . \tag{6.63}$$

 $(\mathbf{p}_{if}$ ist der Betrag des \mathbf{p}_{if} -Vektors.) Nun können wir die Resultate von Abschn. 6.1.1 heranziehen.

Aus (6.8) folgt für die abgestrahlte Leistung des Oszillators ($2p_{if}$ entspricht dem Produkt qz_0)

$$P = \frac{4}{3} \frac{1}{c} \frac{\mu_0}{4\pi} p_{if}^2 \omega_0^4 \quad . \tag{6.64}$$

Da unser Oszillator nur während der Zeit τ schwingt, ist die gesamte abgestrahlte Energie

$$E = P \tau = \frac{4}{3} \frac{1}{c} \frac{\mu_0}{4\pi} p_{if}^2 \omega_0^4 \tau \quad . \tag{6.65}$$

Diese Energie muss aber quantenphysikalisch gleich der Energie
differenz $E_i - E_f$ zwischen Anfangs- und Endzustand sein. Mit (6.61) folgt dann aus (6.65)

$$\frac{4}{3} \frac{1}{c} \frac{\mu_0}{4\pi} p_{if}^2 \,\omega_0^4 \,\tau = E_i - E_f = \hbar \,\omega_0 \quad . \tag{6.66}$$

Wir lösen die Gl. (6.66) nach τ auf und erhalten

$$\tau = \frac{3}{4} \frac{c\hbar}{\frac{\mu_0}{4\pi} p_{if}^2 \omega_0^3} \quad . \tag{6.67}$$

Die mittlere Lebensdauer ist also umgekehrt proportional zur dritten Potenz der Photonenergie und zum Betragsquadrat des Überlappungsintegrals. Verschwindet das Überlappungsintegral, dann ist der Anfangszustand stationär bezüglich der elektrischen Dipolstrahlung⁵.

Als **Beispiel** wählen wir das *Wasserstoffatom*. Mit Hilfe der bekannten Wellenfunktionen der stationären Zustände (Abschn. 5.2.7) können wir das Überlappungsintegral p_{if} für bestimmte Strahlungsübergänge (siehe Abb. 5.31) ausrechnen (Aufgabe 62).

Wir begnügen uns hier mit einer groben Abschätzung der mittleren Lebensdauer τ , die wir anschließend mit exakten Werten konfrontieren. Wir schreiben

$$2 p_{if} = |-e| z_0 \quad ; \quad z_0 \approx 1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m} \quad ,$$
 (6.68)

entsprechend der Größenordnung der atomaren Dimensionen (der Bohrsche Radius des Zustandes n ist $a_n = a_0 n^2 = n^2 \times 0.53 \times 10^{-10} \text{ m}$). Für den (2p-1s)-Übergang beispielsweise ist nach (5.226)

$$\hbar \,\omega_0 = \frac{3}{8} m_e c^2 \alpha^2 \quad . \tag{6.69}$$

Aus (6.69) folgt

$$\omega_0 = 1.56 \times 10^{16} \,\mathrm{s}^{-1} \quad . \tag{6.70}$$

Wir setzen (6.68) und (6.70) in (6.67) ein und erhalten (verifiziere!)

$$\tau = 0.97 \times 10^{-9} \,\mathrm{s} \quad . \tag{6.71}$$

Der Wert (6.71) ist nach (6.70) sehr viel größer als die Periode $T = 2\pi/\omega_0$ der Oszillation – im Einklang mit der Annahme der schwachen Dämpfung.

In Tabelle 6.1 sind die exakten (experimentell bestätigten) Werte der mittleren Lebensdauern der in Abb. 5.31 eingezeichneten Strahlungsübergänge angegeben.

Die grob geschätzte Lebensdauer (6.71) ist dem exakten Wert erstaunlich nahe.

 $^{^{5}}$ Die Formel (6.67) entspricht dem *exakten* quantenphysikalischen Resultat!

Tabelle 6.1. Mittlere Lebensdauern τ von elektrischen Dipolübergängen im Wasserstoffatom [*H.G. Kuhn*, Atomic Spectra, Longmans (1964)].

Übergang	Lebensdauer $\tau \ [10^{-8} s]$
$2p \rightarrow 1s$	0.16
$3p \rightarrow 1s$	0.61
$3s \rightarrow 2p$	16
$\rm 3d \rightarrow 2p$	1.54

Auswahlregeln

Wir werden die Auswahlregeln für elektrische Dipolstrahlung herleiten, wobei wir vom *Wasserstoffatom* ausgehen wollen.

<u>Die m-Auswahlregel</u>. Die Komponenten des Überlappungsintegrals (6.60) bezeichnen wir mit

$$\mathbf{p} \equiv \left(p_{if}^{(x)}, p_{if}^{(y)}, p_{if}^{(z)}\right) \quad , \tag{6.72}$$

und arbeiten in Kugelkoordinaten:

$$\mathbf{r} = (r \sin \theta \cos \phi, r \sin \theta \sin \phi, r \cos \theta)$$

$$d^{3}r = r^{2} dr \sin \theta d\theta d\phi \quad . \tag{6.73}$$

Die Wellenfunktionen der (stationären) Zustände des Wasserstoffatoms sind von der Form (siehe (B.66) und (B.26))

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta,\phi) = R_{nl}(r) N_{lm} P_{l|m|}(\cos\theta) e^{im\phi} \quad , \quad (6.74)$$

wobei die Quantenzahlen (nlm) gegeben sind durch

$$n = 1, 2, 3, \dots$$
; $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$; $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$. (6.75)

Die Größen R_{nl} , N_{lm} und $P_{l|m|}$ in (6.74) sind reell. Mit (6.73) und (6.74) erhalten wir aus (6.60) z. B. für die x-Komponente des Überlappungsintegrals

$$p_{if}^{(x)} = q N_{l_i m_i} N_{l_f m_f} \int_0^\infty R_{n_i l_i} R_{n_f l_f} r^3 dr \int_0^\pi P_{l_i |m_i|} P_{l_f |m_f|} \sin^2 \theta \, d\theta$$
$$\times \int_0^{2\pi} \cos \phi \, e^{i(m_f - m_i)\phi} \, d\phi \quad . \tag{6.76}$$

Wir denken uns die Integrationen über r und θ ausgeführt und schreiben dann (6.76) in der Form

$$p_{if}^{(x)} = A_{if} \int_0^{2\pi} \cos \phi \, e^{i(m_f - m_i)\phi} \, d\phi$$

= $\frac{1}{2} A_{if} \int_0^{2\pi} \left[e^{i(m_f - m_i + 1)\phi} + e^{i(m_f - m_i - 1)\phi} \right] \, d\phi$, (6.77)

wobei A_{if} eine reelle Konstante ist. (In (6.77) haben wir $\cos \phi = \frac{1}{2} \left(e^{i\phi} + e^{-i\phi} \right)$ verwendet.)

Auf analoge Weise lassen sich die übrigen beiden Komponenten des Überlappungsintegrals schreiben als (verifiziere!)

$$p_{if}^{(y)} = A_{if} \int_0^{2\pi} \sin \phi \, e^{i(m_f - m_i)\phi} \, d\phi$$

= $-\frac{i}{2} A_{if} \int_0^{2\pi} \left[e^{i(m_f - m_i + 1)\phi} - e^{i(m_f - m_i - 1)\phi} \right] \, d\phi$, (6.78)

und

$$p_{if}^{(z)} = B_{if} \int_0^{2\pi} e^{i(m_f - m_i)\phi} \, d\phi \quad , \tag{6.79}$$

wobei B_{if} wiederum eine (andere) reelle Konstante ist.

Alle Integrale der Komponenten $p_{if}^{(x)}$, $p_{if}^{(y)}$ und $p_{if}^{(z)}$ in (6.77), (6.78) bzw. (6.79) sind von der Form

$$\int_{0}^{2\pi} e^{i\,k\,\phi}\,d\phi \quad , \tag{6.80}$$

wobei k eine ganze Zahl bedeutet. Der Wert des Integrals (6.80) ist nur dann von null verschieden, wenn k verschwindet; es gilt

$$\int_{0}^{2\pi} e^{i k \phi} d\phi = \begin{cases} 2\pi & \text{für } k = 0\\ 0 & \text{für } k \neq 0 \end{cases}.$$
 (6.81)

Wir stellen nun die Frage: Welches sind die Bedingungen dafür, dass mindestens eine Komponente des Überlappungsintegrals ungleich null ist? Eine dieser Bedingungen muss erfüllt sein, damit die spontane Emission elektrischer Dipolstrahlung zwischen den Zuständen i und f überhaupt vorkommen kann, denn das elektrische Dipolmoment $\mathbf{p}(t)$ ist nach (6.59) nur dann ungleich null, wenn das Überlappungsintegral \mathbf{p}_{if} nicht verschwindet.

Die Überprüfung der Gl. (6.79) zeigt, dass $p_{if}^{(z)}$ nur dann ungleich null ist, wenn gilt

$$m_f = m_i \quad . \tag{6.82}$$

Aus (6.81) folgt dann für diesen Fall

$$p_{if}^{(z)} = 2\pi B_{if} \quad , \tag{6.83}$$

und mit (6.77) und (6.78)

$$p_{if}^{(x)} = p_{if}^{(y)} = 0$$
 . (6.84)

Die Situation $m_f = m_i$ ist in der ersten Zeile der Tabelle 6.2 zusammengefasst.

Tabelle 6.2. Magnetische Quantenzahlen m_f des Endzustandes, für welche mindestens eine Komponente des Überlappungsintegrals ungleich null ist.

m_{f}	$p_{if}^{(x)}$	$p_{if}^{(y)}$	$p_{if}^{(z)}$
m_i	0	0	$2\pi B_{if}$
$m_i + 1$	πA_{if}	$i \pi A_{if}$	0
$m_i - 1$	πA_{if}	$-i\pi A_{if}$	0

Die Überprüfung der Gleichungen (6.77) und (6.78) zeigt, dass es genau zwei Situationen gibt, für welche die Komponenten $p_{if}^{(x)}$ und $p_{if}^{(y)}$ ungleich null sind, nämlich

$$m_f = m_i \pm 1 \quad . \tag{6.85}$$

Diese beiden Fälle sind in der zweiten und dritten Zeile der Tabelle 6.2 dargestellt, wobei wiederum die entsprechenden Komponenten des Überlappungsintegrals aufgeführt sind (verifiziere!).

Wir können den gesamten Sachverhalt als m-Auswahlregel formulieren:

Spontane Emission elektrischer Dipolstrahlung von einem Anfangszustand der magnetischen Quantenzahl m_i in einen Endzustand der Quantenzahl m_f ist nur möglich, falls eine der Bedingungen

$$\Delta m \equiv m_f - m_i = 0, \pm 1 \tag{6.86}$$

erfüllt ist.

Wir haben die Auswahlregel (6.86) am Beispiel des Wasserstoffatoms hergeleitet. Dazu wurde ausschließlich die ϕ -Abhängigkeit

$$e^{i\,m\,\phi} \tag{6.87}$$

der Wellenfunktionen verwendet. Wie wir erstmals im Abschn. 2.2.3 (und anschließend in den Abschnitten 3.3.4, 4.3 und 5.2.7) gesehen haben, ist die harmonische ϕ -Abhängigkeit der Objekte – einschließlich der Abhängigkeit von der magnetischen Quantenzahl m (6.87) – Ausdruck der Rotationssymmetrie bezüglich der z-Achse. Es erstaunt uns deshalb nicht zu erfahren, dass die Auswahlregel eine viel allgemeinere Gültigkeit beansprucht. Sie gilt nämlich für beliebige stationäre Zustände, welche Eigenzustände der z-Komponente J_z des Drehimpulses sind⁶. Damit hat die Auswahlregel (6.86) universelle Bedeutung in der Quantenphysik.

Die l-Auswahlregel. Zuerst verwenden wir die *Inversionssymmetrie* des Problems, die sich dadurch manifestiert, dass die Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms *Eigenzustände der Parität* sind (5.236). Bei der Inversion der Koordinaten

⁶ Sie gilt auch für beliebige Komponenten der Multipolstrahlung.
$$\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$$
 (6.88)

transformieren sich die Wellenfunktionen nach (5.236) folgendermaßen

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) \to (-1)^l \,\psi_{nlm}(\mathbf{r})$$
 . (6.89)

Der Integrand des Überlappungsintegrals (6.60) transformiert sich damit folgendermaßen:

$$F(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{r} \,\overline{\psi_i}(\mathbf{r}) \,\psi_f(\mathbf{r}) \to -(-1)^{l_i + l_f} F(\mathbf{r}) \quad . \tag{6.90}$$

Damit das Überlappungsintegral von null verschieden ist, muss $(l_i + l_f)$ eine ungerade ganze Zahl sein. Wenn l_i gerade ist, muss l_f ungerade sein, und umgekehrt. Dies bedeutet

$$\Delta l \equiv l_f - l_i = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \dots \tag{6.91}$$

Als Zweites verwenden wir die Drehimpulserhaltung im Prozess der spontanen Emission elektrischer Dipolstrahlung. Man kann zeigen, dass die Multipolkomponenten der Strahlung durch den Gesamtdrehimpuls charakterisiert sind, den sie bezüglich des Schwerpunkts des materiellen Systems wegtragen. Die Dipolstrahlung trägt eine Einheit \hbar von Drehimpuls weg. (Die Quadrupolstrahlung trägt zwei Einheiten \hbar weg etc.) Deshalb ist eine Änderung des Drehimpulses von $\Delta l = l_f - l_i$, die dem Betrag nach größer ist als eine Einheit, aus Gründen der Drehimpulserhaltung ausgeschlossen. Somit lautet mit (6.91) die **l-Auswahlregel**:

Die spontane Emission elektrischer Dipolstrahlung von einem Anfangszustand der Drehimpulsquantenzahl l_i in einen Endzustand der Quantenzahl l_f ist nur möglich, falls eine der Bedingungen

$$\Delta l = l_f - l_i = \pm 1 \tag{6.92}$$

erfüllt ist.

Die in der Abb. 5.31 eingezeichneten Strahlungsübergänge erfüllen alle die l-Auswahlregel (6.92).

Wie wir gesehen haben ist die *l*-Auswahlregel eine Folge der allgemeinen Prinzipien der Inversionssymmetrie und der Drehimpulserhaltung. Deshalb gilt auch diese Auswahlregel allgemein.

Drehimpulseigenschaften

Im Rahmen unserer halbklassischen Theorie der spontanen Emission elektrischer Dipolstrahlung können wir detaillierte Aussagen machen über die Drehimpulseigenschaften der emittierten Photonen. Wir illustrieren diese Zusammenhänge anhand eines einfachen **Beispiels**, nämlich mit dem Zeeman-Effekt des (2p - 1s)-Übergangs im Wasserstoffatom⁷.

In Abb. 6.5 ist die Energieaufspaltung von Anfangs- und Endzustand dargestellt.

Ausgangspunkt zur Berechnung der Energien ist der (klassische) Ausdruck für die potentielle Energie (2.168)

$$U = -\overrightarrow{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\mu_{z}B \quad , \tag{6.93}$$

wobe
i μ_z die Komponente des magnetischen Moments des Systems in Richtung des B-Feldes ist. Nach dem Parallelitätsgesetz (2.162) gilt

$$\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{z}} = -\frac{e}{2m_e} \, \boldsymbol{J}_{\boldsymbol{z}} \quad , \tag{6.94}$$

wobe
i $\boldsymbol{J_z}$ die entsprechende Komponente des Drehimpulses darstellt. In (6.94) wurde der g-Faktor gleich eins gesetzt (klassisches Kreisbahnmodell). Aus (6.93) erhalten wir mit (6.94) und (2.148)

$$E_m = \frac{e\hbar}{2m_e} \, m \, B = \mu_B \, m \, B \quad , \tag{6.95}$$

wobei μ_B das Bohrsche Magneton ist.

⁷ Wir vernachlässigen (genauso wie im ganzen Kap. 5) die Effekte des Eigendrehimpulses (Spin) des Elektrons. Damit beschränken wir uns auf den so genannten "normalen" Zeeman-Effekt.



Abb. 6.5. Die Energien der 2p- und 1s-Zustände des Wasserstoffatoms im Magnetfeld.

Der 1*s*-Zustand (l = 0) ist also nicht beeinflusst vom **B**-Feld, und der 2*p*-Zustand (l = 1) spaltet in drei äquidistante Energieniveaus auf (Abb. 6.5).

Die drei in Abb. 6.5 eingezeichneten spontanen Dipolübergänge sind sowohl mit der m-Auswahlregel (6.86) als auch mit der l-Auswahlregel (6.92) verträglich.

Zum Studium der entsprechenden Strahlungseigenschaften benötigen wir die Komponenten des Überlappungsintegrals \mathbf{p}_{if} (6.60). Da die magnetische Wechselwirkung (6.93) sehr viel kleiner ist als die Coulomb-Kraft, können wir dazu die "ungestörten" Wellenfunktionen (6.74) des Wasserstoffatoms verwenden. Es ist zweckmäßig, die Wellenfunktionen in der Form

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{6.96}$$

anzusetzen, wobei die normierten Kugelfunktionen mit (B.31) gegeben sind durch

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad ; \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \quad ; \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta \, e^{\pm i\phi} \quad .$$
(6.97)

Die drei Strahlungsübergänge (Abb. 6.5) sind eindeutig charakterisiert durch die magnetischen Quantenzahlen $m_i (= 0, \pm 1)$ des Anfangszustandes. Deshalb bezeichnen wir hier das Überlappungsintegral mit

$$\mathbf{p}_{if} \equiv \mathbf{p}_{m_i} \quad . \tag{6.98}$$

Zuerst behandeln wir den Übergang $\underline{m_i = 0}$. Aus der ersten Zeile der Tabelle 6.2 folgt, dass in diesem Fall nur die z-Komponente des Überlappungsintegrals ungleich null ist. Aus (6.60) folgt mit (6.73), (6.96), (6.97) und (6.98) (q = -e)

$$p_0^{(z)} = -e \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \int_0^\infty R_{21} R_{10} r^3 dr \int_0^\pi \sin \theta \, \cos^2 \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$
$$= \frac{-e}{\sqrt{3}} \int_0^\infty R_{21} R_{10} r^3 dr \equiv C \quad . \tag{6.99}$$

(C ist eine reelle Konstante.)

Nun behandeln wir die beiden Übergänge $\underline{m_i = \pm 1}$ gemeinsam. Die x-Komponente des Überlappungsintegrals ist

$$p_{\pm 1}^{(x)} = \pm e \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^\infty R_{21} R_{10} r^3 dr \int_0^\pi \sin^3 \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} \cos \phi \, e^{\mp i\phi} \, d\phi$$
$$= \pm \frac{e}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^\infty R_{21} R_{10} r^3 \, dr = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} C \quad . \tag{6.100}$$

In (6.100) wurde (6.99) verwendet. Analog erhalten wir für die *y*-Komponente (verifiziere!)

Tabelle 6.3. Überlappungsintegrale für die drei Komponenten des Zeeman-Effekts im (2p - 1s)-Übergang.

m_i	$p_{m_i}^{(x)}$	$p_{m_i}^{(y)}$	$p_{m_i}^{(z)}$
0	0	0	C
1	$-\frac{1}{\sqrt{2}}C$	$\frac{i}{\sqrt{2}}C$	0
-1	$\frac{1}{\sqrt{2}}C$	$\frac{i}{\sqrt{2}}C$	0

$$p_{\pm 1}^{(y)} = \pm e \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^\infty R_{21} R_{10} r^3 dr \int_0^\pi \sin^3 \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} \sin \phi \, e^{\mp i\phi} \, d\phi$$
$$= -\frac{e}{\sqrt{3}} \frac{i}{\sqrt{2}} \int_0^\infty R_{21} R_{10} r^3 \, dr = \frac{i}{\sqrt{2}} C \quad . \tag{6.101}$$

Die Auswertung der Tabelle 6.2 zeigt, dass die z-Komponenten verschwinden.

Wir fassen die Resultate (6.99), (6.100) und (6.101) in Tabelle 6.3 zusammen.

Im nächsten Schritt berechnen wir aus den Überlappungsintegralen die (reellen) elektrischen Dipolmomente (6.59)

$$\mathbf{p}(t) \equiv \mathbf{p}_{m_i}(t) \tag{6.102}$$

für die drei Zeeman-Übergänge m_i . Dazu verwenden wir wiederum die Näherung (6.62), die sich bei der Berechnung der mittleren Lebensdauer so sehr bewährt hatte.

Aus (6.59) folgt mit (6.62) und den Werten der Tabelle 6.3, z. B. für $m_i=0$

$$\mathbf{p}_0(t) = 2C(0,0,1) \cos \omega_0 t \quad ; \quad 0 \le t \le \tau \quad . \tag{6.103}$$

Analog erhalten wir für den $(m_i = +1)$ -Übergang

$$\mathbf{p}_{+1}(t) = \sqrt{2} C \operatorname{Re}\left\{ \left(-1, e^{i\frac{\pi}{2}}, 0\right) e^{i\omega_0 t} \right\} = -\sqrt{2} C \left(\cos \omega_0 t, \sin \omega_0 t, 0\right); \ 0 \le t \le \tau ,$$
(6.104)

und schließlich für $m_i = -1$ (verifiziere!)

$$\mathbf{p}_{-1}(t) = -\sqrt{2} C \left(-\cos \omega_0 t, \sin \omega_0 t, 0 \right) \quad ; \quad 0 \le t \le \tau \quad . \tag{6.105}$$

Im Sinne der halbklassischen Strahlungstheorie haben die quantenmechanisch berechneten (zeitabhängigen) Dipolmomente $\mathbf{p}_{m_i}(t)$ folgende Bedeutung: Man suche das einfachste klassische Modell, dessen elektrisches Dipolmoment identisch ist mit $\mathbf{p}_{m_i}(t)$ und berechne das resultierende Strahlungsfeld. Seine Eigenschaften – quantenphysikalisch übersetzt – liefern dann die Eigenschaften des im Prozess der spontanen Emission erzeugten Photons.

Im Fall des $(m_i = 0)$ -Übergangs ist offensichtlich der in z-Richtung schwingende, lineare harmonische Oszillator das gesuchte klassische Modell (Abschn. 6.1.1). Daraus ziehen wir beispielsweise den Schluss, dass die Emissionswahrscheinlichkeit des Photons in z-Richtung verschwinden muss.

Nun suchen wir das einfachste klassische Modell, das den $(m_i = \pm 1)$ -Übergängen entspricht. Aus (6.104) folgt, dass der \mathbf{p}_{+1} -Vektor konstanten Betrag hat und in der (\mathbf{x}, \mathbf{y}) -Ebene eine gleichförmige Kreisbewegung mit der Winkelgeschwindigkeit ω_0 (im Gegenuhrzeigersinn) ausführt (Abb. 6.6).



Abb. 6.6. Elektrisches Dipolmoment der $(m_i = \pm 1)$ -Übergänge des Zeeman-Effekts.

Analoges gilt für den \mathbf{p}_{-1} -Vektor, wobei in diesem Fall der Drehsinn in Uhrzeigerrichtung erfolgt. Das entsprechende klassische Modell ist natürlich eine Punktladung (q = -e), die sich in der (\mathbf{x}, \mathbf{y}) -Ebene mit der Winkelgeschwindigkeit ω_0 auf einem Kreis bewegt.

Die interessanten Schlussfolgerungen bezüglich der Eigenschaften der Photonen wollen wir an einem konkreten **Experiment** diskutieren. (Abb. 6.7).

Wasserstoffatome im angeregten 2p-Zustand befinden sich im (homogenen) **B**-Feld eines Elektromagneten. Wir messen die Energien (oder Wellenlängen) der (2p - 1s)-Photonen und können dadurch die drei Übergänge zwischen den magnetisch aufgespaltenen *m*-Zuständen einzeln untersuchen.

Wir beobachten die Photonen einerseits in **B**-Feldrichtung (z-Richtung) und stellen fest, dass nur die beiden Übergänge $m_i = \pm 1$ vorkommen (Abb. 6.7). Erklärung: Der Übergang aus dem Zustand $m_i = 0$ wird durch den in z-Richtung schwingenden harmonischen Oszillator erzeugt. Diese Schwingung besitzt keine Beschleunigungskomponente senkrecht zur Beobachtungsrichtung (Abb. 6.1), und damit existiert nach (6.2) kein Strahlungsfeld: Die Emissionswahrscheinlichkeit verschwindet.



Abb. 6.7. Experiment zum Zeeman-Effekt des (2p - 1s)-Übergangs im Wasserstoffatom.

Der Übergang aus dem Zustand $m_i = -1$ wird durch das im Uhrzeigersinn rotierende Elektron erzeugt (Abb. 6.6). Die entsprechende elektromagnetische Welle ist *rechts*zirkular polarisiert (Abschn. 3.1.2). Das bedeutet, dass das zugeordnete Photon in einem *Eigenzustand der Drehimpulskomponente* in Bewegungsrichtung ist (Abschn. 3.2.4); der Drehimpuls für rechtszirkular polarisierte Photonen ist nach (3.39)

$$J_z = -\hbar \quad . \tag{6.106}$$

Dies aber entspricht genau der *Drehimpulserhaltung* im quantenphysikalischen Prozess der spontanen Emission eines Photons vom Zustand $m_i = -1$ nach $m_f = 0$!

Die Drehimpulserhaltung gilt auch für den Übergang von $m_i = +1$ nach $m_f = 0$; in diesem Fall hat das Photon den Drehimpuls $J_z = +\hbar$.

Andererseits beobachten wir im Experiment der Abb. 6.7 Photonen, die senkrecht zum **B**-Feld emittiert werden. Hier existieren alle drei Übergänge. Die drei Typen von Photonen sind alle in einem Zustand *linearer* Polarisation – mit teilweise unterschiedlicher Polarisationsrichtung. Beim Übergang aus dem Zustand $m_i = 0$ ($\Delta m = 0$) ist das Photon in **B**-Feldrichtung linear polarisiert, bei den beiden Übergangen mit $\Delta m = \pm 1$ dagegen senkrecht zur **B**-Richtung. Erklärung: Der Beschleunigungsvektor des *linearen* Oszillators (Übergang $\Delta m = 0$) liegt immer in z-Richtung; die Komponente des Beschleunigungsvektors senkrecht zur Beobachtungsrichtung für die anderen beiden Übergänge liegt immer in der x-Richtung (Abb. 6.7).

Würden wir den $(\Delta m = 0)$ -Übergang in einer *beliebigen* Richtung **r** beobachten, dann wäre das Photon im Allgemeinen in einem Zustand *linea*rer Polarisation, dessen Polarisationsrichtung in der (z-**r**)-Ebene liegt. Die $(\Delta m = \pm 1)$ -Übergänge dagegen erzeugen im Allgemeinen Photonen, die sich in einem Zustand *elliptischer* Polarisation befinden (Aufgabe 63).

Neu an diesen Erkenntnissen ist der Zusammenhang zwischen den Wellenfunktionen von Anfangs- und Endzustand des materiellen Systems und den Drehimpulseigenzuständen des emittierten Photons: Letztere können im Rahmen der halbklassischen Theorie aus den Wellenfunktionen bestimmt werden. Man kann auch die räumlichen Intensitätsverteilungen der Photonen berechnen (Aufgabe 63).

6.2.2 Der Laser

Wie schon der Name sagt ("Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation"), spielt beim Laser der Prozess der stimulierten oder induzierten Emission die zentrale Rolle.

Albert Einstein hat diesen Prozess 1917 durch eine interessante Überlegung vorausgesagt⁸. Einstein erkannte, dass das Plancksche Gesetz (Abschn. 1.2), also die spektrale Energiedichte des Strahlungsfeldes im Hohlraum, sich interpretieren lässt als Ausdruck des Gleichgewichts zwischen Emissionsund Absorptionsprozessen von Strahlung an den Atomen oder Molekülen im Kontakt mit dem Strahlungsfeld. Als materiellen Teil des Systems können wir uns beispielsweise die Ammoniakmoleküle des Masers (Abb. 5.27) vorstellen, die sich im Innern des Resonators in dessen Strahlungshohlraum befinden. Die zwei relevanten Energiezustände des materiellen Systems (in unserem Beispiel sind es der Grundzustand und der erste angeregte Zustand von Ammoniak) bezeichnen wir allgemein mit 1 und 2; die Energiewerte sind E_1 bzw. E_2 ($E_2 > E_1$) (Abb. 6.8(a)). Die Besetzungszahlen der beiden Zustände im Strahlungshohlraum seien N_1 bzw. N_2 .

Der Prozess der *spontanen Emission* (Abb. 6.8(a)) ist unabhängig vom Strahlungsfeld. Der Übergang vom Zustand **2** in den Zustand **1** erfolgt unter Emission eines Photons der Energie

$$h\nu = E_2 - E_1 \quad . \tag{6.107}$$

Im Prozess der Absorption wird ein Photon (der Energie $h\nu$) aus dem Strahlungsfeld von einem der Systeme im Zustand 1 absorbiert (Abb. 6.8(b)); dieses wird dabei in den Zustand 2 übergeführt. Neu ist der Prozess der *induzierten Emission* (Abb. 6.8(c)), der ebenfalls an die Anwesenheit eines Strahlungsfeldes gebunden ist. Ein System im Zustand 2 emittiert ein durch das Strahlungsfeld "induziertes" Photon der Energie $h\nu$ und geht in den Zustand 1 über.

Wir zeigen nun, dass das Postulat der induzierten Emission zwingend ist, falls wir verlangen, dass die spektrale Energiedichte $\rho(\nu, T)$ des Strahlungsfeldes durch das Plancksche Gesetz (1.1)

⁸ Unsere Darstellung entspricht nicht in allen Punkten der historischen Argumentation (siehe dazu Fußnote 1-3, A. Pais, S.407 ff).

286 6 Elektromagnetische Prozesse



Abb. 6.8. Strahlungsprozesse eines Zweiniveausystems E_1 , E_2 im elektromagnetischen Feld.

$$\rho(\nu,T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$
(6.108)

gegeben ist.

Eine Gesamtheit von identischen Zweiniveausystemen – mit den Besetzungszahlen N_1 , N_2 – befinde sich in einem Strahlungsfeld der Energiedichte $\rho(\nu)$ (Energie pro Volumeneinheit und Frequenzeinheit). Wir betrachten die Zahl der Übergänge zufolge der drei Prozesse.

Die Zahl der Übergänge vom Zustand 2 in den Zustand 1 durch spontane Emission im Zeitintervall dt können wir schreiben als

$$Z_{2 \to 1}^{(\text{spont.})} dt = A_{21} N_2 dt \quad , \tag{6.109}$$

wobei $Z_{2\to1}^{(\text{spont.})}$ die Zahl der Übergänge pro Zeiteinheit bedeutet, und A_{21} ist die mittlere Zerfallswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit und heißt *Einstein-Koeffizient der spontanen Emission*. Im Abschn. 2.3.2 hatten wir A_{21} als "Zerfallskonstante λ " bezeichnet; es gilt

$$A_{21} \equiv \lambda = 1/\tau \quad , \tag{6.110}$$

wobei die mittlere Lebensdauer τ durch (6.67) gegeben ist.

Die Zahl der Absorptionsprozesse im Zeitintervall dt ist einerseits proportional zur Zahl N_1 der Systeme im Zustand 1 und andererseits proportional zur Energiedichte $\rho(\nu)$, also

$$Z_{1\to2}^{(\text{abs.})} dt = B_{12} N_1 \rho(\nu) dt \quad . \tag{6.111}$$

Hier bedeutet $Z_{1\rightarrow 2}^{(abs.)}$ wiederum die Zahl der Übergänge pro Zeiteinheit. Die Proportionalitätskonstante B_{12} heißt Einstein-Koeffizient der Absorption.

Schließlich sei die Zahl der Übergänge von **2** nach **1** zufolge der induzierten Emission proportional zu N_2 und $\rho(\nu)$, also

$$Z_{2\to 1}^{(\text{ind.})} dt = B_{21} N_2 \rho(\nu) dt \quad . \tag{6.112}$$

 $Z_{2\to1}^{(\text{ind.})}$ ist wieder die Zahl der Übergänge pro Zeiteinheit; die Proportionalitätskonstante B_{21} heißt Einstein-Koeffizient der induzierten Emission. Nun betrachten wir den **Gleichgewichtszustand** zwischen der Strahlung im Hohlraum und dem materiellen System. Dieser Zustand ist einerseits durch eine feste Temperatur T charakterisiert, und damit ist die Energiedichte $\rho(\nu)$ eine Funktion von T und gegeben durch das Plancksche Gesetz (6.108). Andererseits etablieren sich Gleichgewichtswerte für N_1 und N_2 . Dies bedeutet, dass die Zahl der Übergänge von $\mathbf{2} \to \mathbf{1}$ gleich sein muss der Zahl der Übergänge von $\mathbf{1} \to \mathbf{2}$, d. h.

$$Z_{1\to2}^{(\text{abs.})} = Z_{2\to1}^{(\text{spont.})} + Z_{2\to1}^{(\text{ind.})} \quad . \tag{6.113}$$

Wir setzen (6.109), (6.111) und (6.112) in (6.113) ein und erhalten

$$B_{12} N_1 \rho(\nu, T) = A_{21} N_2 + B_{21} N_2 \rho(\nu, T) \quad . \tag{6.114}$$

Nun lösen wir die Beziehung (6.114) nach $\rho(\nu, T)$ auf und finden

$$\rho(\nu, T) = \frac{A_{21} N_2}{B_{12} N_1 - B_{21} N_2} = \frac{A_{21}/B_{21}}{\frac{N_1}{N_2} \frac{B_{12}}{B_{21}} - 1} \quad . \tag{6.115}$$

Wir nehmen an, dass die Gleichgewichtswerte von N_1 und N_2 durch den Boltzmann-Faktor [KP-2-14.5] festgelegt sind, also

$$N_i \propto e^{-\frac{E_i}{kT}} \quad . \tag{6.116}$$

(k ist die Boltzmann-Konstante.) Daraus erhalten wir

$$\frac{N_1}{N_2} = e^{\frac{E_2 - E_1}{kT}} = e^{\frac{h\nu}{kT}} \quad , \tag{6.117}$$

und (6.115) geht über in

$$\rho(\nu, T) = \frac{A_{21}/B_{21}}{\frac{B_{12}}{B_{21}}e^{h\nu/kT} - 1} \quad . \tag{6.118}$$

Damit der Ausdruck (6.118) identisch mit dem Planckschen Gesetz (6.108) ist, müssen folgende Relationen zwischen den Einstein-Koeffizienten bestehen:

$$B_{12} = B_{21} \quad , \tag{6.119}$$

und

$$A_{21} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} B_{21} \quad . \tag{6.120}$$

Damit haben wir gezeigt, dass der dritte Strahlungsprozess, nämlich die induzierte Emission, existieren muss. Zudem können wir aus den Relationen (6.119) und (6.120) mit (6.110) und (6.67) alle drei Prozesse berechnen.

Die Gleichheit (6.119) der Einstein-Koeffizienten B_{12} und B_{21} ist bemerkenswert. Die entsprechenden Prozesse – Abb. 6.8(b) und (c) – gehen durch Zeitumkehr auseinander hervor. Diese Eigenschaft erinnert uns an die Invarianz der Projektionswahrscheinlichkeiten gegenüber einer Vertauschung von Anfangs- und Endzustand (3.49).

Wie eingangs erwähnt ist der Laser ein **Verstärker** für elektromagnetische Strahlung. Wir fragen deshalb: Welche Bedingung muss erfüllt sein, damit elektromagnetische Strahlung, z.B. im Hohlraum (Resonator) der Abb. 5.27, verstärkt wird?

Wir charakterisieren ein Strahlungsfeld beliebiger Stärke wiederum durch dessen spektrale Energiedichte $\rho(\nu)$ und nehmen zunächst beliebige Besetzungszahlen N_1 , N_2 an. Damit die Strahlung der Frequenz ν verstärkt wird, muss die Gesamtzahl der Übergänge von $\mathbf{2} \to \mathbf{1}$ größer sein als die Zahl der Absorptionen (von $\mathbf{1} \to \mathbf{2}$), d.h.

$$Z_{2 \to 1}^{(\text{spont.})} + Z_{2 \to 1}^{(\text{ind.})} > Z_{1 \to 2}^{(\text{abs.})}$$
 . (6.121)

Mit (6.109), (6.111) und (6.112) lautet die Bedingung (6.121)

$$\frac{A_{21}N_2 + B_{21}N_2\rho(\nu)}{B_{12}N_1\rho(\nu)} = \frac{N_2}{N_1}\left(1 + \frac{A_{21}}{B_{12}\rho(\nu)}\right) > 1 \quad . \tag{6.122}$$

In (6.122) wurde (6.119) verwendet.

Die Ungleichung (6.122) ist erfüllt für beliebige Werte von $\rho(\nu)$, falls

$$N_2 > N_1$$
 (6.123)

Die Zahl der Systeme im oberen Zustand 2 muss größer sein als diejenige im unteren Zustand 1. Diese Situation wird als Inversion bezeichnet – im Gegensatz etwa zum thermischen Gleichgewichtszustand, der nach (6.117) durch $N_2 < N_1$ charakterisiert ist.

Beim Ammoniakmaser (Abschn. 5.2.6, Abb. 5.27) wird die Inversion durch das Quadrupolfeld herbeigeführt, welches die Moleküle im ersten angeregten Zustand in den Resonator hineinfokussiert und die Moleküle im Grundzustand defokussiert.

Die verschiedenen Lasertypen unterscheiden sich in der Art und Weise, wie der Zustand der Inversion realisiert wird. Für Einzelheiten, insbesondere auch bezüglich der spezifischen Eigenschaften von Laserlicht (scharfe räumliche Bündelung und hohe Kohärenz) verweisen wir auf die umfangreiche Fachliteratur.

Aufgabe 61 Atommodell (klassisch). Die Elektronenhülle eines neutralen Atoms der Kernladungszahl Z beschreiben wir als homogen geladene Kugel vom Radius R. Die Ausdehnung des Atomkerns ist viel kleiner als R, seine Masse $M \gg Zm_e$ (m_e Masse des Elektrons).

Die Elektronenhülle führe eine (in z-Richtung) lineare Bewegung aus (maximale Auslenkung $\ll R$).

- 1. Bestimme die Bewegungsgleichung des Systems.
- 2. Berechne die mittlere Energie \overline{E} (in eV) der vom Atom emittierten Photonen als Funktion von Z, für $R = \text{konst.} \simeq 1 \text{ Å}$. In welchem Bereich des elektromagnetischen Spektrums liegen die Energien (1 < Z < 100)?
- Berechne die natürliche Linienbreite Γ als Funktion von Z und vergleiche diese mit der entspechenden mittleren Photonenergie E. Hinweis: Hinsichtlich der Strahlungsdämpfung betrachten wir die Elektronenhülle als "Punktladung".
- 4. Berechne die mittlere Lebensdauer τ speziell für Wasserstoff (Z = 1) und vergleiche das Resultat mit den exakten Lebensdauern des Wasserstoffatoms (Tabelle 6.1).

Aufgabe 62 Lebensdauer.

Berechne die mittleren Lebensdauern τ_{m_i} der (2p - 1s)-Übergänge im Wasserstoffatom aus den Wellenfunktionen von Anfangs- und Endzustand für die drei Anfangszustände $m_i = 0, \pm 1$.

Hinweis: Es ist zweckmäßig, die Lebensdauer mit
$$r_0 \equiv \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{e^2}{e^2}$$
 (6.45) auszudrücken.

Aufgabe 63 Intensitätsverteilung.

Berechne die Emissionswahrscheinlichkeiten $P_{m_i}(\theta, \phi)$ des Photons pro Raumwinkeleinheit für die drei Ausgangszustände $m_i = 0, \pm 1$ des (2p - 1s)-Übergangs im Wasserstoffatom.

Aufgabe 64 Auswahlregel. Die spontane Emission von Photonen zwischen Zuständen der Gesamtdrehimpulsquantenzahlen $j_i = j_f = 0$ ist absolut verboten – Warum?

Aufgabe 65 (3s - 2p)-*Übergang.* Wir denken uns die drei mittleren Lebensdauern τ_{m_f} $(m_f = 1, 0, -1)$ für die Übergänge $(300) \rightarrow (21m_f)$ des Wassrstoffatoms mit Hilfe des Ausdrucks (6.67) berechnet.

- 1. Wie groß ist die mittlere Lebensdauer τ_{3s} des 3*s*-Zustandes, ausgedrückt durch τ_1, τ_0 und τ_{-1} ?
- 2. Zeige, dass $\tau_1 = \tau_0 = \tau_{-1}$.

Aufgabe 66 Laser.

- 1. Berechne das Verhältnis zwischen induzierter und spontaner Emission im Gleichgewicht von Strahlung und materiellem System.
- 2. In welchem Frequenzbereich dominiert die induzierte Emission bei Zimmertemperatur (T = 300 K)? (Approximative Grenzfrequenz ν angeben.)

7 Systeme identischer Quantonen

Inhalt: Bis und mit Kap. 5 (Schrödinger-Wellengleichung) haben wir ausschließlich Eigenschaften der Ein-Quanton-Systeme studiert. Hier wenden wir uns der Quantenphysik einer wichtigen Klasse von Mehr-Quanton-Systemen zu, nämlich solchen, die aus identischen Quantonen zusammengesetzt sind. Bekannte Beispiele sind: die Atome mit ihren Elektronen, der Laserstrahl und die Strahlung im Hohlraum (aus Photonen zusammengesetzt), die Atomkerne (aufgebaut aus Protonen und Neutronen) und die verschiedenen Typen von Festkörpern (die Elemente sind identische Atome (Atomgruppen) und Elektronen).

Als wichtige Vorstufe zur Behandlung der Systeme identischer Quantonen studieren wir ausführlich das Zwei-Quanton-System unterschiedlicher Quantonen. Wir beginnen mit den Ortseigenschaften am einfachen Kastenpotential: Die Wellenfunktionen sind Produkte von Einteilchen-Wellenfunktionen. Für identische (und damit ununterscheidbare) Quantonen gilt die Austausch- oder Permutationssymmetrie, die zu symmetrischen bzw. antisymmetrischen Kombinationen von Produktwellenfunktionen führt. In analoger Weise behandeln wir dann die Spineigenschaften von Zwei-Quanton-Systemen (Spin 1/2) und schließlich die Kombination der Eigenschaften von Ort und Spin.

Quantonen, deren Gesamtdrehimpulsquantenzahl *halbzahlig* ist, nennen wir *Fermionen* (halbzahliger Spin); solche mit *ganzzahliger* Drehimpulsquantenzahl heißen *Bosonen* (ganzzahliger Spin).

Es gilt das fundamentale Gesetz: Die Gesamtwellenfunktion eines aus identischen *Fermionen* zusammengesetzten Systems ist *antisymmetrisch* bezüglich der Permutation zweier Fermionen; für ein aus identischen *Bosonen* zusammengesetztes System ist die Gesamtwellenfunktion *symmetrisch* unter der Permutation zweier Bosonen.

Für Fermionen folgt daraus das *Pauli-Prinzip*, das in dramatischer Weise die Eigenschaften von Mehr-Fermion-Systemen identischer Fermionen beeinflusst. Wir behandeln den Atombau, die Unterschiede zwischen Metallen, Halbleitern und Isolatoren sowie die Struktur der Atomkerne.

Eigenschaften *bosonischer* Systeme erläutern wir am Bose-Einstein-Kondensat im Gas, an der Suprafluidität und Supraleitung.

7.1 Das Zwei-Quanton-System

In diesem Abschnitt werden zwei Ziele verfolgt. Einmal wollen wir wichtige Zwei-Quanton-Systeme berechnen, etwa das Wasserstoff- und das Heliumatom (einschließlich der Spineffekte). Zweitens soll die Basis gelegt werden für die Behandlung von Viel-Quanton-Systemen identischer Quantonen. Für beide Zielsetzungen ist der Ausgangspunkt das Zwei-Quanton-System *unterschiedlicher* Quantonen.

7.1.1 Ortsraum

Wir betrachten zunächst Zwei-Quanton-Systeme mit verschiedenen, spinlosen Quantonen.

Das einfachste Zwei-Quanton-System ist das unendlich tiefe Kastenpotential (Abschn. 5.1.1), welches zwei Quantonen der Massen m_1 und m_2 enthält. Im Innern des Kastens bewegen sich die Quantonen kräftefrei; insbesondere sei auch die Quanton-Quanton-Wechselwirkung vernachlässigbar klein. In Abb. 7.1 sind stationäre Zustände A, B der beiden Quantonen schematisch dargestellt.

Das Quanton 1 sei im stationären Ein-Quanton-Zustand A, der durch die (örtliche) Wellenfunktion $\psi_A(x_1)$ beschrieben wird. Entsprechend sei das Quanton 2 im stationären Zustand B mit der Wellenfunktion $\psi_B(x_2)$. Da die beiden Quantonen *unabhängig* voneinander sind, (das eine merkt nichts vom anderen), können wir die Wellenfunktionen dem Ein-Quanton-Problem (Abschn. 5.1.1) entnehmen. Aus (5.30) folgt

$$\psi_A(x_1) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n_A \frac{\pi}{a} x_1\right) \quad ; \quad \psi_B(x_2) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n_B \frac{\pi}{a} x_2\right) \quad , \quad (7.1)$$

wobei n_A , n_B positive ganze Zahlen (> 0) sind.

Wir fragen nach der Wahrscheinlichkeit dafür, das Quanton 1 (Zustand A) im Intervall zwischen x_1 und $(x_1 + dx_1)$ und das Quanton 2 (Zustand B) im Intervall $x_2 \dots (x_2 + dx_2)$ zu finden. Wegen der Unabhängigkeit der beiden



Abb. 7.1. Zwei kräftefreie Quantonen 1, 2 der Massen m_1 , m_2 im unendlich tiefen Kastenpotential.

Quantonen ist die gesuchte Wahrscheinlichkeit gleich dem Produkt der beiden Einteilchen-Wahrscheinlichkeiten, also

$$\rho_A(x_1) \, dx_1 \cdot \rho_B(x_2) \, dx_2 = |\psi_A(x_1)|^2 \, dx_1 \cdot |\psi_B(x_2)|^2 \, dx_2 \quad . \tag{7.2}$$

 $(\rho \text{ bezeichnet die Einteilchen-Wahrscheinlichkeitsdichte.})$

Wir können eine (örtliche) Wellenfunktion des Zwei-Quanton-Systems $\psi_{AB}(x_1, x_2)$ einführen, die mit einer Zweiteilchen-Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho_{AB}(x_1, x_2)$ verknüpft ist durch

$$\rho_{AB}(x_1, x_2) = |\psi_{AB}(x_1, x_2)|^2 \quad . \tag{7.3}$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho_{AB}(x_1, x_2)$ gibt die Wahrscheinlichkeit pro Längeneinheit an, das Quanton 1 (Zustand A) bei x_1 zu finden und das Quanton 2 (Zustand B) bei x_2 . Es gilt

$$\int \rho_{AB}(x_1, x_2) \, dx_1 \, dx_2 = 1 \quad . \tag{7.4}$$

(Die Wahrscheinlichkeit dafür, die Quantonen 1 und 2 irgendwo zu finden, ist eins.) Der Produkteigenschaft (7.2) entnehmen wir mit (7.3)

$$\rho_{AB}(x_1, x_2) = |\psi_A(x_1)|^2 |\psi_B(x_2)|^2 \quad . \tag{7.5}$$

Aus (7.5) folgt, dass die Wellenfunktion des Zwei-Quanton-Systems (bis auf einen beliebigen Phasenfaktor) gleich dem *Produkt* der Einteilchen-Wellenfunktionen ist, also¹

$$\underline{\psi}_{AB}(x_1, x_2) = e^{i\delta} \,\psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \quad . \tag{7.6}$$

 $(\delta \text{ ist ein beliebiger Phasenwinkel}^2.)$

Als **Beispiel** wählen wir für A den Grundzustand $(n_A = 1)$ und für B den ersten angeregten Zustand $(n_B = 2)$. In Abb. 7.2 ist das Produkt (7.6) der Einteilchen-Wellenfunktionen durch die geschlossenen "Höhenlinien" dargestellt.

Nun gehen wir dazu über, Systeme mit identischen Quantonen zu studieren.

Wir bringen zwei *identische* (nicht wechselwirkende) Quantonen ins unendlich tiefe Kastenpotential (Abb. 7.1). Dies bedeutet in unserem Fall, dass die Massen gleich sind $(m_1 = m_2 = m)$. Die Quantonen seien immer noch in den Zuständen A und B.

¹ Unser Beispiel des unendlich tiefen Kastenpotentials ist deshalb besonders einfach, weil das Potential für beide Quantonen identisch ist. Für kompliziertere Zwei-Quanton-Systeme (mit verschiedenen Quantonen) verweisen wir auf Anhang D.

 $^{^2}$ Aus dem entsprechenden Argument im Impulsraum folgt, dass der Phasenwinkel δ eine Konstante ist.

294 7 Systeme identischer Quantonen



Abb. 7.2. Produktwellenfunktion $\psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2)$ für $n_A = 1$ (Grundzustand) und $n_B = 2$ (erster angeregter Zustand) zweier Quantonen im unendlich tiefen Kastenpotential. Orte konstanter Funktionswerte sind dargestellt.

Jetzt sind wir mit einem fundamentalen Quantenphänomen konfrontiert. Wir müssen annehmen, dass die beiden identischen Quantonen **ununter**scheidbar sind. Denn es ist im Allgemeinen nicht möglich, die beiden (physikalisch gleichen) Quantonen irgendwie zu kennzeichnen und damit zu unterscheiden. Dies müsste mit einer Messung geschehen, die aber im Allgemeinen den Zustand des Quantons verändert. Diese Situation steht im krassen Gegensatz zur klassischen Physik. Dort ist es immer möglich die Massenpunkte zu kennzeichnen (z. B. durch Farbe), auch dann, wenn sie physikalisch gleich sind (d. h. $m_1 = m_2 = m$). Der fundamentale Unterschied zwischen klassischem Teilchen und Quanton kann auch folgendermaßen charakterisiert werden: Das klassische Teilchen ist durch eine Bahnkurve (Trajektorie) gekennzeichnet – das Quanton hat keine Trajektorie.

Quantenphysikalisch können wir also nicht sagen, welches Quanton im Zustand A und welches im Zustand B ist – weil die Quantonen ununterscheidbar sind. Die Zweiteilchen-Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho_{AB}(x_1, x_2)$ erhält damit eine andere Bedeutung: Sie beschreibt die Wahrscheinlichkeit (pro Längeneinheit) dafür, *irgendeines* der beiden Quantonen im Zustand A und das jeweils andere im Zustand B zu finden. Wegen der Ununterscheidbarkeit der Quantonen müssen wir fordern, dass die Zweiteilchen-Wahrscheinlichkeitsdichte identisch ist unter Vertauschung der Positionen x_1 und x_2 , für alle Paare (x_1, x_2) . Ausgedrückt in der Wellenfunktion bedeutet dies:

$$|\psi_{AB}(x_1, x_2)|^2 = |\psi_{AB}(x_2, x_1)|^2$$
(7.7)

Die Wahrscheinlichkeit dafür, ein Quanton im Zustand A bei x_1 zu finden und (zur gleichen Zeit) das andere Quanton (im Zustand B) bei x_2 , ist gleich der Wahrscheinlichkeit dafür, dass eines im Zustand A bei x_2 ist und das andere (im Zustand B) bei x_1 .

Die Relation (7.7) ist die einfachste Form der sogenannten Austauschoder **Permutationssymmetrie**, welche eine fundamentale Eigenschaft der Quantenphysik der Mehrteilchensysteme darstellt.

Als Nächstes versuchen wir die Form der Wellenfunktion $\psi_{AB}(x_1, x_2)$, ausgedrückt durch die Einteilchen-Wellenfunktionen $\psi_A(x)$, $\psi_B(x)$, zu finden. <u>1. Fall : $A \equiv B$ </u>. Falls die beiden Einteilchenzustände identisch sind, erfüllt die Produktwellenfunktion

$$\underline{\psi}_{AA}^{(s)}(x_1, x_2) = \psi_A(x_1) \cdot \psi_A(x_2)$$
(7.8)

offensichtlich die Relation (7.7). Die Funktion (7.8) hat die Eigenschaft

$$\psi_{AA}^{(s)}(x_1, x_2) = \psi_{AA}^{(s)}(x_2, x_1) \quad ; \tag{7.9}$$

wir sagen, sie ist symmetrisch. Die Wellenfunktion (7.8) ist korrekt normiert.

Dies ist das einfachste Beispiel eines allgemeinen Gesetzes, auf das wir im (nächsten) Abschn. 7.2 zurückkommen:

Die Gesamtwellenfunktion eines Systems von identischen, spinlosen Quantonen ist symmetrisch.

2. Fall : $A \neq B$. Für unterschiedliche Einteilchenzustände dagegen verletzt die Produktwellenfunktion (7.6) die Forderung (7.7) der Permutationssymmetrie. Am Beispiel der Abb. 7.2 ($n_A = 1, n_B = 2$) ist dies direkt ersichtlich; die entsprechende Produktwellenfunktion ist nämlich nicht symmetrisch bezüglich der Geraden $x_2 = x_1$. Wir können aber einfache Linearkombinationen von Produktwellenfunktionen konstruieren, welche die gewünschte Eigenschaft (7.7) haben, nämlich

$$\psi_{AB}^{(s)}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_A(x_1) \, \psi_B(x_2) + \psi_A(x_2) \, \psi_B(x_1) \right] \tag{7.10}$$

und

$$\psi_{AB}^{(a)}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_A(x_1) \,\psi_B(x_2) - \psi_A(x_2) \,\psi_B(x_1) \right] \tag{7.11}$$

Die symmetrische Wellenfunktion (7.10) hat die Eigenschaft

$$\psi_{AB}^{(s)}(x_1, x_2) = \psi_{AB}^{(s)}(x_2, x_1) \quad , \tag{7.12}$$

und für die antisymmetrische Wellenfunktion (7.11) gilt

$$\psi_{AB}^{(a)}(x_1, x_2) = -\psi_{AB}^{(a)}(x_2, x_1) \quad . \tag{7.13}$$

In beiden Fällen ist die zu fordernde Relation (7.7) der Permutationssymmetrie erfüllt. Die beiden Zweiteilchen-Wellenfunktionen (7.10) und (7.11) sind mit (7.3) und (7.4) auch richtig normiert (verifiziere!).

Austauschkraft

Wir wollen den Abstand zwischen den Quantonen 1 und 2 – einerseits für verschiedene und andererseits für identische Quantonen – für zwei beliebige Ein-Quanton-Zustände A, B $(A \neq B)$ berechnen. Es ist zweckmäßig den Abstand durch den Mittelwert des Abstandsquadrates $\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle$ zu charakterisieren.

Sind die Quantonen verschieden, dann finden wir das Resultat (Aufgabe 69)

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{AB}^{\text{(versch.)}} = \langle x^2 \rangle_A + \langle x^2 \rangle_B - 2 \langle x \rangle_A \langle x \rangle_B \quad . \tag{7.14}$$

Sind die identischen Quantonen im symmetrischen Zustand (7.9), dann lautet das Resultat (Aufgabe 69)

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{AB}^{(s)} = \langle x^2 \rangle_A + \langle x^2 \rangle_B - 2 \langle x \rangle_A \langle x \rangle_B - 2 |\langle x \rangle_{AB}|^2 \quad , \tag{7.15}$$

wobei die Größe $\langle x \rangle_{AB}$ definiert ist als das Überlappungsintegral zwischen den Ein-Quanton-Zuständen A, B:

$$\langle x \rangle_{AB} \equiv \int x \,\overline{\psi_A(x)} \,\psi_B(x) \,dx$$
 (7.16)

Aus (7.14) und (7.15) folgt

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{AB}^{(s)} = \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{AB}^{(\text{versch.})} - 2 |\langle x \rangle_{AB}|^2 \quad .$$
 (7.17)

Dies ist ein bemerkenswertes Resultat. Der Abstand der beiden Quantonen (beispielsweise im unendlich tiefen Kastenpotential) ist *unterschiedlich*, je nachdem ob die Quantonen *verschieden* oder *identisch* sind – obschon die Teilchen kräftefrei sind, d. h. es existiert keine Kraft (im Sinne der klassischen Physik) zwischen ihnen.

Woher kommt der Unterschied? Er ist offensichtlich eine direkte Folge davon, dass im ersten Fall die *Produkt*wellenfunktion (7.6) das Zwei-Quanton-System beschreibt und im zweiten Fall die *"symmetrisierte"* Wellenfunktion (7.10). Es ist, als ob im Fall identischer Quantonen eine "Anziehungskraft" zwischen den Quantonen wirken würde, die den Abstand gegenüber dem Fall ungleicher Quantonen verkleinert; wir sprechen von der **Austauschkraft** oder **Austauschwechselwirkung** in Anlehnung an die Austauschoder Permutationssymmetrie. Dieser rein quantenphysikalische Effekt spielt eine wichtige Rolle für alle Mehrteilchensyteme identischer Quantonen.

Wir können die Überlegungen dieses Abschnitts ohne weiteres auf räumlich dreidimensionale Probleme ausweiten. Dem einfachen Beispiel des unendlich tiefen Kastenpotentials entspricht dann die Hohlkugel mit total reflektierenden Wänden (Aufgabe 55). Die Relation (7.7) der *Permutationssymmetrie* für identische Quantonen nimmt hier die Form an

$$|\psi_{AB}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 = |\psi_{AB}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)|^2$$
, (7.18)

wobei \mathbf{r}_1 bzw. \mathbf{r}_2 die Positionen der Quantonen bezeichnet. Die symmetrische bzw. antisymmetrische Wellenfunktionen sind

$$\psi_{AB}^{(s)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_A(\mathbf{r}_1) \, \psi_B(\mathbf{r}_2) + \psi_A(\mathbf{r}_2) \, \psi_B(\mathbf{r}_1) \right] \tag{7.19}$$

und

$$\psi_{AB}^{(a)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_A(\mathbf{r}_1) \, \psi_B(\mathbf{r}_2) - \psi_A(\mathbf{r}_2) \, \psi_B(\mathbf{r}_1) \right] \quad . \tag{7.20}$$

7.1.2 Spinraum

Wir beschäftigen uns in diesem Abschnitt ausschließlich mit Systemen, deren Quantonen **Spin 1/2** besitzen und beschränken uns auf das Studium ihrer Drehimpulseigenschaften (Eigendrehimpuls).

Zunächst wollen wir die Beschreibung des *Ein-Quanton-Systems* in eine zweckmäßige Form bringen. Wir erinnern an den Zusammenhang zwischen Quantenamplitude und Wellenfunktion im Ortsraum (Abschn. 7.1.1)

$$\langle u_{\mathbf{r}}|A\rangle = \psi_A(\mathbf{r}) = \psi_A(r,\theta,\phi)$$
 . (7.21)

Das Ziel ist es, in analoger Weise eine *Wellenfunktion im Spinraum* einzuführen.

Wir kennen die Drehimpulseigenschaften im Ruhesystem des Quantons (Abschnitte 3.3.4 und 4.3). Als Basiszustände wählen wir hier die Eigenzustände der z-Komponente des Drehimpulses

$$s_z \equiv J_z$$
 (frühere Bezeichnung) , (7.22)

deren Eigenwerte durch die Quantenzahlen $m_z = \pm 1/2$ festgelegt sind. (Die Bezeichnung J_z wollen wir in Zukunft für den Gesamtdrehimpuls des Quantons (Bahndrehimpuls plus Eigendrehimpuls) reservieren (Abschn. 7.1.3).)

Der allgemeinste Drehimpulszustand (Abschn. 4.3) ist ein Eigenzustand der Drehimpulskomponente bezüglich einer beliebigen Richtung (θ, ϕ) mit Eigenwert $+\frac{1}{2}\hbar$. Jeden dieser Zustände können wir durch einen Punkt auf der Einheitskugel charakterisieren, den wir mit dem Einheitsvektor **s** beschreiben. In Analogie zu (7.21) definieren wir als *Wellenfunktion im Spinraum* $\chi_{m_z}(\theta, \phi)$ die Quantenamplitude 298 7 Systeme identischer Quantonen

$$\langle u(\theta,\phi)|m_z\rangle \equiv \chi_{m_z}(\mathbf{s}) = \chi_{m_z}(\theta,\phi)$$
 (7.23)

Die explizite Form der Wellenfunktionen folgt aus (3.116) und (3.117) (das Konjugiert-Komplexe jener Ausdrücke):

$$\chi_{m_z}(\theta, \phi) = \begin{cases} \cos(\theta/2) e^{-i\phi/2} & \text{für } m_z = +1/2\\ \sin(\theta/2) e^{i\phi/2} & \text{für } m_z = -1/2 \end{cases}$$
(7.24)

Die Betragsquadrate der Wellenfunktionen sind die entsprechenden $Wahr-scheinlichkeiten P_{m_z}$:

$$|\chi_{m_z}(\theta,\phi)|^2 = P_{m_z}(\theta) = \begin{cases} \cos^2(\theta/2) = \frac{1}{2} (1+\cos\theta) & \text{für } m_z = +1/2\\ \sin^2(\theta/2) = \frac{1}{2} (1-\cos\theta) & \text{für } m_z = -1/2\\ (7.25) \end{cases}$$

Die Wahrscheinlichkeiten sind nur abhängig von θ und es gilt die Vollständigkeitsrelation

$$P_{1/2}(\theta) + P_{-1/2}(\theta) = 1 \quad . \tag{7.26}$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Quanton irgendeinen Spinwert **s** annimmt (für festen Wert m_z) ist gleich der Mittelung von P_{m_z} über die Einheitskugel. Man findet (verifiziere!)

$$\overline{P_{m_z}(\mathbf{s})} = \overline{P_{m_z}(\theta)} = \frac{1}{2} \quad . \tag{7.27}$$

Die Spineigenschaften sind – im Vergleich zu denen des Ortes – insofern formal einfacher, als eine vollständige Basis nur zwei Zustände enthält $(m_z = \pm 1/2)$, während die Basis zur Beschreibung der Ortseigenschaften (A, B, C, ...) unendlich viele Eigenzustände umfasst.

Nun wenden wir uns den Zweiteilchensystemen zu, vorerst mit verschiedenen Quantonen.

Zur Beschreibung des Zwei-Quanton-Systems führen wir (in Analogie zum Ortsraum) wieder eine Wellenfunktion $\chi(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$ mit zwei Variabeln ein, welche sich auf die Spinzustände der Quantonen 1 und 2 beziehen. Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass Quanton 1 den Spinwert \mathbf{s}_1 und Quanton 2 den Wert \mathbf{s}_2 annimmt, ist dann gegeben durch

$$P(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = |\chi(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)|^2$$
 . (7.28)

Für die stationären Zustände eines räumlich isotropen Systems von unterschiedlichen Quantonen können wir davon ausgehen, dass die Wahrscheinlichkeiten $P_{m_z}(\mathbf{s}_1)$ und $P_{m'_z}(\mathbf{s}_2)$ (7.24) für Quanton **1** und Quanton **2** wohl definierte Funktionen sind. Die entsprechenden Zweiteilchen-Wahrscheinlichkeiten sind dann gegeben durch das Produkt

$$P_{m_z m'_z}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = P_{m_z}(\mathbf{s}_1) \cdot P_{m'_z}(\mathbf{s}_2) \quad , \tag{7.29}$$

wobe
i $m_z,\,m_z'$ unabhängig die Werte $\pm 1/2$ annehmen. Es ist wieder
um die Produktwellenfunktion

$$\chi_{m_z m'_z}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \chi_{m_z}(\mathbf{s}_1) \cdot \chi_{m'_z}(\mathbf{s}_2) \quad , \tag{7.30}$$

welche die Gleichung (7.29) löst. Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sowohl Quanton **1** als auch Quanton **2** irgendeinen Spinwert \mathbf{s}_1 bzw. \mathbf{s}_2 annehmen – für ein festes Wertepaar (m_z, m'_z) –, erhalten wir durch Mittelung von Ausdruck (7.29) über die Einheitskugeln. Mit (7.27) ist das Resultat

$$\overline{P_{m_z}(\mathbf{s}_1) \cdot P_{m'_z}(\mathbf{s}_2)} = \frac{1}{4} \quad . \tag{7.31}$$

Es gibt insgesamt vier Paare (m_z, m'_z) .

In Abb. 7.3 ist als **Beispiel** die Wahrscheinlichkeit

$$P_{-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2) = P_{-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(\theta_1,\theta_2) = P_{-\frac{1}{2}}(\theta_1) \cdot P_{\frac{1}{2}}(\theta_2)$$
(7.32)

dargestellt. Es ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass zwei (verschiedene) Spin-1/2-Quantonen, die sich in den Einteilchenzuständen $m_z = -1/2$ und $m_z = 1/2$ befinden, die Spinwerte annehmen, die durch θ_1 bzw. θ_2 gekennzeichnet sind (Projektionswahrscheinlichkeiten).



Abb. 7.3. Wahrscheinlichkeit $P_{-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(\theta_1,\theta_2) = P_{-\frac{1}{2}}(\theta_1) \cdot P_{\frac{1}{2}}(\theta_2)$ für verschiedene Spin-1/2-Quantonen (Bedeutung siehe Text). Orte konstanter Funktionswerte sind dargestellt.

300 7 Systeme identischer Quantonen

Schließlich betrachten wir Zweiteilchensysteme mit identischen Quantonen.

Da identische Quantonen generell *ununterscheidbar* sind, und zwar im Hinblick auf *alle* ihre Eigenschaften, müssen wir wiederum die **Austausch**oder **Permutationssymmetrie** fordern. In Analogie zum Ausdruck (7.7) müssen die Spinwellenfunktionen den Vertauschungseigenschaften

$$|\chi_{m_z m'_z}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)|^2 = |\chi_{m_z m'_z}(\mathbf{s}_2, \mathbf{s}_1)|^2$$
(7.33)

genügen. Die Wahrscheinlichkeit dafür, irgendeines der Quantonen mit Spinwert \mathbf{s}_1 zu finden und jeweils das andere mit Spinwert \mathbf{s}_2 ist gleich der Wahrscheinlichkeit dafür, dass irgendeines den Spinwert \mathbf{s}_2 annimmt und das andere den Wert \mathbf{s}_1 .

Wir wollen die Wellenfunktionen wieder durch die entsprechenden Größen des Ein-Quanton-Systems ausdrücken.

1. Fall: $m_z = m'_z$. Für identische Einteilchenzustände löst (entsprechend (7.8)) die symmetrische Produktwellenfunktion

$$\chi_{m_z m_z}^{(s)}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \chi_{m_z}(\mathbf{s}_1) \cdot \chi_{m_z}(\mathbf{s}_2)$$
(7.34)

die Gleichung (7.33).

2. Fall : $m_z \neq m'_z$. Für unterschiedliche Einteilchenzustände ist die Produktwellenfunktion keine Lösung, denn das Produkt der entsprechenden Wahrscheinlichkeiten verletzt die geforderte Permutationssymmetrie. Dies geht aus der Darstellung in Abb. 7.3 direkt hervor: Die Symmetrie bezüglich der Geraden $\theta_2 = \theta_1$ ist verletzt. Wir können aber (wie schon im Ortsraum) wiederum durch die symmetrische bzw. antisymmetrische Kombination der Produktwellenfunktion die Permutationssymmetrie (7.33) erfüllen. Die symmetrische Kombination

$$\chi_{m_z m'_z}^{(s)}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi_{m_z}(\mathbf{s}_1) \, \chi_{m'_z}(\mathbf{s}_2) + \chi_{m_z}(\mathbf{s}_2) \, \chi_{m'_z}(\mathbf{s}_1) \right]$$
(7.35)

hat die Eigenschaft

$$\chi_{m_z m'_z}^{(s)}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \chi_{m_z m'_z}^{(s)}(\mathbf{s}_2, \mathbf{s}_1) \quad .$$
(7.36)

Für die antisymmetrische Linearkombination

$$\chi_{m_z m'_z}^{(a)}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi_{m_z}(\mathbf{s}_1) \, \chi_{m'_z}(\mathbf{s}_2) - \chi_{m_z}(\mathbf{s}_2) \, \chi_{m'_z}(\mathbf{s}_1) \right]$$
(7.37)

gilt

$$\chi_{m_z m_z'}^{(a)}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = -\chi_{m_z m_z'}^{(a)}(\mathbf{s}_2, \mathbf{s}_1) \quad .$$
(7.38)

Für die über beide Spinvariablen integrierten, über die Einheitskugel gemittelten Wahrscheinlichkeiten gilt (verifiziere!)

$$\overline{P_{m_z m'_z}^{(s,a)}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)} = \frac{1}{4} \quad . \tag{7.39}$$

Wir wollen nun die Zweiteilchen-Wellenfunktionen für alle Kombinationen von Einteilchenzuständen (m_z, m'_z) konstruieren. In Tabelle 7.1 sind die insgesamt vier Zweiteilchen-Wellenfunktionen – gruppiert nach ihrer Permutationssymmetrieeigenschaft – aufgeführt.

Es existieren drei symmetrische Wellenfunktionen – zwei einfache Produkte (7.34) und ein symmetrisiertes Produkt (7.35) – sowie eine antisymmetrische Wellenfunktion (7.37).

Die vier Zweiteilchen-Wellenfunktionen lassen sich alle charakterisieren durch einen festen Wert der Summe der Quantenzahlen m_z , m'_z , für jeden Produktterm von Einteilchen-Wellenfunktionen, also durch

$$M_z \equiv m_z + m'_z \quad . \tag{7.40}$$

Für die symmetrischen Funktionen nimmt M_z die Werte (1, 0, -1) an, und für die antisymmetrische Funktion ist $M_z = 0$. Dieser Sachverhalt legt folgende Interpretation nahe:

Die Größe M_z ist die Quantenzahl der z-Komponente des Eigendrehimpulses

$$S_z \equiv s_z^{(1)} + s_z^{(2)}$$
 (7.41)

des aus zwei Spin-1/2-Quantonen (Spinkomponent
e $\boldsymbol{s_z}^{(i)})$ zusammengesetzten Zwei-Quanton-Systems.

Der Eigenwert von S_z ist

$$S_z = \hbar M_z \quad . \tag{7.42}$$

Tabelle 7.1. Die symmetrischen und antisymmetrischen Zweiteilchen-Spinwellenfunktionen $\chi_{M_z}^{(s,a)}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$ für (identische) Spin-1/2-Quantonen.

$\chi^{(s)}_{M_z}(\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2)$	M_z
$\chi_{\frac{1}{2}}(\mathbf{s}_1)\chi_{\frac{1}{2}}(\mathbf{s}_2)$	1
$\left \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi_{\frac{1}{2}}(\mathbf{s}_1) \chi_{-\frac{1}{2}}(\mathbf{s}_2) + \chi_{\frac{1}{2}}(\mathbf{s}_2) \chi_{-\frac{1}{2}}(\mathbf{s}_1) \right] \right $	0
$\chi_{-rac{1}{2}}(\mathbf{s}_1)\chi_{-rac{1}{2}}(\mathbf{s}_2)$	-1
$\chi_0^{(a)}(\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2)$	M_z
$\frac{\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi_{\frac{1}{2}}(\mathbf{s}_1) \chi_{-\frac{1}{2}}(\mathbf{s}_2) - \chi_{\frac{1}{2}}(\mathbf{s}_2) \chi_{-\frac{1}{2}}(\mathbf{s}_1) \right]}{2}$	0

Diese Interpretation ist im Einklang mit den allgemeinen Drehimpulseigenschaften (Abschn. 2.3.4). Die drei symmetrischen Zustände beschreiben also die drei Eigenzustände des Drehimpulses S_z für ein aus zwei Spin-1/2-Quantonen zusammengesetztes Quanton mit Spin Eins; die totale Spin- oder Eigendrehimpulsquantenzahl ist

$$S^{(s)} = 1 \quad . \tag{7.43}$$

Der antisymmetrische Zustand beschreibt entsprechend ein aus zwei Spin-1/2-Quantonen zusammengesetztes Quanton mit Spin Null; die totale Spin-quantenzahl ist

$$S^{(a)} = 0 \quad . \tag{7.44}$$

Der symmetrische Spinzustand heißt **Tripplett**zustand des Zwei-Quanton-Systems, den antisymmetrischen Zustand nennt man **Singulett**zustand.

7.1.3 Ort und Spin

Zur vollständigen Beschreibung des Zwei-Quanton-Systems ist eine kombinierte Behandlung der Orts- und Spineigenschaften erforderlich. Wir studieren zwei Quantonen mit **Spin 1/2**. Konkret können wir uns wiederum am unendlich tiefen (örtlich eindimensionalen) Kastenpotential (Abb. 7.1) orientieren.

<u>1. Schritt</u>: **Ein-Quanton-System**. Die stationären Zustände des Systems werden durch die (zeitunabhängige) Gesamtwellenfunktion³ $\Psi(x, \mathbf{s})$ beschrieben, welche von einer Orts- und einer Spinvariablen abhängt. Wir setzen voraus, dass die Kräfte ausschließlich ortsabhängig sind. In diesem Fall ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das Quanton am Ort x (pro Längeneinheit) und mit dem Spinwert \mathbf{s} zu finden, gleich dem Produkt

$$|\Psi(x,\mathbf{s})|^2 = |\psi_A(x)|^2 \cdot |\chi_{m_z}(\mathbf{s})|^2 \quad , \tag{7.45}$$

wobei $\psi_A(x)$ die örtliche Wellenfunktion des Quantons im Zustand A ist und $\chi_{m_z}(\mathbf{s})$ die Spinwellenfunktion (7.23) des Zustandes m_z . Die Gesamtwellenfunktion, welche die Gleichung (7.45) löst, ist das Produkt

$$\Psi_{A,m_z}(x,\mathbf{s}) = \psi_A(x) \cdot \chi_{m_z}(\mathbf{s}) \quad . \tag{7.46}$$

Die Gesamtwellenfunktion hat die Dimension $[Länge]^{-1/2}$.

<u>2. Schritt</u>: Zwei-Quanton-System – verschiedene Quantonen. Nun betrachten wir ein System mit zwei Spin-1/2-Quantonen. Die Wellenfunktion des Gesamtsystems $\Psi(x_1, x_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$ hängt insgesamt von vier Variablen ab,

 $^{^3}$ Das Symbol \varPsi ist dasselbe wie für die zeitabhängige Wellenfunktion der Schrödinger-Wellengleichung (Kap. 5); dies sollte aber keinen Anlass zur Verwechslung geben.

von zwei Ortsvariablen, die sich auf die Positionen der Quantonen 1 und 2 beziehen, und von zwei entsprechenden Spinvariablen. Falls das System keine Kräfte aufweist, die sowohl vom Ort als auch vom Spin (oder magnetischen Moment) abhängig sind, lässt sich die Wellenfunktion des Gesamtsystems schreiben als ein Produkt

$$\Psi(x_1, x_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \psi(x_1, x_2) \cdot \chi(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) \quad , \tag{7.47}$$

deren Faktoren die Ortswellenfunktion und die Spinwellenfunktion sind. Die Faktorisierung bedeutet, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum

$$\rho(x_1, x_2) = |\psi(x_1, x_2)|^2 \tag{7.48}$$

und die Wahrscheinlichkeit im Spinraum

$$P(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = |\chi(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)|^2 \tag{7.49}$$

unabhängig voneinander sind.

Falls die beiden Quantonen keine Wechselwirkung untereinander haben, ist die Ortswellenfunktion $\psi(x_1, x_2)$ das Produkt⁴ der Einteilchen-Wellenfunktionen der stationären Zustände A (Quanton 1) und B (Quanton 2) (7.6):

$$\psi(x_1, x_2) = \psi_{AB}(x_1, x_2) = \psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \quad . \tag{7.50}$$

Im Hinblick auf den 3. Schritt ist es zweckmäßig, die Spinwellenfunktion $\chi(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$ nicht in der Basis der Einteilchen-Drehimpulszustände $(s = \frac{1}{2}; m_z)$ darzustellen, sondern in der Basis der Zweiteilchen-Drehimpulszustände $(S = 1, 0; M_z)$ (Tabelle 7.1), weil Letztere eine wohl definierte Permutationssymmetrie aufweisen. Die Spinwellenfunktion lässt sich damit schreiben als

$$\chi(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \chi_{M_z}^{(s,a)}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) \quad .$$
(7.51)

Die Wellenfunktionen $\chi_{M_z}^{(s,a)}$ sind in Tabelle 7.1 durch Produkte von Einteilchen-Spinwellenfunktionen zur Basis $(\frac{1}{2}; m_z)$ ausgedrückt.

Die gesamte Zweiteilchen-Wellenfunktion (7.47) ist also mit (7.50) und (7.51) gegeben als

$$\Psi_{AB}(x_1, x_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \psi_{AB}(x_1, x_2) \cdot \chi_{M_z}^{(s,a)}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) \quad . \tag{7.52}$$

<u>3. Schritt</u>: Zwei-Quanton-System – identische Quantonen. Da identische Quantonen *ununterscheidbar* sind, und zwar bezüglich aller ihrer Eigenschaften, müssen wir für die Gesamtwellenfunktion wiederum die Permutationssymmetrie fordern. Dies bedeutet

 $^{^4}$ Eine wichtige Gruppe von örtlich dreidimensionalen Zwei-Quanton-Problemen, die auf eine Faktorisierung der Wellenfunktion führt, wird im Anhang D behandelt.

304 7 Systeme identischer Quantonen

$$\Psi(x_1, x_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)|^2 = |\Psi(x_2, x_1; \mathbf{s}_2, \mathbf{s}_1)|^2$$
(7.53)

Die Wahrscheinlichkeiten sind gleich für eine gleichzeitige Vertauschung der Orts- und der Spinvariablen.

Wir setzen in der Produktwellenfunktion (7.47) die Spinwellenfunktion (7.51) ein und betrachten feste Einteilchenortszustände A, B. Die Gesamtwellenfunktion hat dann die Form

$$\Psi_{AB}(x_1, x_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \psi_{AB}(x_1, x_2) \cdot \chi_{M_z}^{(s,a)}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) \quad . \tag{7.54}$$

Damit die Permutationssymmetrie (7.53) erfüllt ist, müssen (zusammen mit der Spinwellenfunktion) auch die Ortswellenfunktion $\psi_{AB}(x_1, x_2)$ symmetrisch bzw. antisymmetrisch sein unter der Vertauschung ihrer Variablen.

Aus dieser Forderung resultieren die vier Typen von Gesamtwellenfunktionen, die in Tabelle 7.2 dargestellt sind; die Spinwellenfunktionen sind in Tabelle 7.1 gegeben.

Die Gesamtwellenfunktionen der Tabelle 7.2 haben die Eigenschaft

$$\Psi_{AB}^{(s,a)}(x_1, x_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \pm \Psi_{AB}^{(s,a)}(x_2, x_1; \mathbf{s}_2, \mathbf{s}_1) \quad ; \tag{7.55}$$

das obere Vorzeichen gilt für die symmetrischen, das untere für die antisymmetrischen Funktionen.

Wir diskutieren wiederum die Fälle identischer Einteilchenzustände A, Bund unterschiedlicher Einteilchenzustände. Um die Diskussion realistisch zu gestalten, wollen wir ein wichtiges Resulat des (nächsten) Abschn. 7.2 bereits hier heranziehen:

Die Gesamtwellenfunktion eines Systems von identischen Quantonen mit Spin 1/2 ist antisymmetrisch.

Dies bedeutet, dass für unser Zwei-Quanton-System nur die beiden Typen von Wellenfunktionen in der zweiten Spalte der Tabelle 7.2 realisiert sind.

<u>**1**. Fall</u> : $A \equiv B$. Die örtliche Wellenfunktion ist nach (7.8)

$$\psi_{AA}^{(s)}(x_1, x_2) = \psi_A(x_1) \cdot \psi_A(x_2) \tag{7.56}$$

symmetrisch. Deshalb hat die (antisymmetrische) Gesamtwellenfunktion eine antisymmetrische Spinwellenfunktion und ist (mit Tabelle 7.1)

Tabelle 7.2. Die symmetrischen und antisymmetrischen Zweiteilchen-Gesamtwellenfunktionen $\Psi_{AB}^{(s,a)}(x_1, x_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$ für identische Spin-1/2-Quantonen.

$\Psi^{(s)}_{AB}(x_1,x_2;{f s}_1,{f s}_2)$	$\Psi^{(a)}_{AB}(x_1,x_2;\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2)$
$\psi_{AB}^{(s)}(x_1, x_2) \cdot \chi_{M_z}^{(s)}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$	$\psi^{(s)}_{AB}(x_1,x_2)\cdot\chi^{(a)}_0(\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2)$
$\psi^{(a)}_{AB}(x_1,x_2)\cdot\chi^{(a)}_0(\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2)$	$\psi^{(a)}_{AB}(x_1,x_2)\cdot\chi^{(s)}_{M_z}({f s}_1,{f s}_2)$

$$\Psi_{AA}^{(a)}(x_1, x_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \psi_{AA}^{(s)}(x_1, x_2) \cdot \chi_0^{(a)}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) \quad . \tag{7.57}$$

Das Zwei-Quanton-System in diesem Fall hat also notwendigerweise *Spin Null* (Singulettzustand).

<u>2. Fall</u> : $A \neq B$. Für unterschiedliche örtliche Ein-Quanton-Zustände gibt es (nach Tabelle 7.2) zwei Typen von (antisymmetrischen) Gesamtwellenfunktionen, nämlich

$$\Psi_{AB}^{(a)}(x_1, x_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \begin{cases} \psi_{AB}^{(s)}(x_1, x_2) \cdot \chi_0^{(a)}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) & ; \quad S = 0 \\ \psi_{AB}^{(a)}(x_1, x_2) \cdot \chi_{M_z}^{(s)}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) & ; \quad S = 1 \end{cases}$$
(7.58)

Die erste Gesamtwellenfunktion beschreibt ein Zwei-Quanton-System mit Spin Null (Singulett) und der zweite Typ ein solches mit Spin Eins (Tripplett). Die örtlichen Wellenfunktionen sind in (7.10) und (7.11) gegeben und die Spinwellenfunktionen entnimmt man der Tabelle 7.1.

Wie sich zeigen wird, sind die beiden Zustände im Allgemeinen *nicht* entartet: Die Wechselwirkung zwischen den Quantonen sorgt dafür, dass die Energien der Singulett- und Tripplettzustände verschieden sind.

Wir behandeln in den folgenden Abschnitten einige Zwei-Quanton-Systeme, die in den entsprechenden Bereichen der Physik grundlegend sind. Es handelt sich sowohl um Systeme *verschiedener*, als auch um solche *identischer* Quantonen. Dabei beschränken wir uns durchgehend auf das Verhalten der Objekte in ihrem *Schwerpunktsystem*.

7.1.4 Wasserstoffatom

Das Wasserstoffatom ist der Prototyp der uns umgebenden Materie; es spielt eine fundamentale Rolle zum Verständnis des Atombaus (Abschn. 7.3.1).

Bereits im Abschn. 5.2.7 hatten wir uns eingehend mit Wasserstoff beschäftigt. Dort wurde das Atom als *Ein-Quanton-System* behandelt. Wir haben nämlich in der Näherung des unendlich massiven Protons gearbeitet. Im Schwerpunktsystem ist in diesem Fall das Proton im Zentrum in Ruhe, und die Coulomb-Wechselwirkung erzeugt ein $\ddot{a}u\beta$ eres Kraftfeld, in dem sich das Elektron bewegt. In Wirklichkeit ist das Wasserstoffatom natürlich ein Zwei-Quanton-System mit endlicher Protonenmasse. Zudem wurde das Elektron näherungsweise als Quanton mit *Spin Null* behandelt. Wir wollen hier die aufgrund der beiden Näherungen vernachlässigten Effekte bestimmen.

Endliche Protonenmasse

Wir behandeln das Wasserstoffatom als Zwei-Quanton-System mit endlicher Protonenmasse; die Quantonen haben näherungsweise immer noch Spin Null. 306 7 Systeme identischer Quantonen

Die Coulomb-Kraft zwischen Elektron und Proton hängt ab von der Differenz

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p \tag{7.59}$$

der Ortsvektoren \mathbf{r}_e des Elektrons und \mathbf{r}_p des Protons:

$$\mathbf{F}_C(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2} \frac{\mathbf{r}}{r} = -\frac{\alpha\hbar c}{r^3} \mathbf{r} \quad . \tag{7.60}$$

Im Schwerpunktsystem (Abb. 7.4) ist

$$\mathbf{R} \equiv \frac{m_e \mathbf{r}_e + m_p \mathbf{r}_p}{m_e + m_p} \equiv 0 \quad . \tag{7.61}$$

Die potentielle Energie des Zwei-Quanton-Systems lässt sich schreiben als (verifiziere!)

$$U(r) = -\frac{\alpha \hbar c}{r} \quad , \tag{7.62}$$

wobei r der Betrag von \mathbf{r} (7.59) ist. In diesem Fall ist die Schrödinger-Gleichung des Zwei-Quanton-Systems (D.14) separierbar in je eine Differentialgleichung für die Relativbewegung und die Schwerpunktsbewegung (*Anhang D*). Im Schwerpunktsystem bestimmt die *effektive* Ein-Quanton-Schrödinger-Gleichung (D.30) der Relativbewegung,

$$\underline{E\,\phi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\,\Delta\phi(\mathbf{r}) + U(r)\,\phi(\mathbf{r})} \quad , \tag{7.63}$$

die Eigenschaften der stationären Zustände des Zwei-Quanton-Systems. Darin ist ${\cal E}$ die Energie und

$$\mu = \frac{m_e \, m_p}{m_e + m_p} \tag{7.64}$$

die reduzierte Masse.



Abb. 7.4. Wasserstoffatom im Schwerpunktsystem.

Das Zwei-Quanton-System verhält sich also wie ein Ein-Quanton-System der Masse $\mu.$ Damit sind die Wellenfunktionen

$$\underline{\phi(\mathbf{r}) \equiv \psi(\mathbf{r}) = \psi_{nlm}(r,\theta,\phi)}$$
(7.65)

identisch mit den Wellenfunktionen (5.227), und die Energien sind mit (5.226)

$$\underline{E = E_n(\mu) = -\frac{\mu c^2}{2} \frac{\alpha^2}{n^2}} \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$
(7.66)

wobei μ durch (7.64) gegeben ist.

Elektron- und Protonspin

Wir berücksichtigen jetzt, dass das Elektron und das Proton Quantonen mit Spin 1/2 sind.

Im Abschn. 7.1.2 wurde gezeigt, dass ein aus zwei identischen Spin-1/2-Quantonen bestehendes Zwei-Quanton-System in einen Tripplettspinzustand mit der Gesamtspinquantenzahl S = 1 und in einem Singulettspinzustand mit der Quantenzahl S = 0 vorkommt. Dieses Resultat gilt auch dann, wenn das Zwei-Quanton-System aus verschiedenen Quantonen aufgebaut ist (wie im vorliegenden Fall des Wasserstoffatoms).

Wir diskutieren hier die Drehimpulseigenschaften der Spinwellenfunktionen für den Tripplett- und den Singulettzustand der Tabelle 7.1.

Der Gesamteigendrehimpuls ist gleich der Vektorsumme 5 der Drehimpulse der Quantonen 1 und 2, also

$$\vec{\mathbf{S}} = \vec{\mathbf{s}}^{(1)} + \vec{\mathbf{s}}^{(2)} , \qquad (7.67)$$

wobei $\overrightarrow{\mathbf{s}}^{(i)}$ der Drehimpuls (Spin) des Quantons **1** oder **2** ist. Die Betragsquadrate der Drehimpulse haben die Eigenwerte (vgl. (2.50) und Aufgabe 71):

$$\mathbf{S}^{2} = S(S+1)\hbar^{2} \quad (S=1,0) \quad ; \quad \left(\overrightarrow{\mathbf{s}}^{(i)}\right)^{2} = s(s+1)\hbar^{2} = \frac{3}{4}\hbar^{2} \quad (s=1/2) .$$
(7.68)

(Auch das Resultat für $(\overrightarrow{\mathbf{s}}^{(i)})^2$ folgt aus den Spinwellenfunktionen der Tabelle 7.1.) Andererseits folgt aus (7.67)

$$\mathbf{S}^{2} = \left(\overrightarrow{\mathbf{s}}^{(1)} + \overrightarrow{\mathbf{s}}^{(2)}\right)^{2} = 2\left(\mathbf{s}^{(i)}\right)^{2} + 2\,\mathbf{s}^{(1)}\cdot\mathbf{s}^{(2)} \quad . \tag{7.69}$$

⁵ Für die Symbole der quantenphysikalischen Größen gelten die klassischen Vektorgleichungen.

308 7 Systeme identischer Quantonen

Wir erhalten aus (7.69) mit (7.68)

$$\mathbf{s}^{(1)} \cdot \mathbf{s}^{(2)} = \frac{1}{2} \left[\mathbf{S}^2 - 2 \left(\mathbf{s}^{(i)} \right)^2 \right] = \frac{1}{2} \left[S \left(S + 1 \right) \hbar^2 - \frac{3}{2} \hbar^2 \right] \quad . \tag{7.70}$$

Für die feste Spinquantenzahl S hat also auch das Skalarprodukt $\mathbf{s}^{(1)} \cdot \mathbf{s}^{(2)}$ einen wohl definierten Eigenwert.

Die Zustände der Tabelle 7.1 sind im Allgemeinen keine Eigenzustände von $s_{\bm{z}}{}^{(1)}$ und $s_{\bm{z}}{}^{(2)}.$

Eine interessante (und wichtige) Frage lautet: Welchen Gesamtdrehimpuls hat der *Grundzustand* des Wasserstoffatoms? Wir wissen, dass der Drehimpuls des Wasserstoffatoms – ohne Berücksichtigung der Spins – null ist, denn der Grundzustand (in dieser Näherung) ist ein *s*-Zustand (l = 0; Abb. 5.31). Deshalb ist der Gesamtdrehimpuls gleich dem Gesamtspin des Systems; der Grundzustand hat also entweder Spin Eins (Tripplett) oder Spin Null (Singulett). Die Entscheidung zwischen den beiden Fällen können wir noch nicht treffen, weil wir nicht wissen, ob der Tripplett- oder der Singuletzustand energetisch tiefer liegt. Um hier weiter zu kommen, müssen die energetischen Verhältnisse des Wasserstoffatoms studiert werden, insbesondere dessen Spin-Spin-Wechselwirkung (später in diesem Abschnitt).

Feinstruktur (fs)

Hier untersuchen wir die mit dem magnetischen Moment des Elektrons verbundenen *Energieänderungen* des Zwei-Quanton-Systems. Dabei vernachlässigen wir weiterhin das magnetische Moment des Protons, welches größenordnungsmäßig um den Faktor $m_p/m_e = 1836$ kleiner ist als das magnetische Moment des Elektrons (Abschn. 2.3.4).

Wir betrachten als Erstes wiederum den *Gesamtdrehimpuls* des Systems, der sich im Allgemeinen zusammensetzt aus dem Bahndrehimpuls $\vec{\mathbf{l}}$ des Elektrons und dessen Spin $\vec{\mathbf{s}}$. Der Gesamtdrehimpuls, den wir hier mit $\vec{\mathbf{j}}$ bezeichnen, ist gleich der Vektorsumme

$$\vec{\mathbf{j}} = \vec{\mathbf{l}} + \vec{\mathbf{s}} \tag{7.71}$$

aus Bahn- und Eigendrehimpuls (analog zur Relation (7.67)). Für die Betragsquadrate der drei Drehimpulse gilt (analog zu (7.68))

$$\mathbf{j}^2 = j(j+1)\hbar^2$$
; $\mathbf{l}^2 = l(l+1)\hbar^2$; $\mathbf{s}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$, (7.72)

wobei j die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses ist. Wir quadrieren die Relation (7.71), verwenden (7.72) und erhalten (analog zu (7.70))

$$\mathbf{l} \cdot \mathbf{s} = \frac{1}{2} \left(j \left(j + 1 \right) - l \left(l + 1 \right) - \frac{3}{4} \right) \hbar^2 \quad . \tag{7.73}$$

Wir fragen: Welches sind die möglichen Werte der Gesamtdrehimpulsquantenzahl j für den vorgegebenen Wert der Bahndrehimpulsquantenzahl l des stationären Zustandes? Die Antwort, die wir anschließend begründen werden, lautet:

$$j = \begin{cases} 1/2 & \text{für } l = 0\\ l \pm 1/2 & \text{für } l \neq 0 \end{cases}$$
(7.74)

Zunächst ist offensichtlich, dass im Spezialfall l = 0 (Bahndrehimpuls Null) der Gesamtdrehimpuls gleich dem Spin sein muss und damit ist j = s = 1/2.

Um ein allgemeines Argument zur Begründung des Resultats (7.74) zu bekommen, lassen wir uns von den Resultaten in Abschn. 7.1.2 inspirieren. Dort haben wir die Drehimpulszustände des Gesamtsystems zusammengesetzt aus den Drehimpulszuständen der Teilsysteme (genau wie hier) und gefunden, dass die Zahl der unabhängigen Zustände des Gesamtsystems vier beträgt, und zwar unabhängig davon, ob wir die Zustände in der Basis des Gesamtdrehimpulses ($S = 0, 1; M_z$) darstellen oder in der Basis der Drehimpulse der Teilsysteme ($s = \frac{1}{2}; m_z, m_{z'}$). Wir können nun zeigen, dass die Vorschrift (7.74) zum gleichen Resultat führt, nämlich dass die Gesamtzahl der Zustände unabhängig von der Wahl der Basis ist. Denn einerseits ist die Zahl der Zustände für die beiden Drehimpulsquantenzahlen $j_1 = l + 1/2$ und $j_2 = l - 1/2$ gleich der Summe

$$(2j_1+1) + (2j_2+1) = 4l+2 \quad . \tag{7.75}$$

Andererseits ist die Zahl der Zustände für die Drehimpulsquantenzahlen lund s = 1/2 der Teilsysteme gleich dem Produkt

$$(2l+1)(2s+1) = 4l+2 \quad . \tag{7.76}$$

Die Zahl der Basiszustände ist also gleich. Wenn wir *postulieren*, dass die Basisunabhängigkeit allgemein gelten soll, dann können wir die Identität der Ausdrücke (7.75) und (7.76) als Beweis der Relation (7.74) betrachten.

Nun studieren wir die *Energieänderungen* des Wasserstoffatoms als Folge des magnetischen Moments des Elektrons. Da die potentielle Energie immer der klassischen Physik entnommen wird, ist es natürlich, die energetischen Betrachtungen anhand des klassischen Kreisbahnmodells (Abb. 7.5) vorzunehmen.

Da wir kleine Energieänderungen erwarten, genügt es, in der Näherung $m_p \gg m_e$ zu arbeiten⁶.

In Abb. 7.5(b) ist die Bewegung des Protons, betrachtet vom ruhenden Elektron (in dessen Ruhesystem), dargestellt. Diese Bewegung repräsentiert im Zeitmittel einen Kreisstrom (Ladung pro Zeiteinheit) von

⁶ Eine wichtige "Kunst" in der Physik besteht darin, einen Sinn dafür zu entwickeln, welche Näherung realistisch ist, denn die wenigsten Probleme – insbesondere in der Quantenphysik – können exakt gelöst werden.



Abb. 7.5. Kreisbahnmodell des Wasserstoffatoms, (a) im Schwerpunktsystem, (b) im Ruhesystem des Elektrons.

$$I = e \frac{v}{2\pi r} \quad , \tag{7.77}$$

wobei e die Elementarladung ist, v die Geschwindigkeit des Protons im Ruhesystem des Elektrons und r der Kreisradius. Dieser Strom erzeugt am Ort des Elektrons das Magnetfeld **B**, dessen Betrag gegeben ist durch [KP-2-10.7.3]

$$B = \frac{\mu_0}{2} \frac{I}{r} = \frac{\mu_0}{4\pi} e \frac{rm_e v}{r^3 m_e} \quad ; \tag{7.78}$$

oder als Vektor geschrieben

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \, \frac{e}{m_e} \, \frac{\mathbf{l}}{r^3} \quad , \tag{7.79}$$

wobei $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times m_e \mathbf{v}$ der Drehimpuls des Elektrons im *Schwerpunktsystem* des Atoms ist (vergleiche Abb. 7.5(a) mit Abb. 7.5(b)). Wegen des magnetischen Moments $\boldsymbol{\mu}^{(e)}$ des Elektrons hat das System die zusätzliche potentielle Energie

$$\Delta U = -\boldsymbol{\mu}^{(e)} \cdot \mathbf{B} \quad . \tag{7.80}$$

Nun vollziehen wir den Übergang von der klassischen Betrachtung zur Quantenphysik. Dazu ersetzen wir das magnetische Moment $\mu^{(e)}$ des Elektrons durch den quantenphysikalischen Ausdruck (2.162) $(g^{(e)} = 2)$

$$\boldsymbol{\mu}^{(e)} \to -\frac{e}{m_e} \stackrel{\rightarrow}{\mathbf{s}} , \qquad (7.81)$$

und entsprechend im Ausdruck (7.79)

$$\frac{1}{r^3} \to \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} \stackrel{\rightarrow}{1} \quad , \tag{7.82}$$

wobei der Mittelwert $\langle r^{-3} \rangle_{nl}$ (für $l \neq 0$) mit Hilfe der Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms (5.227) berechnet werden kann⁷. Dies setzt voraus, dass

⁷ Für l = 0 gibt es keine Energieänderung, da **B** verschwindet (Rotationssymmetrie der Elektronendichte!).

die zu berechnende Energieänderung sehr klein ist, sodass diese Berechnung mit den ursprünglichen, ungestörten Wellenfunktionen durchgeführt werden kann; wir nehmen an, dass die Wellenfunktionen durch die zusätzliche Wechselwirkung kaum "gestört" werden. Man findet (Aufgabe 72)

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \frac{1}{a_0^3} \frac{1}{n^3 l \left(l + 1/2\right)(l+1)} \quad ; \quad (l \neq 0)$$
 (7.83)

 $(a_0 = \frac{\hbar}{m_e c \alpha}$ ist der Bohrsche Radius).

Aus (7.80) folgt mit (7.79), (7.81) und (7.82) die Energieänderung des Atoms

$$\Delta E = \frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{e}{m_e}\right)^2 \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} \vec{\mathbf{s}} \cdot \vec{\mathbf{l}} \quad , \tag{7.84}$$

wobei $\vec{\mathbf{s}} \cdot \vec{\mathbf{l}}$ durch (7.73) gegeben ist (abhängig von l und j). Wir setzen (7.83) und (7.73) in (7.84) ein und erhalten die Energieänderung (verifiziere!)

$$\underline{\Delta E_{njl} = \frac{m_e c^2}{2} \,\alpha^4 \, \frac{j(j+1) - l\,(l+1) - \frac{3}{4}}{n^3 l\,(l+1/2)(l+1)} \quad ; \quad (l \neq 0) \quad . \tag{7.85}$$

Dieses Resultat bedeutet, dass die Energien E_n jedes stationären Zustandes $(n, l \neq 0)$ des Wasserstoffatoms, entsprechend (7.74), in zwei Energien aufgespalten werden. Diese sind durch die Quantenzahlen n, l und $j(=l \pm 1/2)$ charakterisiert. Wegen der Struktur (7.84) nennen wir den Effekt (nicht-relativistische) **Spin-Bahn-Kopplung**. Die Energieverschiebungen sind größenordnungsmäßig um den Faktor $\alpha^2 \simeq (137)^{-2}$ kleiner als die Bindungsenergie $|E_n|$ des Wasserstoffatoms.

Vergleichen wir die durch die Formel (7.85) vorhergesagten Energieverschiebungen mit den experimentellen Werten, dann stellen wir fest, dass zwar die Größenordnung der Verschiebungen richtig wiedergegeben wird, dass aber keine *quantitative* Übereinstimmung besteht. Der Grund ist der, dass wir bis jetzt die **relativistischen Effekte** vernachlässigt haben! Bei diesen kleinen Energieverschiebungen spielen relativistische Effekte tatsächlich eine Rolle. Unter Berücksichtigung all dieser Effekte resultiert eine erstaunlich einfache Formel für die Energieverschiebungen, die wir hier zitieren wollen⁸:

$$\Delta E_{nj}^{(fs)} = \frac{m_e c^2}{2} \frac{\alpha^4}{n^4} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+1/2}\right)$$
(7.86)

Im Gegensatz zum Ausdruck (7.85) ist die korrekte, vollständige Formel (7.86) unabhängig von l. Dies bedeutet, dass die Zustände mit gleicher Hauptquantenzahl n und gleicher Gesamtdrehimpulsquantenzahl j entartet sind.

Das resultierende *Feinstruktur-Energiespektrum* des Wasserstoffatoms ist in Abb. 7.6 schematisch dargestellt.

⁸ Siehe z. B. *F. Schwabl*, Quantenmechanik, Springer-Verlag (1992), S. 205.



Abb. 7.6. Feinstruktur-Energiespektrum des Wasserstoffatoms (schematisch).

Jeder stationäre Zustand, dessen Energie in Abb. 7.6 eingezeichnet ist, ist durch die drei Quantenzahlen (l, j, m_j) charakterisiert, wobei m_j die magnetische Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses $\overrightarrow{\mathbf{j}}$ ist. Jeder dieser Zustände ist also (2l + 1)-fach entartet. Diese Entartung wird beispielsweise durch ein äußeres Magnetfeld aufgehoben (Zeeman-Effekt, Abschn. 2.3.4).

Hyperfeinstruktur (hfs)

Schließlich berücksichtigen wir *Spin* und *magnetisches Moment* des *Protons* (zusammen mit dem magnetischen Moment des Elektrons).

Einen Effekt kennen wir bereits: Die Spinstruktur des Zwei-Quanton-Systems ist derart, dass *s*-Zustände nun *zwei* Gesamtdrehimpulszustände enthalten, nämlich einen Singulettzustand (S = 0) und einen Tripplettzustand (S = 1). Wegen der Wechselwirkung der beiden magnetischen Momente werden diese beiden Zustände energetisch *aufgespalten*.

Wir beschränken uns auf die Behandlung des Grundzustandes (s-Zustand mit kugelsymmetrischer Wahrscheinlichkeitsdichte) und untersuchen die energetischen Verhältnisse zuerst wieder am klassischen Modell der Abb. 7.7.

Das Elektron beschreiben wir (im *s*-Zustand) als homogen magnetisierte Kugel (Radius r_e), die durch die Magnetisierung **M** (magnetisches Moment pro Volumeneinheit) charakterisiert ist.

Das Feldlinienbild des resultierenden Magnetfeldes **B** ist in Abb. 7.7 dargestellt⁹. Das Feld innerhalb der Kugel ist homogen und gegeben durch

$$\mathbf{B} = \frac{2\mu_0}{3} \,\mathbf{M} \quad . \tag{7.87}$$

⁹ J.D. Jackson, Classical Electrodynamics, John Wiley (1966), Sect. 5.10.



Abb. 7.7. Klassisches Modell der Spin-Spin-Wechselwirkung für s-Zustände des Wasserstoffatoms.

Die Magnetisierung ist verknüpft mit dem totalen magnetischen Moment $\mu^{(e)}$ des Elektrons

$$\mathbf{M} = \frac{3}{4\pi r_e^3} \,\boldsymbol{\mu}^{(e)} \quad . \tag{7.88}$$

Im Hinblick auf den Übergang von der klassischen Betrachtung zur Quantenphysik drücken wir die Magnetisierung durch die örtliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons $\rho(\mathbf{r})$ aus:

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) \,\boldsymbol{\mu}^{(e)} \quad , \tag{7.89}$$

wobei in unserem einfachen Modell

$$\rho(\mathbf{r}) = \begin{cases} \rho_0 = \frac{3}{4\pi r_e^3} & \text{für } r < r_e \\ 0 & \text{für } r > r_e \end{cases} .$$
(7.90)

Damit ist das **B**-Feld innerhalb der Kugel

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{2\mu_0}{3} \,\rho(\mathbf{r}) \,\boldsymbol{\mu}^{(e)} \quad . \tag{7.91}$$

Als Folge des magnetischen Moments $\mu^{(p)}$ des Protons (im Zentrum der Kugel) hat das System die zusätzliche potentielle Energie

$$\Delta U = -\boldsymbol{\mu}^{(p)} \cdot \mathbf{B}(0) \quad . \tag{7.92}$$

Nun vollziehen wir den Übergang zur Quantenphysik. Das magnetische Moment $\mu^{(p)}$ des Protons geht über in den quantenphysikalischen Ausdruck (2.164)

314 7 Systeme identischer Quantonen

$$\boldsymbol{\mu}^{(p)} \to \frac{g^{(p)}e}{2m_p} \stackrel{\rightarrow}{\mathbf{s}}^{(p)} ; \quad g^{(p)} = 5.58 \quad ,$$
(7.93)

und entsprechend geht $\mathbf{B}(0)$ mit (7.91) und (7.81) über in

$$\mathbf{B}(0) \to -\frac{2\mu_0}{3} |\psi_{n0}(0)|^2 \frac{e}{m_e} \overrightarrow{\mathbf{s}}^{(e)} \quad , \tag{7.94}$$

wobei $|\psi_{n0}(0)|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons im s-Zustand am Ort des Protons ist.

Für den *Grundzustand* des Atoms (n = 1) ist

$$|\psi_{10}(0)|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} \tag{7.95}$$

 $(a_0 \text{ ist der Bohrsche Radius})$. Die der potentiellen Energie (7.92) entsprechende Energieänderung des Grundzustandes ist mit (7.93), (7.94) und (7.95)

$$\Delta E^{(hfs)} = \frac{g^{(p)} e^2 \mu_0}{3m_p m_e \pi a_0^3} \vec{\mathbf{s}}^{(p)} \cdot \vec{\mathbf{s}}^{(e)} , \qquad (7.96)$$

wobei das Skalarprodukt nach (7.70) die Eigenwerte hat

$$\mathbf{s}^{(p)} \cdot \mathbf{s}^{(p)} = \frac{1}{2} \left[S(S+1) - 3/2 \right] \hbar^2 \quad ; \quad S = 1, 0 \quad .$$
 (7.97)

Die als *Hyperfeinstruktur* bezeichnete Energieverschiebung (7.96) lässt sich damit schreiben als (verifiziere!)

$$\Delta E_{10S}^{(hfs)} = \frac{4}{3} g^{(p)} \frac{m_e}{m_p} m_e c^2 \alpha^4 \frac{1}{2} \left[S(S+1) - 3/2 \right] \qquad S = 1, 0 \quad . \tag{7.98}$$

Es ist

$$\frac{1}{2}\left[S(S+1) - 3/2\right] = \begin{cases} +1/4 & \text{für } S = 1\\ -3/4 & \text{für } S = 0 \end{cases},$$
(7.99)

und daraus resultiert die in Abb. 7.8 dargestellte Aufspaltung des (n = 1, l = 0)-Zustandes.

Der neue Grundzustand des Wasserstoffatoms hat also den Gesamtdrehimpuls Null.

Der hier behandelte Effekt wird als *magnetische Hyperfeinstruktur* oder **Spin-Spin-Kopplung** bezeichnet.

Aus (7.86) und (7.98) ist ersichtlich, dass der hfs-Effekt größenordnungsmäßig um den Faktor $m_p/m_e = 1836$ kleiner ist als der Feinstruktureffekt. Hyperfeinstrukturverschiebungen von dieser Größenordnung gibt es auch für die anderen stationären Zustände des Wasserstoffatoms.

Wir berechnen aus (7.98) und (7.99) die hfs-Aufspaltung des früheren Grundzustandes (Abb. 7.8)



Abb. 7.8. Magnetische Hyperfeinstrukturaufspaltung des (n = 1, l = 0)-Grundzustandes des Wasserstoffatoms.

Tabelle 7.3. Größenordnungen der Energien des Wasserstoffatoms.

	Größenordnung
Schrödinger-Gleichung (Spin Null)	$lpha^2 m_e c^2$
Korrekturen:	
Feinstruktur (inkl. relativistische Effekte)	$lpha^4 m_e c^2$
Strahlungskorrektur ("Lamb-Shift")	$lpha^5 m_e c^2$
Hyperfeinstruktur	$\left(m_e/m_p ight)lpha^4m_ec^2$
etc.	

$$\Delta E = \frac{4 \times 5.58 \times 511 \times 10^3}{3 \times 1836 \times (137)^4} = 5.88 \times 10^{-6} \,\mathrm{eV} \quad . \tag{7.100}$$

Die dem Strahlungsübergang zwischen den beiden hfs-Zuständen entsprechende Wellenlänge ist

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{\Delta E} = 21.1 \,\mathrm{cm} \tag{7.101}$$

 $(\nu=1420~{\rm MHz}).$ Dies ist die berühmte "21 cm-Linie", die für die Erforschung des interstellaren Raums eine große Bedeutung hat. Sie ist ein "Markenzeichen" für Wasserstoff und erlaubt es, beispielsweise die Spiralnebel in der Milchstraße mittels Radiospektroskopie zu studieren.

Neben der Feinstruktur und der Hyperfeinstruktur gibt es eine zusätzliche Klasse von Effekten, die sogenannten **Strahlungskorrekturen**, welche Energieverschiebungen der stationären Zustände bewirken. Es handelt sich um Effekte der *Quantenelektrodynamik* (QED), also der Quantentheorie der Strahlung, die teilweise sogar größere Energieverschiebungen zur Folge haben als die hfs. Wir haben eingangs von Abschn. 5.2.7 erwähnt, dass das Wasserstoffatom u. a. ein wichtiges Objekt der Präzisionsphysik ist und in dem Zusammenhang wurden die Strahlungskorrekturen intensiv untersucht.

In Tabelle 7.3 ist die Hierarchie mit den Größenordnungen der wichtigsten Energieverschiebungen für das Wasserstoffatom aufgeführt.

Die "Lamb-Shift" hebt die Entartung der Zustände mit gleicher Drehimpulsquantenzahl j (Abb. 7.6) auf.
7.1.5 Positronium

In β^+ -radioaktiven Atomkernen werden spontan *Positronen* (e⁺) emittiert. Sie entstehen im elementaren Prozess der Umwandlung eines Protons in ein Neutron,

$$p \to n + e^+ + \nu_e \quad , \tag{7.102}$$

unter gleichzeitiger Emission eines Neutrinos (ν_e). Die Positronen werden in der umliegenden Materie durch Stöße abgebremst und können – zusammen mit einem Elektron (e^-) der Materie – das gebundene System (e^+, e^-), genannt *Positronium*, bilden. Das Positron ist das Antiteilchen des Elektrons und hat als solches genau dieselbe Masse wie das Elektron ($m_{e^+} = m_{e^-} \equiv m = 511.0 \text{ MeV}/c^2$) und die umgekehrte Ladung (die Elementarladung e).

Anschließend studieren wir die Eigenschaften der *stationären Zustände* von Positronium.

Positronium ist *instabil*: Durch den Prozess der Annihilation wird das Teilchen-Antiteilchen-Paar in γ -Quanten umgewandelt. Der einfachste Annihilationsprozess ist die Umwandlung des Paares in zwei γ -Quanten. (Die Annihilation in ein γ -Quant ist aus Gründen der Energie- und Impulserhaltung unmöglich (verifiziere!).)

Die *Coulomb-Kraft* zwischen Positron und Elektron dominiert die Wechselwirkung im gebundenen System. Die potentielle Energie ist

$$U(r) = -\frac{\alpha \hbar c}{r} \quad , \tag{7.103}$$

wobei r der Betrag des relativen Abstandes **r** zwischen Elektron und Positron ist (Abb. 7.9).



Abb. 7.9. Positronium im Schwerpunktsystem.

Das gebundene System von Positronium ist ein interessanter *Spezial-fall* des *Wasserstoffatoms* (Abschn. 7.1.4). Unter Vernachlässigung von Spin und magnetischem Moment der beiden Quantonen sind die Wellenfunktionen der stationären Zustände direkt gegeben durch (7.65) und die Energien durch (7.66), mit der reduzierten Masse

$$\mu = \frac{m}{2} \quad . \tag{7.104}$$

Die Bindungsenergie des Grundzustandes von Positronium ist

$$|E_1| = \frac{1}{4} mc^2 \alpha^2 = 6.81 \,\mathrm{eV}$$
 . (7.105)

Das Spektrum der Energien ist das um einen Faktor zwei reduzierte Spektrum der Abb. 5.31.

Nun schalten wir Spin und magnetisches Moment von Elektron und Positron ein. Beide Quantonen haben Spin 1/2 und den gleichen g-Faktor

$$g^{(e^-)} = g^{(e^+)} \equiv g = 2$$
 . (7.106)

Zuerst studieren wir wieder die *Drehimpulseigenschaften* des Systems, d. h. die schematische Struktur des Energiespektrums der stationären Zustände (Abb. 7.10).

In Abb. 7.10(a) sind als Ausgangssituation die Bahndrehimpulszustände dargestellt. Zuerst schalten wir den Elektronspin $\vec{s}^{(e^-)}$ ein (Abb. 7.10(b)). Der Gesamtdrehimpuls des Systems ist dann

$$\vec{\mathbf{j}} = \vec{\mathbf{l}} + \vec{\mathbf{s}}^{(e^-)} \quad , \tag{7.107}$$

Abb. 7.10. Energiespektrum von Positronium (schematisch). (a) $\vec{\mathbf{s}}^{(e^-)} = \vec{\mathbf{s}}^{(e^+)} = 0$; (b) $\vec{\mathbf{s}}^{(e^-)} \neq 0$; (c) $\vec{\mathbf{s}}^{(e^-)} \neq 0$, $\vec{\mathbf{s}}^{(e^+)} \neq 0$. In (b) ist die Drehimpulsquantenzahl j und in (c) die Quantenzahlen J angegeben.

wobei die Gesamtdrehimpulsquantenzahl j durch (7.74) gegeben ist. Es resultieren die in Abb. 7.10(b) aufgeführten Zustände. Nun schalten wir zusätzlich den Positronspin $\vec{\mathbf{s}}^{(e^+)}$ ein (Abb. 7.10(c)) und erhalten die endgültigen Zustände mit dem Gesamtdrehimpuls

$$\overset{\rightarrow}{\mathbf{J}} = \overset{\rightarrow}{\mathbf{j}} + \overset{\rightarrow}{\mathbf{s}}^{(e^+)} \quad ; \tag{7.108}$$

Jist die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses. Die der Relation (7.74)entsprechende Beziehung lautet

$$J = j \pm 1/2$$
 . (7.109)

Die Zahl der Zustände werden also verdoppelt und die Quantenzahlen J sind gerade.

Es gibt noch eine zweite Art, die Drehimpulsstruktur von Positronium zu studieren (Abb. 7.11).

Wir gehen wieder aus von den Bahndrehimpulszuständen (Abb. 7.11(a)) und setzen sie mit den Eigendrehimpulszuständen zusammen, von denen wir wissen, dass es zwei gibt, nämlich den Singulettzustand (S = 0) und den Tripplettzustand (S = 1). Für den Singulettzustand ist der Gesamtdrehimpuls J einfach gleich dem Bahndrehimpuls l (Abb. 7.11(b)). Für den Tripplettzustand gilt nach (7.164) (Aufgabe 75)

$$J = \begin{cases} 1 & \text{für } l = 0\\ l+1, l, l-1 & \text{für } l \neq 0 \end{cases}$$
(7.110)

(Abb. 7.11(c)).



Abb. 7.11. Energiespektrum von Positronium (schematisch). (a) $\vec{\mathbf{s}}^{(e^-)} = \vec{\mathbf{s}}^{(e^+)} = 0$; (b) Parapositronium; (c) Orthopositronium. In (b) und (c) sind die Quantenzahlen J des Drehimpulses angegeben.

Die Zahl der Zustände der Abbildungen 7.11(b) und 7.11(c) zusammengenommen ist identisch mit der Zahl der Zustände in Abb. 7.10(c) (jeder eingezeichnete Zustand ist (2J+1)-fach entartet). Dies ist wiederum ein Beispiel dafür, dass die Anzahl der Zustände des Gesamtsystems *unabhängig* von der Basis der Teilsysteme ist.

Nun betrachten wir die Wechselwirkung zwischen den magnetischen Momenten von Elektron und Positron qualitativ. Dabei orientieren wir uns an Tabelle 7.3 (wir müssen darin m_e/m_p durch $m_{e^-}/m_{e^+} = 1$ ersetzen). Der Hyperfeinstruktureffekt im Positronium ist also von der gleichen Größenordnung wie der Feinstruktureffekt und viel wichtiger als die Strahlungskorrektur. Für quantitative Resultate verweisen wir auf die Literatur¹⁰.

Schließlich betrachten wir Prozesse, welche Übergänge zwischen stationären Zuständen erzeugen, sowie solche, die Positronium insgesamt zerfallen lassen.

Wichtige Prozesse – wie auch beim Wasserstoff – sind die Strahlungsübergänge (Abschn. 6.2.1). Wie wir eingangs erwähnt haben, ist Positronium – im Gegensatz zum Wasserstoffatom – instabil. Positronium im Grundzustand (oder in angeregten Zuständen) kann durch den Annihilationsprozess in γ -Quanten zerfallen. Im Hinblick auf diese Prozesse ist die Klassifizierung der stationären Zustände nach der zweiten Art, wie sie in Abb. 7.11 dargestellt ist, physikalisch interessanter als die nach der ersten Art (Abb. 7.10). Es stellt sich nämlich heraus, dass es praktisch keine Prozesse gibt, die einen Übergang zwischen einem Singulett- und einem Tripplettzustand (oder umgekehrt) erzeugen würden. Somit bildet die Gesamtheit der Singulettzustände ein System, das praktisch unabhängig vom System der Tripplettzustände ist. Um diesem Umstand Rechnung zu tragen, nennt man die Gesamtheit der Singulettzustände Parapositronium und diejenige der Tripplettzustände Orthopositronium. Parapositronium annihiliert mit einer mittleren Lebensdauer von $\tau^{(para)} \simeq 1.25 \times 10^{-10} \,\mathrm{s}$ in zwei γ -Quanten und Orthopositronium mit der Lebensdauer $\tau^{(ortho)} \simeq 1.4 \times 10^{-7}$ s in drei γ -Quanten.

7.1.6 Das Heliumatom

Das Heliumatom ist das einfachste Mehrelektronenatom. Es erfüllt eine wichtige Brückenfunktion zwischen dem Wasserstoffatom und dem Aufbauprinzip der Mehrelektronensysteme (Abschn. 7.3.1). Zudem ist es das einfachste System mit zwei *identischen* Quantonen (den beiden Elektronen), das uns erlaubt, die mit der Ununterscheidbarkeit identischer Quantonen verbundenen Effekte zu studieren.

Der Atomkern von Helium ist das α -Teilchen, bestehend aus zwei Protonen und zwei Neutronen. Das α -Teilchen (⁴₂He) hat Spin Null in seinem

¹⁰ S. DeBenedetti and H.C. Corben, Ann. Rev. Nucl. Sci. 4 (1954) 191.



Abb. 7.12. Koordinaten der Elektronen im He-Atom.

Grundzustand. Das He-Atom ist natürlich ein Drei-Quanton-System, bestehend aus dem α -Teilchen und den beiden Elektronen. Da die Masse des ⁴He-Atomkerns ($M_K = 931.5 \times 4.0026 = 3730 \text{ MeV}/c^2$) viel größer ist als die Masse m_e des Elektrons, ist $M_K \to \infty$ eine ausgezeichnete Näherung. Mit dieser Näherung des *unendlich massiven Kerns* wird das He-Atom zum Zwei-Quanton-System; die beiden Elektronen bewegen sich im äußeren Coulomb-Potential des (als punktförmig angenommenen) α -Teilchens im Ursprung des Schwerpunktsystems (Abb. 7.12).

Die Schrödinger-Gleichung

Ausgangspunkt zur Bestimmung der Energien und Wellenfunktionen der stationären Zustände ist die Schrödinger-Gleichung des Zwei-Quanton-Systems (Anhang D), die für verschiedene (nicht-relativistische) Quantonen mit Spin Null gültig ist. Wir setzen die Gesamtwellenfunktion

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$
(7.111)

in der Schrödinger-Gleichung (D.14) ein und erhalten (mit $m_1 = m_2 = m_e \equiv m$) die Differentialgleichung für die örtliche Wellenfunktion,

$$E\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\Delta^{(1)} + \Delta^{(2)}\right) \psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) + U(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \quad , \ (7.112)$$

wobei die potentielle Energie aus drei Termen besteht:

$$U(\mathbf{r}_{1}, \mathbf{r}_{2}) = -\frac{2\alpha\hbar c}{r_{1}} - \frac{2\alpha\hbar c}{r_{2}} + \frac{\alpha\hbar c}{r_{12}} \quad .$$
(7.113)

Die ersten beiden Terme beschreiben die potentielle Energie der Elektronen 1 und 2 im Coulomb-Feld der Punktladung +2e, und der dritte Term ist die Energie der Coulomb-Abstoßung zwischen den beiden Elektronen. Die Größen r_1 , r_2 , r_{12} sind die Beträge der entsprechenden Vektoren (Abb. 7.12). Der Potentialnullpunkt liegt im Unendlichen.

Die exakte Lösung der Gleichung (7.112) mit dem Potential (7.113) ist nicht bekannt. Deshalb sind wir schon auf dieser Stufe auf *Näherungen* angewiesen.

Vernachlässigung der Coulomb-Abstoßung

Eine grobe Näherung besteht darin, im Potential (7.113) die Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen,

$$U_{CA}(r_{12}) = \frac{\alpha \hbar c}{r_{12}} \quad , \tag{7.114}$$

vollständig zu vernachlässigen. Damit sind die beiden Quantonen unabhängig voneinander; jedes bewegt sich im Coulomb-Potential der Punktladung Ze,

$$U^{(Z)}(r) = -\frac{Z\alpha\hbar c}{r} \quad , \tag{7.115}$$

mit Z = 2.

Die Energien und Wellenfunktionen des **Ein-Quanton-Problems** mit dem Potential (7.115) gehen aus den Lösungen des Wasserstoffatoms hervor, indem wir überall die Ladung e des Protons durch Ze ersetzen. Da die Feinstrukturkonstante

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \tag{7.116}$$

die *e*-Abhängigkeit des Problems vollständig enthält, müssen wir in allen Resultaten des Wasserstoffatoms die Substitution

$$\alpha \to Z\alpha$$
 (7.117)

vornehmen. Damit gehen die Energien (5.226) über in

$$E_n^{(Z)} = -\frac{mc^2}{2} \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \quad , \tag{7.118}$$

und der Bohrsche Radius a_0 ist zu ersetzen durch

$$a_0^{(Z)} = \frac{\hbar}{mc} \frac{1}{Z\alpha} \quad . \tag{7.119}$$

Der Ausdruck (7.119) modifiziert die Radialanteile $R_{nl}(r)$ der Wellenfunktionen (5.227). Wir bezeichnen die dem Problem (7.115) zugehörigen Einteilchen-Wellenfunktionen mit

$$\psi_{nlm}^{(Z)}(r,\theta,\phi) = R_{nl}^{(Z)}(r) Y_{lm}(\theta,\phi) \quad .$$
(7.120)

Da a_0 die natürliche Einheit der Koordinate r ist (Abschn. 5.2.7), bewirkt die Substitution (7.117) mit (7.119) lediglich eine lineare Kompression in der Koordinate r. Dies ist die einzige Modifikation der Wellenfunktionen von Wasserstoff.

Nun betrachten wir die Wellenfunktionen und Energien der stationären Zustände des **Gesamtsystems**.

322 7 Systeme identischer Quantonen

Wir können direkt an die Ausführungen im Abschn. 7.1.1 anknüpfen, indem wir sinngemäß die eindimensionale Variable x in den örtlichen Wellenfunktionen durch die dreidimensionale Variable \mathbf{r} ersetzen. Nach (7.6) ist die Wellenfunktion des Gesamtsystems (für *unterschiedliche* Quantonen) gleich dem Produkt der Einteilchen-Wellenfunktion beider Quantonen. Ist Quanton **1** im Zustand (n_1, l_1, m_1) und Quanton **2** im Zustand (n_2, l_2, m_2) , dann lautet die örtliche Wellenfunktion des Gesamtsystems

$$\psi_{n_1 l_1 m_1 n_2 l_2 m_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{n_1 l_1 m_1}^{(2)}(\mathbf{r}_1) \cdot \psi_{n_2 l_2 m_2}^{(2)}(\mathbf{r}_2) \quad , \tag{7.121}$$

wobei die Einteilchen-Wellenfunktionen durch (7.120) (mit Z = 2) gegeben sind. Da die beiden Quantonen unabhängig voneinander sind, ist die Gesamtenergie des Systems

$$E_{n_1n_2}^{(0)} = E_{n_1}^{(2)} + E_{n_2}^{(2)}$$
(7.122)

gleich der Summe der Energien (7.118) beider Quantonen. (Der Index 0 erinnert an die Näherung $U_{CA}(r_{12}) \equiv 0$).

Im nächsten Schritt berücksichtigen wir, dass die beiden Elektronen *identische* Quantonen mit Spin 1/2 sind.

Wir können wiederum direkt die früheren Resultate der Abschnitte 7.1.2 und 7.1.3 heranziehen. Da das He-Atom ein System mit identischen Spin-1/2-Quantonen ist, muss die Gesamtwellenfunktion *antisymmetrisch* sein.

Im *Grundzustand* ist nach (7.122) jedes Quanton im Einteilchenzustand $n_1 = n_2 = 1$. Die zugehörige örtliche Wellenfunktion ist mit (7.56) symmetrisch. Deshalb muss die Spinwellenfunktion des Gesamtsystems antisymmetrisch sein. Nach Tabelle 7.1 ist die Quantenzahl des gesamten Eigendrehimpulses also S = 0. Der Bahndrehimpuls des Gesamtsystems, den wir für Mehrelektronenatome mit $\overrightarrow{\mathbf{L}}$ bezeichnen wollen, hat die Quantenzahl des Bahndrehimpulses L = 0, denn beide Einteilchenzustände haben mit $n_1 = n_2 = 1$ den Bahndrehimpuls Null $(l_1 = l_2 = 0)$.

In jedem angeregten Zustand des He-Atoms ist eines der Elektronen im Einteilchen-Grundzustand $(n_1 = 1)$ und das andere in einem angeregten Zustand $(n_2 \equiv n \geq 2)$. Die angeregten Zustände zerfallen in zwei Gruppen. Die antisymmetrische Gesamtwellenfunktion (zweite Spalte der Tabelle 7.2) kann nämlich auf zwei Arten realisiert werden. Einmal durch eine symmetrische Ortswellenfunktion, dann muss die Spinwellenfunktion antisymmetrisch sein, und damit ist (nach Tabelle 7.1) S = 0. Oder aber durch eine antisymmetrische Ortswellenfunktion, und in diesem Fall ist S = 1.

Gesamthaft gesehen zerfallen die stationären Zustände des He-Atoms somit in zwei Kategorien, in solche mit *Spin Null* (S = 0) und in solche mit *Spin Eins* (S = 1). Da Übergänge zwischen den Zuständen der einen Gruppe in die der anderen (z. B. Strahlungsübergänge) äußerst selten sind, glaubte man ursprünglich, es handle sich dabei um zwei verschiedene Atome. Entsprechend nannte man die Gesamtheit der Zustände mit Spin Null **Parahelium** und jene mit Spin Eins **Orthohelium**. Die Energiezustände des Heliumatoms sind in Abb. 7.13 dargestellt. In der durch die Schrödinger-Gleichung (7.112) definierten Gesamtenergie E entspricht der Energienullpunkt dem vollständig ionisierten Atom (beide Elektronen im Unendlichen mit kinetischer Energie Null). In der Atomphysik ist es üblich, die Energieskala so zu wählen, dass der Energienullpunkt dem einfach ionisierten Atom im Grundzustand und dem freien Elektron mit kinetischer Energie Null entspricht. Die Differenz der beiden Energieskalen ist die Ionisationsenergie des einfach ionisierten He-Ions (⁺He) in seinem Grundzustand. Aus (7.118) folgt

$$E_{\rm ion} = 2mc^2 \alpha^2 = 4 R_\infty = 54.4 \,\mathrm{eV}$$
 . (7.123)

In Abb. 7.13 ist $(E + E_{ion})$ aufgetragen.

Alle angeregten Zustände des He-Atoms $(n \ge 2)$ sind entartet. Sie unterscheiden sich physikalisch durch den *Bahndrehimpuls*

$$\vec{\mathbf{L}} = \vec{\mathbf{l}}_1 + \vec{\mathbf{l}}_2 = \vec{\mathbf{l}}_2 \quad (l_1 = 0) \quad , \tag{7.124}$$

dessen Quantenzahl L die Werte

$$L = 0, 1, 2, \dots, (n-1) \tag{7.125}$$



Abb. 7.13. Energiespektrum der stationären Zustände des He-Atoms (Parahelium und Orthohelium) in der Näherung $U_{CA} \equiv 0$, in Einheiten $R_{\infty} = \frac{m}{2}c^2\alpha^2 =$ 13.61 eV. (*n* ist die Hauptquantenzahl der Einteilchenanregung.)

annimmt (Abb. 7.13). Entsprechend den magnetischen Quantenzahlen von Bahndrehimpuls $(\vec{\mathbf{L}})$ und Eigendrehimpuls $(\vec{\mathbf{S}})$ ist jeder (L, S)-Zustand zusätzlich (2L+1)(2S+1)-fach entartet.

Jeder Zustand eines freien Quantons ist charakterisiert durch die Quantenzahl des *Gesamtdrehimpulses* $\vec{\mathbf{J}}$, die wir früher allgemein mit j bezeichnet hatten (Abschn. 2.3.4). Der Gesamtdrehimpuls zusammengesetzter Mehrelektronenatome ist

$$\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{L}} + \vec{\mathbf{S}} \quad . \tag{7.126}$$

Die zugehörige Quantenzahl wollen wir hier mit J bezeichnen. Die Frage stellt sich: Welches sind die Quantenzahlen des Gesamtdrehimpulses der stationären Zustände des He-Atoms (Abb. 7.13)?

Für die Zustände von Parahelium (mit S = 0) ist $J \equiv L$. Für die Zustände von Orthohelium müssen wir $\overrightarrow{\mathbf{L}}$ und $\overrightarrow{\mathbf{S}}$ zusammensetzen und erhalten (Aufgabe 75), entsprechend den verschiedenen *L*-Werten:

$$L = 0 : J = 1$$

$$L = 1 : J = 0, 1, 2$$

$$L = 2 : J = 1, 2, 3$$

$$L = 3 : J = 2, 3, 4$$
(7.127)
etc.

Für $L\geq 1$ ist also jeder $L\mbox{-}{\rm Zust}$ and von Orthohelium in Abb. 7.13 ein Tripplett von Gesamtdrehimpulszuständen.

Schließlich wollen wir die Wellenfunktionen der stationären Zustände des He-Atoms explizit hinschreiben. Die (zeitunabhängige) **Gesamtwellenfunk**tion Ψ hängt ab von den Ortsvariablen \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 und den Spinvariablen \mathbf{s}_1 , \mathbf{s}_2 . Dem Zustand A der Abschnitte 7.1.1 und 7.1.3 entspricht hier der Einteilchen-Grundzustand (n = 1, l = 0, m = 0) und dem Zustand B ein beliebiger Einteilchenzustand (n, l, m). Wir bezeichnen die entsprechende Gesamtwellenfunktion mit $\Psi_{100nlm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$.

Grundzustand: Beide Elektronen sind im Einteilchen-Grundzustand (1, 0, 0) (Abb. 7.13). Aus (7.57) erhalten wir mit (7.56)

$$\Psi_{100100}^{(\text{para})}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \psi_{100}^{(2)}(\mathbf{r}_1) \,\psi_{100}^{(2)}(\mathbf{r}_2) \,\chi_0^{(a)}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) \quad , \tag{7.128}$$

wobei die örtlichen Einteilchen-Wellenfunktionen durch (7.120) (mit Z = 2) gegeben sind und die Zweiteilchen-Spinwellenfunktion in Tabelle 7.1 durch die Einteilchen-Spinwellenfunktionen ausgedrückt ist.

Parahelium, angeregte Zustände: Eines der Elektronen ist im Grundzustand, das andere in einem angeregten Zustand (Abb. 7.13). Aus der ersten Zeile von (7.58) erhalten wir mit (7.10) die Gesamtwellenfunktion

$$\Psi_{100nlm}^{(\text{para})}(\mathbf{r}_{1}, \mathbf{r}_{2}; \mathbf{s}_{1}, \mathbf{s}_{2}) = \\
= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{100}^{(2)}(\mathbf{r}_{1}) \,\psi_{nlm}^{(2)}(\mathbf{r}_{2}) + \psi_{100}^{(2)}(\mathbf{r}_{2}) \,\psi_{nlm}^{(2)}(\mathbf{r}_{1}) \right] \,\chi_{0}^{(a)}(\mathbf{s}_{1}, \mathbf{s}_{2}) \,. \quad (7.129)$$

Orthohelium: Hier ist für alle stationären Zustände ein Elektron im Grundzustand und das andere in einem angeregten Zustand (Abb. 7.13). Aus der zweiten Zeile von (7.58) folgt mit (7.11)

$$\frac{\Psi_{100nlm}^{(\text{ortho})}(\mathbf{r}_{1}, \mathbf{r}_{2}; \mathbf{s}_{1}, \mathbf{s}_{2}) =}{\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{100}^{(2)}(\mathbf{r}_{1}) \psi_{nlm}^{(2)}(\mathbf{r}_{2}) - \psi_{100}^{(2)}(\mathbf{r}_{2}) \psi_{nlm}^{(2)}(\mathbf{r}_{1}) \right] \chi_{M_{z}}^{(s)}(\mathbf{s}_{1}, \mathbf{s}_{2}) . \quad (7.130)$$

Die Zweiteilchen-Spinwellenfunktion in (7.130) hat drei Komponenten (Tabelle 7.1), entsprechend $M_z = 1, 0, -1$. Für die Zustände mit L = 0(Abb. 7.13) hat M_z die Bedeutung der magnetischen Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses (J = 1).

Die Wellenfunktionen (7.128), (7.129) und (7.130) beschreiben *alle* gebundenen Zustände des Heliumatoms. Die Zustände mit den Quantenzahlen $(n_1 = 2, n_2 \ge 2)$ sind keine gebundenen Zustände (Aufgabe 76).

Wir greifen später auf die Wellenfunktionen zurück.

Das Energiespektrum

Nun wollen wir die in der Näherung vernachlässigbarer Coulomb-Abstoßung berechneten Energie- und Drehimpulswerte der stationären Zustände von Helium (Abb. 7.13) mit den experimentellen Daten konfrontieren.

In Abb. 7.14 ist ein Teil des experimentell bestimmten Energiespektrums dargestellt, wiederum gruppiert nach Zuständen von Para- und Orthohelium. Zum Vergleich ist das Spektrum der angeregten Zustände des Wasserstoffatoms hinzugefügt.

Das Experiment zeigt, dass alle beobachteten Zustände – einschließlich deren Drehimpulseigenschaften – den Zuständen der Abb. 7.13 zugeordnet werden können. Der Vergleich der entsprechenden Energien manifestiert aber klar, dass die beobachteten Zustände weniger stark gebunden sind als diejenigen der Abb. 7.13. Dieser Befund ist verständlich, denn die Vernachlässigung der Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen resultiert in einer Zunahme der Bindung.

Vergleichen wir die beobachteten Energien mit denen des Wasserstoffatoms (Abb. 7.14), dann stellen wir (überraschend) fest, dass die Gruppe von He-Zuständen, die in Abb. 7.13 einer Hauptquantenzahl n entspricht, nahezu übereinstimmt mit der entsprechenden Energie im Spektrum von Wasserstoff. Die Übereinstimmung ist viel besser als diejenige mit den theoretisch berechneten Energien (Abb. 7.13)!



Abb. 7.14. Experimentell bestimmte Energien angeregter Zustände des He-Atoms (Parahelium und Orthohelium) im Vergleich zum Wasserstoffspektrum, in Einheiten $R_{\infty} = \frac{m}{2}c^2\alpha^2 = 13.61 \text{ eV}.$



Abb. 7.15. Bohrsches Atommodell des Heliumatoms für angeregte Zustände mit n = 2 (nicht massstäblich).

Diese Feststellung suggeriert ein verbessertes theoretisches Modell zur Berechnung des Energiespektrums von Helium. Für die in Abb. 7.14 dargestellten Zustände befindet sich eines der Elektronen im Einteilchen-Grundzustand n = 1 und das andere in einem angeregten Zustand $n \ge 2$. Diese Situation ist – im Sinne des (halbklassischen) Bohrschen Atommodells (Abschn. 1.4) – in Abb. 7.15 dargestellt. Das tiefliegende (innere) Elektron im Zustand n = 1 befindet sich im Coulomb-Feld der Ladung +2e des Kerns und hat nach (7.119) den Bohrschen Radius $a_0/2$. Vom äußeren Elektron aus betrachtet, wird die Kernladung +2e durch das innere Elektron "abgeschirmt", sodass sich das äußere Elektron näherungsweise im Coulomb-Feld einer Punktladung +e bewegt. Sein Bohrscher Radius ist nach $(1.41) \ge 4 a_0$ (entsprechend $n \ge 2$).

Diese Näherung ist umso besser erfüllt, je größer n ist. Das (halbklassische) Bohrsche Modell berücksichtigt also die Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen – insofern ist es der bisherigen theoretischen Behandlung überlegen. Das Modell sagt genau die Energien der angeregten Zustände des Wasserstoffatoms vorher (Abb. 7.14). Die Vorhersage stimmt umso besser, je größer n ist. Das Modell gilt nicht für den Grundzustand des He-Atoms.

Es gibt aber auch für den Grundzustand ein durch das Bohrsche Modell inspiriertes, halbklassisches Modell, welches der Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen Rechnung trägt (Abb. 7.16).

Die beiden (gleichberechtigten) Elektronen bewegen sich auf einem gemeinsamen Kreis im Coulomb-Feld der Punktladung +2e des Atomkerns. Die Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen sorgt dafür, dass ihr Abstand "so gross wie möglich" ist: Sie bewegen sich auf einem gemeinsamen Kreisdurchmesser.

Wie erfolgreich ist dieses einfache Modell? Die Antwort ist in der Lösung der Aufgabe 77 enthalten!

Störungsrechnung

Die halbklassischen Atommodelle der Abbildungen 7.15 und 7.16 können nur teilweise befriedigen. Wir wissen, dass schon das Bohrsche Atommodell schwerwiegende Mängel aufweist; die Drehimpulse der stationären Zustände sind im Allgemeinen nicht korrekt (Abschn. 1.4). Zur Vorhersage von Drehimpulseigenschaften sind solche Modelle also untauglich. Zudem möchte man ein im Rahmen der Quantenphysik konsistentes theoretisches Näherungsverfahren haben, um neben den Drehimpulseigenschaften auch die Energien besser berechnen zu können. Dazu gehört auch eine Erklärung dafür, dass die



Abb. 7.16. Bohrsches Atommodell für den Grundzustand des Heliumatoms.

Zustände mit fester Hauptquantenzahl n und verschiedenen Drehimpulsquantenzahlen L nicht entartet sind (Abb. 7.14). Keines der bisherigen Modelle vermag dies zu erklären.

Wir erinnern uns an die Berechnungsmethode der Feinstruktur und der Hyperfeinstruktur beim Wasserstoffatom (Abschn. 7.1.4). Dort wird angenommen, dass die Wellenfunktion des Systems durch eine (kleine) zusätzliche Energie eine unwesentliche Änderung erfährt; zur Berechnung der zusätzlichen Energieverschiebung kann deshalb die "ungestörte" Wellenfunktion verwendet werden¹¹.

Wir wollen die Energieverschiebung als Folge der Coulomb-Abstoßung (7.114) der Elektronen für den **Grundzustand** von Helium mit Hilfe der *Störungsrechnung* durchführen.

Die zusätzliche (klassische) potentielle Energie der Coulomb-Abstoßung (7.114) bezeichnen wir (in Analogie zum Abschn. 7.1.4) mit

$$\Delta U = \frac{\alpha \hbar c}{r_{12}} = \frac{\alpha \hbar c}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad . \tag{7.131}$$

Das He-Atom sei im Grundzustand. Dann ist das System nach (7.128) sicher im Spinzustand $\chi_o^{(a)}$. Die Wahrscheinlichkeit dafür, eines der Elektronen am Ort \mathbf{r}_1 (pro Volumeneinheit) zu finden – unabhängig von der Position des anderen – ist mit (7.128) gegeben durch

$$\rho(\mathbf{r}_1) = |\psi_{100}^{(2)}(\mathbf{r}_1)|^2 \int |\psi_{100}^{(2)}(\mathbf{r}_2)|^2 d^3 r_2 = |\psi_{100}^{(2)}(\mathbf{r}_1)|^2 \quad . \tag{7.132}$$

(Das Integral in (7.132) ist gleich eins.) Entsprechend ist die Wahrscheinlichkeit dafür, eines der Elektronen (pro Volumeneinheit) am Ort \mathbf{r}_2 zu finden

$$\rho(\mathbf{r}_2) = |\psi_{100}^{(2)}(\mathbf{r}_2)|^2 \quad . \tag{7.133}$$

Nun ersetzen wir den reziproken Abstand der Elektronen in (7.131) durch den quantenphysikalischen Mittelwert. Dieser Mittelwert ist der reziproke Abstand, gewichtet mit dem Produkt der Wahrscheinlichkeiten (7.132) und (7.133), integriert über alle Werte \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 , also

$$\left\langle \frac{1}{|\mathbf{r}_{1} - \mathbf{r}_{2}|} \right\rangle_{11} = \int \int \frac{\rho(\mathbf{r}_{1}) \,\rho(\mathbf{r}_{2})}{|\mathbf{r}_{1} - \mathbf{r}_{2}|} \, d^{3}r_{1} \, d^{3}r_{2} = \\ = \int \int \frac{|\psi_{100}^{(2)}(\mathbf{r}_{1})|^{2} \,|\psi_{100}^{(2)}(\mathbf{r}_{2})|^{2}}{|\mathbf{r}_{1} - \mathbf{r}_{2}|} \, d^{3}r_{1} \, d^{3}r_{2} \quad . \quad (7.134)$$

(Der Index 11 bedeutet $n_1 = 1$, $n_2 = 1$.) Der Zähler des Integranden in (7.134) ist nichts anderes als das Betragsquadrat des ortsabhängigen Teils

¹¹ Die systematische Entwicklung dieser Methode heißt *Störungstheorie* der Quantenphysik.

der Wellenfunktion (7.128). Das Integral (7.134) kann exakt berechnet werden. Man findet 12

$$\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle_{11} = \frac{5}{4a_0}$$
 (7.135)

Damit folgt aus (7.131) die Energieverschiebung des Grundzustandes

$$\Delta E_{11} = \frac{5\alpha\hbar c}{4a_0} = \frac{5}{4}mc^2\alpha^2 = \frac{5}{2}R_\infty \quad . \tag{7.136}$$

Die gesamte Energie des Grundzustandes ist mit (7.122) und (7.118)

$$E_{11} = E_{11}^{(0)} + \Delta E_{11} = -8 R_{\infty} + \frac{5}{2} R_{\infty} = -5.5 R_{\infty} = -74.85 \,\text{eV} \quad . \quad (7.137)$$

Dieser Wert ist mit der experimentell bestimmten Energie $E_{11}^{(\text{exp.})} = -78.975$ eV zu vergleichen. Die Störungsrechnung bringt den Wert ohne Coulomb-Abstoßung ($E_{11}^{(0)} = -108.9$ eV) in die Nähe des experimentellen Werts; die Übereinstimmung ist aber nicht perfekt. Der Grund dafür ist die Tatsache, dass die Coulomb-Abstoßung *nicht klein* ist, und damit ist die Voraussetzung für die Gültigkeit der Störungsrechnung nicht optimal erfüllt. (Das Verhältnis zwischen der Coulomb-Abstoßung und der Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektronen und Kern ist aus dem Modell der Abb. 7.16 quantitativ ablesbar.)

Die Übereinstimmung zwischen der mit dem halbklassischen Modell berechneten Energie des Grundzustandes (Aufgabe 77) ist ähnlich wie die Übereinstimmung mit dem Wert der Störungsrechnung.

Nun wenden wir uns den **angeregten Zuständen** von **Parahelium** zu. Für jeden dieser Zustände ist das He-Atom nach (7.129) sicher im Spinzustand $\chi_0^{(a)}$ und es genügt, den ortsabhängigen Teil der Wellenfunktion (7.129) zu betrachten. Um die anschließende Rechnung übersichtlicher zu gestalten, wählen wir folgende vereinfachte Bezeichnung:

$$\psi_{100nlm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv \psi_{1n}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_1(\mathbf{r}_1) \, \psi_n(\mathbf{r}_2) + \psi_1(\mathbf{r}_2) \, \psi_n(\mathbf{r}_1) \right] \,. \quad (7.138)$$

Der quantenmechanische Ausdruck des reziproken Abstandes der beiden Elektronen muss gewichtet werden mit der Wahrscheinlichkeit dafür, eines der Elektronen am Ort \mathbf{r}_1 und das andere am Ort \mathbf{r}_2 zu finden. Diese Wahrscheinlichkeit (jeweils pro Volumeneinheit) ist gleich dem Betragsquadrat der Wellenfunktion (7.138). Der quantenmechanische Ausdruck des reziproken Abstandes ist also

$$\left\langle \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right\rangle_{1n} = \int \int \frac{|\psi_{1n}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \ d^3r_1 \ d^3r_2 \quad . \tag{7.139}$$

¹² Siehe z. B. L.I. Schiff, Quantum Mechanics, McGraw-Hill (1955) p. 175.

330 7 Systeme identischer Quantonen

Aus (7.138) folgt

$$\begin{aligned} |\psi_{1n}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2})|^{2} &= \frac{1}{2} \left\{ |\psi_{1}(\mathbf{r}_{1})\psi_{n}(\mathbf{r}_{2})|^{2} + |\psi_{1}(\mathbf{r}_{2})\psi_{n}(\mathbf{r}_{1})|^{2} + \overline{\psi_{1}(\mathbf{r}_{1})\psi_{n}(\mathbf{r}_{2})}\psi_{1}(\mathbf{r}_{2})\psi_{n}(\mathbf{r}_{1}) + \overline{\psi_{1}(\mathbf{r}_{2})\psi_{n}(\mathbf{r}_{1})}\psi_{1}(\mathbf{r}_{1})\psi_{n}(\mathbf{r}_{2}) \right\}.$$
(7.140)

Die Integrale (7.139) der ersten beiden Summanden von (7.140) sind identisch, denn sie sind vollkommen symmetrisch bezüglich einer Vertauschung der Integrationsvariablen \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 . Dasselbe gilt für den dritten und vierten Summanden in (7.140). Somit können wir die der Coulomb-Abstoßung (7.131) entsprechende Energieverschiebung schreiben (wieder in der vollständigen Nomenklatur) als

$$\Delta E_{1nl} = \alpha \hbar c \left\{ \int \int \frac{|\psi_{100}^{(2)}(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_{nlm}^{(2)}(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3 r_1 d^3 r_2 + \int \int \frac{\overline{\psi_{100}^{(2)}(\mathbf{r}_1)\psi_{nlm}^{(2)}(\mathbf{r}_2)}}{|\mathbf{r}_{100}(\mathbf{r}_2)\psi_{100}^{(2)}(\mathbf{r}_1)\psi_{nlm}^{(2)}(\mathbf{r}_1)} d^3 r_1 d^3 r_2 \right\} \quad . \quad (7.141)$$

Die Integrale in (7.141) sind unabhängig von m und können deshalb für m = 0 berechnet werden. Da die Einteilchen-Wellenfunktionen (7.120) bekannt sind, haben die Integrale (7.141) wohl definierte Werte, die (analytisch oder nummerisch) ausgewertet werden können. Die Energieverschiebung ist l-abhängig; somit sind die Zustände mit festem n nicht mehr entartet – in Übereinstimmung mit den experimentellen Energiewerten (Abb. 7.14).

Wir schreiben die Energieverschiebung (7.141), entsprechend den beiden Integralen, in der Form

$$\Delta E_{1nl}^{(\text{para})} = \Delta E_{1nl}^{(\text{versch.})} + \Delta E_{1nl}^{(\text{ident.})} \quad . \quad (n \ge 2)$$
(7.142)

Die beiden Terme in (7.141) bzw. (7.142) haben ganz unterschiedliche physikalische Bedeutung. Wären die beiden Elektronen verschiedene Quantonen, dann wäre die Energieverschiebung allein durch den ersten Term ($\Delta E_{1nl}^{(\text{versch.})}$) bestimmt. Dieser Term repräsentiert die Coulomb-Abstoßung zwischen den Quantonen und ist positiv: Die Bindungsenergie wird reduziert. Der zweite Term rührt von der Symmetrisierung der örtlichen Zweiteilchen-Wellenfunktion her; er ist ebenfalls positiv ($\Delta E_{1nl}^{(\text{ident.})} > 0$) und repräsentiert die Austauschkraft (Austauschwechselwirkung) zwischen den (identischen) Quantonen (Abschn. 7.1.1). In diesem Fall ist die Austauschkraft abstoßend.

Schließlich behandeln wir die stationären Zustände von **Orthohelium**. Für jeden dieser Zustände ist das System nach (7.130) sicher in einem der drei (symmetrischen) Spinzustände $\chi_{M_z}^{(s)}$ ($M_z = -1, 0, +1$). Also können wir uns wiederum auf den örtlichen Teil der Wellenfunktion (7.130) beschränken, der in diesem Fall antisymmetrisch ist. Die Herleitung für Parahelium (angeregte Zustände), die von (7.138) zum Resultat (7.142) führte, lässt sich hier wiederholen. Das Ergebnis für Orthohelium ist (verifiziere!)

$$\Delta E_{1nl}^{(\text{ortho})} = \Delta E_{1nl}^{(\text{versch.})} - \Delta E_{1nl}^{(\text{ident.})} \quad . \quad (n \ge 2)$$
(7.143)

Es treten also dieselben Inegrale auf; der einzige Unterschied zum früheren Resultat ist das Vorzeichen des zweiten Terms, das von der Antisymmetrisierung der örtlichen Wellenfunktion herrührt. Da $\Delta E_{1nl}^{(\text{ident.})}$ positiv ist, ist die Austauschkraft zwischen den Elektronen im Fall von Orthohelium anziehend.

Der Energie*unterschied* zwischen Para- und Orthohelium ist für jedes Paar von (n, L)-Zuständen nach (7.122), (7.142) und (7.143)

$$E_{1nl}^{(\text{para})} - E_{1nl}^{(\text{ortho})} = 2\,\Delta E_{1nl}^{(\text{ident.})} > 0 \quad . \quad (n \ge 2) \tag{7.144}$$

Wir erwarten also, dass der Orthozustand stärker gebunden ist als der entsprechende Parazustand. Die experimentell gefundenen Energiewerte in Abb. 7.14 sind eine klare Demonstration der theoretischen Vorhersage (7.144).

7.2 Bosonen und Fermionen

Im letzten Abschnitt haben wir konkrete Zwei-Quanton-Systeme untersucht, die aus ununterscheidbaren (d. h. identischen) Quantonen zusammengesetzt sind. Die Grundlage dafür war die *Permutationssymmetrie*. Dabei hatten wir folgende *These* aufgestellt:

Die Gesamtwellenfunktion des zusammengesetzten Systems ist symmetrisch für identische Quantonen mit Spin Null (Abschn. 7.1.1) bzw. antisymmetrisch für identische Quantonen mit Spin 1/2 (Abschn. 7.1.3).

Die gute Übereinstimmung der erhaltenen Resultate mit den Experimenten (beispielsweise für das Heliumatom) können wir als klare *Bestätigung* dieser These auffassen (wenigstens für Zwei-Quanton-Systeme).

In diesem Abschnitt wollen wir versuchen, die Resultate des Abschn. 7.1 in zwei Richtungen zu verallgemeinern:

- 1. für Mehrteil
chensysteme identischer Quantonen mit einer Teilchenzahl
 $N>2\,;$
- 2. für Mehrteilchensysteme aus identischen Quantonen beliebiger Spinwerte.

Die nachfolgenden Abschnitte werden die fundamentalen Konsequenzen dieser Zusammenhänge für den ganzen Bereich der Physik (– und darüber hinaus!) demonstrieren.

Zunächst formulieren wir die erwähnte These für eine beliebige Zahl von (identischen) Quantonen. Dabei lassen wir uns insbesondere von Aufgabe 70 inspirieren.

332 7 Systeme identischer Quantonen

Wir schreiben die Gesamtwellenfunktion Ψ des Systems symbolisch als $\Psi(a_1, a_2, ..., a_N)$, wobei $a_1, ..., a_N$ die Ein-Quanton-Zustände der N Quantonen bezeichnet, die am Zustand des Gesamtsystems beteiligt sind. Die Zustände a beziehen sich im Allgemeinen auf den Orts- und Spinraum (siehe dazu Aufgabe 79). Die Identität der Quantonen verlangt dann, dass die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten die Permutationssymmetrie aufweisen:

$$\frac{|\Psi(a_1, ..., \boldsymbol{a_i}, ..., \boldsymbol{a_j}, ..., a_N)|^2 = |\Psi(a_1, ..., \boldsymbol{a_j}, ..., \boldsymbol{a_i}, ..., a_N)|^2}{\text{für alle Paare } (a_i, a_j) \quad (i, j = 1, 2, ..., N) \quad .$$
(7.145)

Die symmetrische Gesamtwellenfunktion, definiert durch

ist sicher eine Lösung der Gleichung (7.145). Ebenso ist die **antisymmetri**sche Gesamtwellenfunktion, definiert durch

$$\frac{\Psi^{(a)}(a_1, ..., a_i, ..., a_j, ..., a_N) = -\Psi^{(a)}(a_1, ..., a_j, ..., a_i, ..., a_N)}{\text{für alle Paare } (a_i, a_j) \quad (i, j = 1, 2, ..., N) \quad ,$$
(7.147)

eine Lösung der Gl. (7.145).

Es stellt sich nun heraus, dass die Gesamtwellenfunktionen der Mehr-Quanton-Systeme identischer Quantonen *entweder* symmetrisch (7.146) *oder* antisymmetrisch (7.147) sind. In der Natur sind genau diese zwei Typen von Wellenfunktionen realisiert. Man erkennt dies auf dieselbe Art, wie wir die eingangs erwähnte These verifiziert haben: Die unter der Annahme *symmetrischer* bzw. *antisymmetrischer* Wellenfunktionen berechneten Resultate stimmen mit den experimentellen Befunden exakt überein.

Wir fassen zusammen:

Es existieren zwei Sorten von Quantonen: Solche, deren Mehrteilchen-Wellenfunktionen **symmetrisch** sind – sie heißen **Bosonen**, und solche, deren Mehrteilchen-Wellenfunktionen **antisymmetrisch** sind – diese heißen **Fermionen**.

Dabei stellen wir fest (wiederum empirisch):

Bosonen haben ganzzahlige Werte der Spinquantenzahl; Fermionen haben halbzahlige Spinwerte.

Ein Beispiel für die allgemeine Relation zwischen Symmetriecharakter der Permutation und Spin ist die eingangs erwähnte These betreffend Quantonen mit Spin Null und Spin 1/2.

Der allgemeine Zusammenhang zwischen dem Spin des Quantons und dem Typ der Permutationssymmetrie der Gesamtwellenfunktion lässt sich im Rahmen der Quantenfeldtheorie theoretisch beweisen; der Beweis ist sehr anspruchsvoll.

Die Klassifizierung der Quantonen nach Fermionen und Bosonen ist von fundamentaler Bedeutung, denn Systeme aus identischen Fermionen verhalten sich radikal verschieden gegenüber solchen aus identischen Bosonen (siehe Abschnitte 7.3 und 7.4).

Deshalb ist es wichtig, auch von zusammengesetzten Quantonen den Spintyp (ganzzahlig oder halbzahlig) zu kennen. Wenn wir die Spintypen der Bestandteile zusammengesetzter Quantonen kennen, dann ist diese Aufgabe einfach zu lösen. Wir erinnern uns an die Zusammensetzung der Drehimpulse unabhängiger Teilsysteme (Aufgabe 75). Aus Gleichung (7.164) geht hervor, dass die Regeln der Zusammensetzung lauten:

$$ganzzahlig + ganzzahlig = ganzzahlig$$
$$halbzahlig + halbzahlig = ganzzahlig$$
$$ganzzahlig + halbzahlig = halbzahlig . (7.148)$$

Damit lässt sich bestimmen, ob zusammengesetzte Quantonen Fermionen oder Bosonen sind (Aufgabe 80). Aus (7.148) folgt beispielsweise:

Quantonen, die aus einer *ungeraden* Anzahl Fermionen zusammengesetzt sind, sind *Fermionen*; solche, die aus einer *geraden* Anzahl von Fermionen bestehen, sind *Bosonen*.

7.3 Das Pauli-Prinzip

In diesem Abschnitt befassen wir uns mit Systemen identischer *Fermionen*. Das fundamentale Prinzip, das die Struktur dieser Syteme bestimmt, ist das $Pauli-Prinzip^{13}$:

In einem System von N identischen Fermionen müssen alle (N) Ein-Quanton-Zustände **verschieden** sein.

Wären zwei Ein-Quanton-Zustände nämlich gleich – beispielsweise $a_i \equiv a_j = b$ – dann folgt aus (7.147)

$$\Psi^{(a)}(a_1, ..., b, ..., b, ..., a_N) \equiv 0 \quad : \tag{7.149}$$

Fermionische Systeme mit zwei gleichen Ein-Quanton-Zuständen existieren also nicht!

¹³ W. Pauli, Z. Physik **31** (1925) 765.

7.3.1 Atombau

Die Atome sind die elementaren Bausteine für alle Formen der Materie (molekulare Gase, Flüssigkeiten, kondensierte Materie etc.). Ihre Eigenschaften – eine Anwendung der Quantenphysik – bilden die Grundlagen für die Materialwissenschaften und die gesamte Chemie. Wie wir sehen werden, spielt dabei das Pauli-Prinzip eine zentrale Rolle.

Wir beschränken uns auf das Studium der **Grundzustände** der *neutralen* Atome. Dabei lassen wir uns von den Erfahrungen mit dem Wasserstoff- und dem Heliumatom leiten.

Wir arbeiten in der Näherung des unendlich massiven (punktförmigen) Atomkerns. Die (identischen) Elektronen befinden sich also im äußeren Coulomb-Feld des Kerns der Punktladung Ze. Zudem erfahren sie die Coulomb-Abstoßung untereinander.

Das beim "einfachen" Heliumatom benutzte, recht komplizierte Verfahren zur Bestimmung der stationären Zustände führt für Atome mit vielleicht 50 oder 100 Elektronen nicht zum Ziel. Alle erfolgreichen Näherungsmethoden zur Behandlung der schwereren Atome (wir gehen auf die Einzelheiten nicht ein) beruhen auf der Idee, ein *kugelsymmetrisches Gesamtpotential* U(r) zu konstruieren, das einerseits die anziehende Coulomb-Kraft des einzelnen Elektrons mit dem Kern und andererseits die kollektive Wirkung der Coulomb-Abstoßung der übrigen (Z - 1) Elektronen einschließt. Die Methoden zur Bestimmung dieses Potentials sind "selbstkonsistent", d. h. sie benutzen ein iteratives Verfahren: Ein Potential $U_1(r)$ wird angenommen, die Wellenfunktionen in diesem Potential werden näherungsweise berechnet und aus der resultierenden Dichte- bzw. Ladungsverteilung wird ein verbessertes Potential $U_2(r)$ bestimmt. Das Verfahren wird wiederholt, bis sich das gewonnene Potential bei weiteren Iterationen nur noch unwesentlich ändert.

In diesem kugelsymmetrischen Potential $U^{(Z)}(r)$ eines Atoms der Elektronenzahl Z bewegen sich seine Elektronen *unabhängig* voneinander. Damit ist das *Vielteilchen*problem auf ein *Einteilchen*problem reduziert!

Nun suchen wir die stationären Zustände des Einelektronproblems (siehe Anhang B). Der einzige Unterschied zum Wasserstoffatom ist die unterschiedliche r-Abhängigkeit des Potentials. Die Wellenfunktion $\psi^{(Z)}(r, \theta, \phi)$ des Elektrons im Ortsraum wird dadurch nur in ihrer r-Abhängigkeit verändert; die θ - und ϕ -Abhängigkeit sowie die Struktur der Quantenzahlen bleiben gleich. Die Einelektronen-Wellenfunktionen sind also von der Form

$$\psi_{nlm_{l}}^{(Z)}(r,\theta,\phi) = R_{nl}^{(Z)}(r) Y_{lm_{l}}(\theta,\phi)$$
(7.150)

 $(m_l \text{ ist die magnetische Quantenzahl zu }l)$. Die Z-Abhängigkeit des Einelektronproblems ist ausschließlich in der radialen Wellenfunktion $R_{nl}^{(Z)}(r)$ sowie in der Energie $E_{nl}^{(Z)}$ des stationären Zustandes enthalten. Die Struktur des Energiespektrums des Einelektronproblems ist somit ähnlich zum Energiespektrum des Wasserstoffatoms (Abb. 5.31) – mit einem wesentlichen Unterschied: Die Zustände mit fester Hauptquantenzahl n und verschiedener

Element	Konfiguration	Z
Н	1s	1
He	$(1s)^2$	2
Li	$(1s)^2 2s$	3
Be	$(1s)^2(2s)^2$	4
В	$(1s)^2(2s)^2 2p$	5
С	$(1s)^2(2s)^2(2p)^2$	6
Ν	$(1s)^2(2s)^2(2p)^3$	7
etc.		

Tabelle 7.4. Elektronenkonfigurationen der leichtesten Atome.

Drehimpulsquantenzahl l sind *nicht* mehr entartet und die Energiewerte sind natürlich Z-abhängig.

Die (zeitunabhängige) Gesamtwellenfunktion des Elektrons ist gegeben durch das Produkt (Abschn. 7.1.3)

$$\Psi_{nlm_{l}m_{s}}^{(Z)} = \psi_{nlm_{l}}^{(Z)} \cdot \chi_{m_{s}} \quad , \tag{7.151}$$

wobei χ_{m_s} die Wellenfunktion des Elektrons im Spinraum ist. Der Entartungsgrad des Ein-Quanton-Zustandes (7.150) ist also

$$(2l+1)\left(2\frac{1}{2}+1\right) = 2(2l+1)$$
 . (7.152)

Nun kommt das Pauli-Prinzip zum Zug. Die Konfiguration des Grundzustandes des Atoms Z erhalten wir durch "Auffüllen" der Z-Elektronen im Einelektronenspektrum, sodass die Summe der Energien

$$E_0^{(Z)} = \sum_{i=1}^{Z} E_{nl}^{(i)} \tag{7.153}$$

den kleinst möglichen Wert hat. Nach dem Pauli-Prinzip dürfen dabei *keine* zwei Elektronen denselben Ein-Quanton-Zustand einnehmen. Beispielsweise enthält ein s-Zustand nach (7.152) nie mehr als zwei Elektronen, und ein p-Zustand kann höchstens sechs Elektronen aufnehmen etc.¹⁴ Auf diese Weise erhalten wir für jedes Atom Z eine Grundzustandsenergie $E_0^{(Z)}$ sowie die Konfiguration seiner Z Elektronen, ausgedrückt in Besetzungszahlen (ν) der Einelektronenzustände $(n, l)^{\nu}$ (Tabelle 7.4).

Das sukzessive Auffüllen der Elektronen mit zunehmendem Z ist in Abb. 7.17 dargestellt.

¹⁴ Die Aussage, die Zustände werden durch die Elektronen aufgefüllt oder gewisse Elektronen nehmen bestimmte Zustände ein, kann irreführend sein. Die Elektronen sind bekanntlich ununterscheidbar!



Abb. 7.17. Die Reihenfolge der Einelektronenenergien beim Auffüllen der Elektronen in die einzelnen Zustände des Atoms, für die Grundzustände der Atome (schematisch). Angegeben sind die Elektronenzahlen vollständig besetzter Zustände, abgeschlossener Schalen sowie die Gesamtelektronenzahlen nach Schalenabschluss.

Wir wollen hier nur *eine* von vielen Gesetzmäßigkeiten herausstreichen, die mit der *Periodenstruktur* der Atome zu tun hat. Gewisse Konfigurationen sind dadurch ausgezeichnet, dass der Abstand zum energetisch höheren Zustand groß ist; man spricht von "abgeschlossenen Schalen". Die entsprechenden Atome (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn) sind energetisch besonders stabil: Es sind die *Edelgase*.

Die reichhaltigen Eigenschaften der Atome, die in den Konfigurationen der skizzierten selbstkonsistenten Feldmethoden enthalten sind, werden in der Literatur ausführlich diskutiert.

Das periodische System der Elemente, das vom Physiker und Chemiker Dimitri Mendeleev (1834 - 1907) aufgrund empirischer Befunde unter dem Titel "Experimentelles System der Elemente" publiziert wurde, blieb für mehr als 50 Jahre ein Mysterium. Das von Wolfgang Pauli (1900 - 1958) in jungen Jahren entdeckte, oft als "Ausschließungsprinzip" bezeichnete Gesetz lieferte den Schlüssel zur Begründung des periodischen Systems der Elemente im Rahmen der Quantenphysik. Ohne Pauli-Prinzip wären alle Elektronen der Atome im energetisch tiefsten Einelektronenzustand: Die unterschiedlichen chemischen Eigenschaften der Atome würden verschwinden! Es ist undenkbar, wie unsere Welt aussehen würde.

7.3.2 Metalle-Halbleiter-Isolatoren

Die revolutionären Entwicklungen in der Technik der Festkörperkomponenten der letzten Jahrzehnte beruht auf dem Verständnis der *Leitungsmechanismen des elektrischen Stromes.* Diese Mechanismen sind quantenphysikalische Phänomene. Zur Erklärung der elektrischen Leitung benützen wir hier gewisse Resultate der Quantenphysik der Festkörper, ohne diese herzuleiten.

Wir studieren die elektrische Leitung kristalliner Festkörper an einfachen Modellen mit N Atomkernen, die in einem Gitter äquidistant angeordnet sind, und ZN Elektronen.

In Anlehnung an unsere früheren Systeme betrachten wir den Festkörper zunächst als eine Art "großes Atom" und interessieren uns für dessen **stationäre Zustände**. In der Näherung unendlich massiver Atomkerne werden die Gitterschwingungen vernachlässigt: Die Atomkerne sind in Ruhe.

Die stationären Zustände des neutralen Atoms der Kernladung Z sind uns aus Abschn. 7.3.1 bekannt. Wir stellen nun die Frage: Wie ändern sich die Energien der stationären Zustände der Elektronen der Atome, wenn wir N davon äquidistant längs einer Geraden anordnen (Abb. 7.18)?

Die Quantentheorie des Festkörpers liefert dazu die Antwort:

Die Energien der Einelektronenzustände der Atome spalten sich auf in **Energiebänder**, von denen jedes N verschiedene, eng benachbarte Energiewerte aufweist (siehe Abb. 7.19).

Wir wollen dieses wichtige Resultat für den *Spezialfall* N = 2 näher diskutieren und in Verbindung bringen mit dem physikalisch verwandten Problem des Stickstoffatoms im Ammoniakmolekül (Abschn. 5.2.6).

In Abb. 7.20 ist der "Festkörper $N = 2^{\circ}$ dargestellt. Die potentielle Energie U(x) eines Elektrons im Coulomb-Feld der zwei Atomkerne als Funktion der Position x auf der Verbindungsgeraden der Kerne ist aufgezeichnet. Dieses Potential lässt sich durch das doppelte Kastenpotential der Abb. 5.22 approximieren. Das entsprechende Problem (in der eindimensionalen Variante) wurde im Abschn. 5.2.6 exakt berechnet und kann als Modell des Festkörpers N = 2 betrachtet werden. Die vier tiefsten Energien der stationären Zustände in Abb. 5.23(b) entsprechen genau dem Energiespektrum der Abb. 7.19(a)



Abb. 7.18. Modell eines linearen Festkörpers aus N Atomen mit Gitterkonstante d.



Abb. 7.19. (a) Energiebänder eines linearen Kristalls mit N = 6 Atomen (schematisch). (b) Gitterabstand $d \to \infty$: Die N Energien jedes Bandes fallen mit den Einelektronenergien des Atoms zusammen.



Abb. 7.20. "Festkörper $N = 2^{\circ}$: potentielle Energie eines Elektrons im Coulomb-Feld der beiden Atomkerne $K_{1,2}$.

für N = 2. Im Grenzfall $d \to \infty$ fallen je zwei davon mit den Energien im einzelnen Potentialtopf zusammen (gestrichelte Linie in Abb. 5.23(a)) und entsprechen damit den Energien der Zustände 1s und 2s der Abb. 7.19(b).

Die Wellenfunktionen der stationären Zustände sind nach Abb. 5.24 *de-lokalisiert*; das Quanton (bei uns das Elektron) ist also über den Festkörper

verteilt, mit einer Wahrscheinlichkeitsdichte am Ort jedes Atomkerns, die praktisch gleich ist. Daraus schließen wir:

Die (alle) Elektronen im stationären Festkörper sind delokalisiert – und damit nicht mehr an einzelne Atomkerne gebunden.

Nachdem wir nun die Struktur der Einelektronenzustände kennen (Abb. 7.19), können wir daran gehen, den **Grundzustand** des Festkörpers zu konstruieren. Dabei spielt das Pauli-Prinzip wiederum die entscheidende Rolle. Ähnlich wie beim neutralen Atom (Abschn. 7.3.1) füllen wir die Einelektronenzustände mit den insgesamt NZ (identischen) Elektronen auf (– wir erinnern nochmals an *Fußnote 14*). Genau wie beim Atom gibt es (wegen des Elektronenspins) maximal 2(2l + 1) Elektronen in jedem Zustand (nl).

Wir unterscheiden zunächst zwei Typen von Systemen (Abb. 7.21), nämlich solche, die im (aufgefüllten) Grundzustand ein nur *teilweise* besetztes Energieband aufweisen, und solche, deren Energiebänder alle voll besetzt sind.

Der Grundzustand des Festkörpers entspricht dem Zustand eines vollständig isolierten Systems, deren Atomkerne in Ruhe sind (Näherung unendlich massiver Kerne). Wir können auch sagen, der Grundzustand entspricht dem Idealfall des Temperaturnullpunkts.

Befindet sich der Festkörper dagegen in einer Umgebung **endlicher Temperatur** T, dann führen die Atomkerne Gitterschwingungen aus; Energieportionen von der Größenordnung kT (k: Boltzmannsche Konstante) werden mit der Umgebung ausgetauscht und das System wird im Allgemeinen in



Abb. 7.21. Elektronenbesetzung im Grundzustand eines Festkörpers (schematisch); (a) letztes Energieband teilweise besetzt, (b) letztes Energieband voll besetzt.

eine Vielzahl *angeregter Zustände* versetzt. Die Situation ist in Abb. 7.22 dargestellt, wobei drei verschiedene Fälle unterschieden sind.

Der <u>1. Fall</u> (Abb. 7.22(a)) entspricht dem Grundzustand der Abb. 7.21(a) mit teilweise besetztem Energieband. Als Folge des Energieaustauschs mit der Umgebung befindet sich der Festkörper in angeregten Zuständen; die Elektronen sind in energetisch höhere Zustände gehoben (vorwiegend innerhalb des teilweise besetzten Bandes selbst).

Der <u>2. Fall</u> (Abb. 7.22(b)) entspricht dem Grundzustand der Abb. 7.21(b) mit vollbesetzten Energiebändern. Zudem ist angenommen, dass die Energielücke ΔE zum ersten unbesetzten Band viel größer ist als kT ($\Delta E \gg kT$). Wegen der großen Energielücke gibt es praktisch keine Elektronen, die energetisch angehoben werden können, und deshalb sind keine angeregten Zustände des Festkörpers beteiligt.

Der <u>3. Fall</u> (Abb. 7.22(c)) unterscheidet sich vom 2. Fall lediglich dadurch, dass die Energielücke zum unbesetzten Band nicht viel größer ist als kT. Damit sind angeregte Zustände des Festkörpers, in denen Elektronen ins nächst höhere Band (welches bei T = 0 leer ist) angehoben sind, am Prozess beteiligt.

Nun betrachten wir den eigentlichen Prozess der **elektrischen Leitung** im Festkörper.

Im klassischen Bild führen die quasifreien Elektronen Stöße aus, einerseits unter sich sowie mit den Ionen des Gitters. In einem äußeren elektri-



Abb. 7.22. Elektronenbesetzung angeregter Zustände eines Festkörpers bei endlicher Temperatur T (schematisch). (a) Metall; (b) Isolator; (c) Halbleiter.

schen Feld werden die Elektronen zwischen zwei Zusammenstößen beschleunigt bzw. verzögert. Daraus resultiert im Mittel ein elektrischer Strom in entgegengesetzter Richtung des **E**-Feldes [KP-2-10]. Die Voraussetzung für die Entstehung eines elektrischen Stromes ist also die *Beweglichkeit der Elektronen*.

Wir kehren zurück zur Quantenphysik der Abb. 7.22. Energetisch betrachtet wird bei der elektrischen Leitung Beschleunigungsenergie der Elektronen im **E**-Feld vom Festkörper aufgenommen und als Joulsche Wärme an die Umgebung abgegeben. Damit diese Prozesse überhaupt möglich sind, muss der Festkörper Energie aufnehmen bzw. abgeben können. Es müssen also *Über*gange zwischen verschiedenen stationären Zuständen des Festkörpers möglich sein.

Wir studieren zunächst den <u>2. *Fall.*</u> Wegen $\Delta E \gg kT$ sind also keine angeregten Zustände des Festkörpers im Spiel. Das Pauli-Prinzip verbietet Energieaustausch durch Elektronensprünge innerhalb des voll besetzten Bandes, denn dadurch würden identische Einelektronenzustände mehrfach besetzt. Somit ist in dieser Konstellation *keine* elektrische Leitung möglich: Die entsprechenden Festkörper sind **Isolatoren**.

Im Gegensatz dazu ist in den anderen beiden Fällen (Abb. 7.22(a)(c)) Energieaustausch durch Übergänge zwischen angeregten Zuständen des Festkörpers möglich, da Elektronenzustände sowohl höherer als auch tieferer Energie "unbesetzt" sind. Damit existieren "bewegliche" Elektronen und die Voraussetzung für Stromleitung ist erfüllt. Diese Festkörper sind tatsächlich *elektrische Leiter*.

Inwieweit unterscheiden sich die beiden Konstellationen (a) und (c)? Bei fester Temperatur T ist die Beweglichkeit der Elektronen im 1. Fall um viele Zehnerpotenzen größer als im 3. Fall, wo die Energielücke ΔE ein Hindernis für den Energieaustausch darstellt. Deshalb sind in der Konstellaion (a) viel mehr Elektronen am Energieaustausch beteiligt und können damit zur elektrischen Leitung beitragen. Im <u>1. Fall</u> ist der Festkörper ein **Metall**, im <u>3. Fall</u> ein **Halbleiter**.

Die beiden Leitertypen unterscheiden sich auch in der Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit. Aus Abb. 7.22 geht hervor, dass im Grenzübergang $T \rightarrow 0$ der (ideale) Halbleiter in einen Isolator übergeht $(kT \ll \Delta E)!$ Daraus kann man verstehen, dass die Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit für Halbleiter im Allgemeinen viel größer ist als für Metalle.

Die Halbleiter haben eine enorme technische Bedeutung erlangt.

Durch den Einbau von Fremdatomen, die sich in ihrer Elektronenzahl von jener der Halbleiteratome unterscheiden, können die elektrischen Eigenschaften des Halbleiters gezielt verändert werden. Die Kombination solcher modifizierter Halbleiterschichten führte (beispielsweise) zur Entdeckung des **Transistors**, der als binäres Logikelement für Computer optimal geeignet und generell als Grundelement der modernen *Mikroelektronik* (irgendwelcher Schaltungen) unentbehrlich geworden ist.

7.3.3 Atomkerne (Schalenmodell)

Die Entwicklung in der Kernphysik um die Mitte des 20. Jahrhunderts erinnert an die Geschichte des periodischen Systems der Elemente (Abschn. 7.3.1). Es zeigte sich empirisch, dass gewisse Atomkerne besonders *stabil* sind. Im Vergleich zu den Kernen benachbarter Nukleonenzahlen zeichnen sie sich durch höhere Energien ihrer angeregten Zustände aus. Zudem ist die Wahrscheinlichkeit dafür, ein weiteres Nukleon aufzunehmen, klein (relativ zu den Nachbarkernen). Man spricht von "*magischen Atomkernen*"; die entsprechenden Protonen- bzw. Neutronenzahlen heißen "magische Zahlen".

Die magischen Zahlen sind (empirisch):

$$2, \quad 8, \quad 20, \quad 28, \quad 50, \quad 82, \quad 126 \quad . \tag{7.154}$$

Besonders stabil sind die so genannten "doppelt magischen Kerne", für welche sowohl die Protonenzahl Z als auch die Neutronenzahl N magisch ist, nämlich

$${}^{4}_{2}\text{He}, {}^{16}_{8}\text{O}, {}^{40}_{20}\text{Ca} \text{ und } {}^{208}_{82}\text{Pb}$$
. (7.155)

(Die Neutronenzahlen dieser Kerne sind N = A - Z = 2, 8, 20 bzw. 126.)

Ein naheliegender Versuch zur Erklärung der magischen Zahlen besteht darin, die erfolgreichen Methoden der Atomphysik auf die Kerne zu übertragen. Dabei muss der grundlegende Unterschied der beiden Systeme beachtet werden: Die Kerne bestehen aus zwei verschiedenen Sorten von je identischen Fermionen, nämlich den Protonen und den Neutronen. Wir müssen sowohl ein mittleres Potential $U_A^{(Z)}(r)$ für Protonen als auch ein solches für Neutronen, $U_A^{(N)}(r)$, definieren. In Analogie zur Atomphysik ist $U_A^{(Z)}(r)$ die potentielle Energie eines einzelnen Protons in einem Kern der Nukleonenzahl A, als Folge der mittleren, kollektiven Wechselwirkung der übrigen (A-1) Nukleonen (es exisiert kein Kraftzentrum wie beim Atom!), bezüglich des Schwerpunktsystems des Kerns. Entsprechend ist $U_A^{(N)}(r)$ die potentielle Energie eines Neutrons im Kraftfeld der übrigen Nukleonen.

Im Gegensatz zu den langreichweitigen Coulomb-Kräften der Atome sind die Kernkräfte (und damit auch die Potentiale) kurzreichweitig. Die Potentiale für Protonen und Neutronen unterscheiden sich insbesondere hinsichtlich der abstoßenden Coulomb-Kraft zwischen den Protonen.

Die Abb. 7.23 zeigt typische Potentiale für Protonen und Neutronen.

Das Potential des Protons ist ähnlich dem Potential des α -Teilchens im ²⁴¹Am-Kern (Abb. 5.14); das Neutronpotential dagegen hat keinen repulsiven Anteil.

Man denkt sich nun den Kern der Nukleonenzahl A in zwei unabhängige Teilsysteme zerlegt, das eine bestehend aus Protonen, das andere aus Neutronen. Die Energie des Grundzustandes des Gesamtsystems (A) ist dann die Summe der Grundzustandsenergien jedes Teilsystems. In jedem Teilsystem wird der Grundzustand wiederum nach der Strategie des Pauli-Prinzips konstruiert (analog zum Atom).



Abb. 7.23. Einteilchenpotential für Protonen (nach rechts) und für Neutronen (nach links) (schematisch).

Es stellte sich aber heraus, dass der hier skizzierten Methode kein voller Erfolg beschieden ist. Zwar resultieren aus diesem Verfahren einzelne besonders stabile Kerne, die entsprechenden Nukleonenzahlen stimmen aber nur zum Teil mit den empirischen Werten (7.154) überein. Man war der Erklärung der magischen Zahlen auf der Spur – zum eigentlichen Durchbruch fehlte aber noch ein wichtiges Element.

Es waren die Arbeiten von Maria Goeppert-Meyer und von O. Haxel, J.H.D. Jensen und H.E. Suess, die zeigten, dass in den Kernen eine besonders große **Spin-Bahn-Kopplung**¹⁵ existiert, die zu einer wesentlichen Verschiebung der Einteilchenenergien der kugelsymmetrischen Potentiale führt. Diese Zusatzwechselwirkung liefert schließlich (zusammen mit den kugelsymmetrischen Potentialen) die Erklärung der magischen Zahlen (7.154) (und vieler anderer Eigenschaften) der Atomkerne. Wir sprechen vom Schalenmodell mit Spin-Bahn-Kopplung.

Das Pauli-Prinzip ist somit auch zum Verständnis der Eigenschaften der Atomkerne von zentraler Bedeutung.

7.4 Bosonische Systeme

7.4.1 Das Bose-Einstein-Kondensat im Gas

Albert Einstein hat 1925 aufgrund von statistischen Überlegungen vorausgesagt, dass ein ideales Quantengas von Bosonen unterhalb einer kritischen

¹⁵ Der Mechanismus ist im Zusammenhang mit der Feinstruktur des Wasserstoffatoms (Abschn. 7.1.4) erklärt.

Temperatur "kondensiert", indem eine zunehmende Zahl von Bosonen in den tiefsten Quantenzustand (ohne kinetische Energie) übergeht¹⁶.

Siebzig Jahre später wurde die so genannte Bose-Einstein-Kondensation (BEC) in neutralen Gasen der Alkaliatome ${}^{87}_{37}$ Rb, ${}^{23}_{11}$ Na und ${}^{7}_{3}$ Li, die in einer "magnetischen Falle" (äußeres Potential) eingeschlossen sind, bei extrem tiefen Temperaturen experimentell nachgewiesen¹⁷. In den letzten Jahren hat die Physik der BEC sowohl experimentell als auch theoretisch ungeahnte Aktivitäten ausgelöst.

Wir wollen als Erstes die faszinierende experimentelle Technik, die diese Entdeckung erst ermöglichte, kurz diskutieren.

Die Entstehung des BEC-Zustandes eines Bose-Gases kann man sich vereinfacht folgendermaßen vorstellen. Wir betrachten das Gas, bestehend aus N Atomen, im thermischen Gleichgewichtszustand der Temperatur T. Nach dem Äquipartitionsgesetz [KP-2-14.3] ist die mittlere kinetische Energie der Atome

$$\left\langle \frac{m}{2} v^2 \right\rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{3}{2} kT$$
 (7.156)

Damit ist der mittlere Impuls eines Atoms von der Größe

$$\overline{p} \simeq \sqrt{\langle p^2 \rangle} = \sqrt{3mkT}$$
 . (7.157)

Wir betrachten die Streuung der Atome im Gas. Nach der λ -Regel (Abschn. 2.2.2) ist die De-Broglie-Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p} = \hbar \frac{2\pi}{p} \tag{7.158}$$

ein Maß für die quantenmechanische Größe oder Ausdehnung der Objekte. Wir können nun für p in (7.158) den Mittelwert (7.157) einsetzen und erhalten die "Größe der Atome" als Funktion der Temperatur. Die eigentliche thermische De-Broglie-Wellenlänge ist definiert als

$$\lambda(T) = \hbar \sqrt{\frac{2\pi}{mkT}} \quad . \tag{7.159}$$

Wenn wir die Temperatur des Gases langsam absenken, dann wird die De-Broglie-Wellenlänge (7.159) immer größer, bis sie den mittleren Abstand d der Atome im Gas erreicht. In dem Moment beginnen die räumlich ausgedehnten Wellenpakete der einzelnen Atome sich zu überlagern und der Kondensationsprozess setzt ein: Man beobachtet immer mehr Atome des Gases, die in den tiefsten Quantenzustand des Systems übergehen – das Bose-Einstein-Kondensat beginnt sich zu formieren. Die Kondensation setzt bei der kritischen Temperatur T_0 ein, die also charakterisiert ist durch

¹⁶ In einem Brief an *Ehrenfest* bemerkte *Einstein*: "…. Die Theorie ist hübsch, aber ob auch etwas Wahres daran ist?"

¹⁷ Für diese Entdeckung wurden Eric A. Cornell, Wolfgang Ketterle und Carl E. Wieman mit dem Nobelpreis für Physik 2001 ausgezeichnet.



Abb. 7.24. Entstehung eines Bose-Einstein-Kondensats im Na-Gas (Erklärungen im Text) [D.S. Durfee and W. Ketterle, Optics Express 2 (1998) 300].

$$\lambda(T_0) \simeq d \quad . \tag{7.160}$$

Die experimentellen Bedingungen, unter denen der BEC-Prozess abläuft, sind äußerst ungewönlich¹⁸. Damit man den Prozess überhaupt auslösen kann, muss das Gas stark verdünnt sein (auf typisch $10^{14} - 10^{15}$ Atome pro cm³). Man muss nämlich verhindern, dass die Atome durch die normalen Kondensationsprozess der Verflüssigung und Verfestigung, die gewöhnlich früher einsetzen, für den BEC-Prozess verloren sind. Die starke Verdünnung des Gases garantiert, dass die Dreierstöße der Atome, welche die normalen Kondensationsprozesse auslösen, äußerst selten sind. Die starke Verdünnung bedingt dann aber, mit (7.160) und (7.159), extrem tiefe Werte der kritischen Temperatur T_0 (im Bereich (0.5 - 2) × 10^{-6} K). Zur Diskussion der verschiedenen Methoden der Abkühlung und der übrigen experimentellen Problemlösungen verweisen wir auf die Literatur.

In Abb. 7.24 ist die Beobachtung der Entstehung eines Bose-Einstein--Kondensats von $^{23}_{11}$ Na-Atomen dargestellt¹⁹.

Der Nachweis des Na-Kondensats erfolgte mit Hilfe eines Strahls von resonantem Laserlicht. In vertikaler Richtung ist die Absorption des Laserlichts als Funktion zweier Richtungen in der Ebene senkrecht zum Strahl aufgetragen. Die Absorption wurde mit einer CCD-Kamera gemessen. Die drei Bilder stellen Wolken der langsam expandierenden Na-Atome dar, 6×10^{-3} s nachdem die magnetische Falle plötzlich abgeschaltet wurde. Die Abkühlung (in der magnetischen Falle) im linken Bild erfolgte bis unmittelbar oberhalb der kritischen Temperatur von $T_0 = 2 \times 10^{-6}$ K. Im mittleren Bild wurde die Abkühlung bis zur Entstehung des Kondensats weitergeführt. Im rechten Bild ist die Abkühlung (durch Verdampfung) bis unterhalb T_0 erfolgt, sodass ein

¹⁸ W. Ketterle, "Experimental studies of Bose-Einstein-Condensation", Phys. Today, Dec. 1999, p. 30.

¹⁹ K.B. Davis et al., Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 3969.

fast reines Kondensat übrig bleibt. Die Breite des Kondensat
bildes beträgt 1.0 mm; das Kondensat enthält $N_0\simeq 7\times 10^5$ Na-Atome!

In den folgenden Betrachtungen vernachlässigen wir die Wechselwirkung zwischen den Atomen. Im Grenzfall $T \rightarrow 0$ besteht das Bose-Einstein-Kondensat aus N_0 Bosonen, die *alle im gleichen Einteilchenzustand* sind. Die (zeitunabhängige) Wellenfunktion Ψ des Kondensatzustandes ist dann das Produkt der Einteilchen-Wellenfunktionen $\psi_1(\mathbf{r})$,

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_{N_0}) = \prod_{i=1}^{N_0} \psi_1(\mathbf{r}_i) \quad .$$
 (7.161)

Die Gesamtwellenfunktion (7.161) erfüllt erstens die Permutationssymmetrie, die für identische Quantonen zu fordern ist, und ist zweitens symmetrisch unter Permutationen – eine Eigenschaft, die für Bosonen gelten muss. Die Einteilchen-Wellenfunktion $\psi_1(\mathbf{r})$ ist die Wellenfunktion des (stationären) Grundzustandes des Bosons im Potential der magnetischen Falle (typisch das Potential eines dreidimensionalen harmonischen Oszillators). Aus (7.161) folgt

$$|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_{N_0})|^2 = \prod_{i=1}^{N_0} |\psi_1(\mathbf{r}_i)|^2 = \prod_{i=1}^{N_0} \rho_1(\mathbf{r}_i) \quad , \tag{7.162}$$

Der Ausdruck (7.162) beschreibt die Wahrscheinlichkeit dafür, ein Boson an der Stelle \mathbf{r}_1 , eines bei \mathbf{r}_2 , eines bei \mathbf{r}_3 etc. und eines bei \mathbf{r}_{N_0} zu finden. Wir fragen: Was ist die Wahrscheinlichkeit $\rho_{N_0}(\mathbf{r})$ dafür, an der Stelle \mathbf{r} ein Boson des Kondensats (pro Volumeneinheit) zu finden? Wegen der Normierung der Einteilchen-Wellenfunktion ist $\rho_1(\mathbf{r})$ die Wahrscheinlichkeit dafür, an der Stelle \mathbf{r} genau ein Boson zu finden. Somit ist

$$\rho_{N_0}(\mathbf{r}) = N_0 \,\rho_1(\mathbf{r}) \quad . \tag{7.163}$$

Die Gleichung (7.163) besagt, dass die Dichte des Kondensats durch die Einteilchen-Wahrscheinlichkeitsdichte festgelegt ist, und N_0 mal größer ist als diese.

Wir haben es hier mit einer *speziellen Form der Materie* zu tun, die enorm hohe Teilchendichten aufweist, im Vergleich zu Ein-Quanton-Systemen. Die Situation hat Ähnlichkeit mit der hohen Photonendichte im Laserstrahl. Alle Bosonen im Kondensat haben identische Eigenschaften. Dies steht im krassen Gegensatz zum Verhalten der Systeme identischer Fermionen, wo das Pauli-Prinzip gleiche Eigenschaften verbietet²⁰.

²⁰ Das Verhalten identischer Bosonen im Vielteilchensystem wurde schon mit dem Verhalten der Schafe in der Herde verglichen: Die Bosonen sind die Schafe unter den Quantonen. Im BEC machen die Bosonen nicht nur alle dasselbe – sie durchdringen sich sogar! Im Gegensatz dazu sind die Fermionen die Individualisten unter den Quantonen. Gleichzeitig sind sie aber ununterscheidbar: Die Fermionen sind geklonte Individualisten!

Die Betrachtungen bis jetzt basierten auf der Vernachlässigung der Wechselwirkung zwischen den Bosonen im System. Die Reichhaltigkeit der neuen Systeme kommt jedoch erst dann zum Ausdruck, wenn die Wechselwirkung zwischen den Bosonen einbezogen wird. Es zeigt sich beispielsweise, dass eine *repulsive* Wechselwirkung zwischen den Atomen auf ein *stabiles* Kondensat führt, das langsam expandiert (Abb. 7.24). Ein System oberhalb einer kritischen Größe mit *attraktiver* Wechselwirkung dagegen ist *instabil* und führt zum Kollaps des Kondensats: Ein Teil der Bosonen wird ausgeworfen und ein kleineres Kondensat bleibt zurück – ähnlich einer Supernova. (Die Wissenschaftler nennen das Ereignis "Bose nova"!)

Zusammenfassend können wir die Aspekte der BEC-Physik im Gas in zwei Dichtebereiche gliedern.

Einmal haben wir das **atomare Kondensat** im Bereich niedriger Dichte, das durch eine schwache Wechselwirkung zwischen den Bosonen charakterisiert ist. Die Zukunftsvision hier ist die Realisierung des so genannten "Atomlasers", d. h. eines intensiven, kohärenten Atomstrahls, ähnlich dem Laserstrahl für Photonen. Wichtige Anwendungen des Atomlasers in vielen Bereichen der Physik sind geplant (siehe Fußnote 18). Es gibt bereits erste Anordnungen zur Erzeugung kohärenter Atomstrahlen. Von besonderer Faszination sind die überraschenden Interferenzphänomene zwischen verschiedenen Bose-Einstein-Kondensaten.

Im Bereich hoher Dichte können wir das Kondensat im Gas als neue **Quantenflüssigkeit** bezeichnen, in Anlehnung an die Suprafluidität von ⁴He und ³He (Abschn. 7.4.2). Hier stehen die Aspekte des Mehrteilchensystems, bedingt durch die Wechselwirkungen der Bosonen, im Vordergrund. Eine Reihe von kollektiven Phänomenen wurde bereits untersucht (*Fußnote 18*). Neue Entwicklungen (etwa der Nachweis der Suprafluidität) zeigen, dass eine ganze Reihe von Quantenphänomenen in direkter Weise erforscht werden kann – die Zukunftsperspektiven sind viel versprechend.

7.4.2 Suprafluidität und Supraleitung

Die Suprafluidität von Helium und die Supraleitung gehören zu den (älteren) spektakulären makroskopischen Manifestationen der Quantenphysik. Genauso wie der BEC-Prozess im Gas basieren sie auf der *bosonischen Struktur* der Vielteilchensysteme.

Suprafluidität

Das natürlich vorkommende He-Atom besteht fast ausschließlich aus Atomen mit einem ${}^{4}_{2}$ He-Atomkern (in $1.3 \times 10^{-3}\%$ der He-Atome ist der Atomkern ${}^{3}_{2}$ He). Helium hat die tiefste Siedetemperatur aller bekannten Substanzen. Sie beträgt für ⁴He (bei Atmosphärendruck) 4.2 K (für ³He ist es 3.2 K). Kühlt man ⁴He weiter ab, dann manifestiert sich – beispielsweise in der spezifischen Wärme – bei der Temperatur $T_{\lambda} = 2.18$ K ein weiterer Phasenübergang. Die Abb. 7.25 zeigt die gemessene spezifische Wärme von flüssigem ⁴He unterhalb 4 K.

Aufgrund der " λ -Form" der Kurve der spezifischen Wärme nennt man den Phasenübergang " λ -Punkt" und bezeichnet die entsprechende kritische Temperatur mit T_{λ} . Die flüssige Phase von ⁴He für $T > T_{\lambda}$ nennt man He I, diejenige unterhalb T_{λ} He II.

Stellvertretend für eine Reihe von erstaunlichen Effkten von He II zeigen wir in Abb. 7.26 die selbstständige Entleerung eines mit He II gefüllten Bechers.

Wird ein Becher aus einem He II-Bad gehoben, dann sinkt das Flüssigkeitsniveau im Becher langsam ab. Die Flüssigkeit entleert sich über den Rand des Bechers und tropft in das Bad zurück! Die Erklärung: Der He II-Film, der sich nach Heben des Bechers an dessen Oberfläche bildet, ist ungewönlich dick und wirkt wie ein Saugheber. Die potentielle Energiedifferenz der Gravitation zwischen den beiden Enden des Films bewirkt die Entleerung des Bechers.

Die Geschwindigkeit, mit der sich der Becher entleert, ist ein Maß für die Zähigkeit (Viskosität), die bekanntlich die innere Reibung der Flüssigket charakterisiert [KP-1-5.4]. Die Zähigkeit von He II ist ungewöhnlich klein.

Es mutet zunächst merkwürdig an, dass eine Flüssigkeit, die aus ${}_{2}^{3}$ He besteht, in der Umgebung von T_{λ} keinen entsprechenden Phasenübergang zeigt – obschon die beiden He-Atome sehr ähnliche chemische Eigenschaften haben. Sie unterscheiden sich "nur" durch die Zahl der Neutronen ihrer Kerne. Genau dieser Unterschied liefert aber den Schlüssel zur Erklärung des λ -



Abb. 7.25. Spezifische Wärme von flüssigem ⁴He bei 1 atm.



Abb. 7.26. Ein Becher mit flüssigem He II entleert sich von selbst!

Punktes in He II: ⁴He (bestehend aus sechs Fermionen) ist ein *Boson*, ³He dagegen (mit seinen fünf Fermionen) ist ein Fermion.

Obschon wir davon ausgehen müssen, dass die Wechselwirkung zwischen den ⁴He-Atomen in der Flüssigkeit wesentlich ist, können wir hoffen, einen ersten Überblick des Systemverhaltens zu gewinnen, indem wir diese Wechselwirkung einmal vernachlässigen. Wir betrachten also ein **ideales Bosonen-gas** von N Atomen, das in einem Kubus eingeschlossen ist, und suchen die stationären Einteilchenzustände. (Dies ist genau das Szenario von *Einstein*, 1925.) Die Lösung des Problems²¹ ist in Abb. 7.27 schematisch dargestellt.

Das Modell enthält eine kritische Temperatur T_B , die wir später mit T_λ identifizieren werden. Die Bilder (a), (b) und (c) stellen die Besetzungen der Einteilchenzustände für drei verschiedene Temperaturbereiche (bzw. Temperaturen) schematisch dar. Bei der Temperatur T = 0 (a) sind alle Bosonen im Grundzustand. Dies entspricht dem Bose-Einstein-Kondensat (Abschn. 7.4.1). Hier ist $\psi_1(\mathbf{r})$ die Wellenfunktion des Bosons im Grundzustand im Kubus. Für $T > T_B$ und makroskopische Bosonenzahlen N (c) sind fast alle Bosonen in angeregten Zuständen (der Grundzustand ist nicht makroskopisch besetzt). Im Zwischenbereich $0 < T < T_B$ (b) gibt es zwei Gruppen

²¹ D.R. Tilley and J. Tilley, Superfluidity and Superconductivity, Institute of Physics Publishing (1990).



Abb. 7.27. Besetzung der Einteilchenzustände des idealen Bosonengases für drei verschiedene Temperaturen (schematisch). (a) T = 0, (b) $0 < T < T_B$ und (c) $T > T_B$.

von Besetzungen; sowohl der Grundzustand als auch die angeregten Zustände sind je *makroskopisch* besetzt.

Im Rahmen des (idealen) Bosonengasmodells kann man die Temperatur T_B abschätzen, indem man die experimentell bekannte Dichte von flüssigem ⁴He in den Ausdruck für T_B einsetzt. Das Resultat (Referenz Fußnote 21: $T_B \simeq 3.1$ K) ist nahe beim experimentellen Wert für T_{λ} , sodass wir T_B des Modells mit der Temperatur des λ -Punktes identifizieren können. Die Situation (c) der Abb. 7.27 entspricht also der Phase He I und (b) der Phase He II (Abb. 7.25).

Von zentraler Bedeutung ist die Phase He II. Sie besteht also aus zwei Komponenten, die eine ist das Bose-Einstein-Kondensat (die Bosonen im Grundzustand) und die andere entspricht der Phase He I (die Bosonen im angeregten Zustand). Der Phasenübergang am λ -Punkt unterscheidet sich wesentlich beispielsweise vom Phasenübergang gasförmig - flüssig bei T = 4.12K. Da die Bosonen ununterscheidbar sind, können die beiden Komponenten von He II physikalisch niemals getrennt werden – im Unterschied zum Phasenübergang vom Gas zur Flüssigkeit, wo beide Phasen räumlich getrennt erscheinen. Nun kommen wir zum wichtigsten Punkt. Experimentell ist bekannt, dass die BEC-Komponente von He II **suprafluid** ist, d. h. die Zähigkeit der BEC-Komponente im He II verschwindet: Diese Komponente ist eine reibungsfreie Flüssigkeit.

Können wir Reibungsfreiheit im Rahmen des Bosonengasmodells verstehen? Wir denken uns flüssiges He II zwischen zwei ebenen, parallelen Platten im Grenzfall $T \rightarrow 0$. Wir wollen die Wellenfunktion des Bose-Einstein-Kondensats konstruieren für den Zustand, in welchem die Bosonen den festen Impuls **p** haben. Ihre Einteilchen-Wellenfunktion $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ ist dann charakterisiert durch den Eigenwert \mathbf{p} des Impulses. Nach der Heisenbergschen Ungleichung im Impuls und Ort erstreckt sich die räumliche Ausdehnung des Bosons über das ganze System. Die Gesamtwellenfunktion Ψ des Kondensats ist wiederum gegeben durch den Ausdruck (7.161), wobei $\psi_1(\mathbf{r})$ durch $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ zu ersetzen ist. Dieser Zustand entspricht einer kollektiven Gesamtbewegung der Flüssigkeit He II. Falls das System einmal in diesem Bewegungszustand ist und keine energetische Einwirkung von außen erfolgt, dann haben die Bosonen keinen Grund, ihren Gemeinschaftszustand zu verändern – sie bleiben in diesem Zustand. Das ist die Erklärung der Superfluidität für ein System, dessen Verhalten durch das Modell des idealen Bosonengases approximiert werden kann.

Man darf nicht übersehen, dass dieses Modell – wegen der real existierenden Wechselwirkung zwischen den Bosonen – keine vollständige Erklärung des Phänomens sein kann. Andererseits gibt es bis heute noch keine vollständige, mikroskopische Theorie der Suprafluidität von ⁴He.

Die Abwesenheit eines Phasenübergangs für **flüssiges** ³**He** in der Umgebung des λ -Punktes hatten wir damit begründet, dass die ³He-Atome Fermionen sind. Bei viel tieferen Temperaturen ($T \sim 2 \times 10^{-3}$ K) beobachtet man aber auch im flüssigen ³He Phasenübergänge in einen BEC-Zustand. Wie erklärt sich dieser scheinbare Widerspruch? Die (schwachen) anziehenden Kräfte zwischen zwei ³He-Atomen führen zu einem *molekularen* Bindungszustand, der energetisch bevorzugt ist. Das gebundene molekulare System ist natürlich ein *Boson*, und damit ist die Bose-Einstein-Kondensation wieder möglich.

Dieser Mechanismus hat eine interessante Entsprechung in der Supraleitung der Metalle.

Supraleitung

Ein Supraleiter ist ein stromführendes System, dessen Widerstand für Temperaturen $T < T_c$ unmessbar klein ist; T_c heißt Sprungtemperatur (oder kritische Temperatur). Man hat in geschlossenen Kreisen von Supraleitern Ströme beobachtet, die – einmal erzeugt – jahrelang fließen, ohne messbare Joulsche Wärmeverluste zu erzeugen. Im supraleitenden System erfolgt also ein Phasenübergang bei der Sprungtemperatur T_c .
Zwischen der Supraleitung und der Suprafluidität gibt es Gemeinsamkeiten, aber auch markante Unterschiede. Wie wir anschließend zeigen werden, beruht der Phasenübergang bei T_c – genauso wie derjenige bei T_{λ} in ⁴He – auf der Bose-Einstein-Kondensation. Das Phänomen der Supraleitung ist reichhaltiger; man kennt mehr als tausend Metalle, Legierungen, intermetallische Verbindungen und Halbleiter, die supraleitend sind. Im Gegensatz dazu war die Suprafluidität bis vor kurzem (d.h. vor der Entdeckung der Bose-Einstein-Kondensation) auf ⁴He und ³He beschränkt.

Die Supraleitung ist aufs Engste mit dem Magnetismus verknüpft²². Ihre technische Bedeutung, mit wichtigen Anwendungen in den Bereichen Erzeugung und Messung von Magnetfeldern, Entwicklung elektronischer Komponenten sowie Energiespeicherung und -transport, ist groß.

Die Supraleitung wurde 1911 durch Heike Kamerlingh Onnes am Quecksilber entdeckt. Nach intensiver Forschung während fast fünfzig Jahren haben dann John Bardeen, Leo N. Cooper und John R. Schrieffer 1957 eine theoretische Erklärung der Supraleitung von Metallen vorgelegt, die so genannte BCS-Theorie. (Wir kommen anschließend darauf zurück.) Die von Georg Bednorz und K. Alex Müller 1986 an einem Metalloxyd entdeckte so genannte "Hochtemperatur-Supraleitung" hat zahlreiche neue Impulse ausgelöst. Die Supraleitung ist heute – experimentell und theoretisch – ein hoch aktives Forschungsgebiet²³.

Wir beschränken uns hier auf die Erklärung der Supraleitung einfacher Metalle.

Zunächst betrachten wir den metallischen *Normalleiter* (Abschn. 7.3.2). Bei tiefen Temperaturen ist das letzte Energieband, das Elektronen enthält, unvollständig besetzt (Abb. 7.21(a)). Die Elektronen in diesem Band sind für die Stromleitung verantwortlich.

Man kann zeigen, dass beim metallischen Normalleiter mit *ideal-periodischer* Gitterstruktur für $T \to 0$ die Leitfähigkeit theoretisch unendlich wird. Jedes Metall hat aber Gitterfehlstellen (Verunreinigungen etc.), die eine Abweichung von der periodischen Gitterstruktur bewirken. Die Gitterfehlstellen sorgen dafür, dass beim metallischen Normalleiter für $T \to 0$ die Leitfähigkeit *endlich* bleibt. Der Normalleiter zeigt also *kein* supraleitendes Verhalten für $T \to 0$; die Supraleitung muss eine andere Erklärung haben.

Alle Elektronen in den Energiezuständen des idealen Metalls erstrecken sich räumlich über das ganze System. Diejenigen in den vollständig besetzten Energiebändern besitzen aber keine Mobilität; sie haben erhöhte Aufenthaltswahrscheinlichkeit an den Orten der Atomkerne. Diese Situation lässt sich in einem einfachen physikalischen Bild zusammenfassen: Das Metall verhält sich als "Ionengitter plus Elektronengas", wobei die Elektronen des Gases für die

²² Siehe beispielsweise die Demonstrationsexperimente in KP-2-10.2.

²³ T.M. Silver, S.X. Dou and J.X. Jin, Applications of high temperatur superconductors, Europhys. News, May/June 2001; G.L. Sewell, Quantum Mechanics and its Emergent Macrophysics, Princeton University Press (2002), chapter 8.

elektrische Leitung zuständig sind. (Das Bild ist nicht wörtlich zu nehmen: *Alle* Elektronen sind delokalisiert (auch diejenigen, die die positiven Ionen bilden) – denn die Elektronen sind ununterscheidbar!)

Der entscheidende Schritt zum Verständnis der Supraleitung im Rahmen der BCS-Theorie war die Erkenntnis von *Cooper*, dass zwei Leitungselektronen im Metall einen gebundenen Zustand eingehen können (das so genannte Cooper-Paar), der ein Boson darstellt. Dies ist zunächst erstaunlich, denn zwei Elektronen stehen unter dem Einfluss der abstoßenden Coulomb-Kraft. Befinden sie sich aber im Ionengitter des Metalls, dann haben sie zusätzlich eine anziehende Wechselwirkung, die unter Umständen über die Abstoßung dominieren kann. Diese Anziehung lässt sich durch das folgende vereinfachte Bild veranschaulichen. Befindet sich ein Elektron zwischen zwei positiven Ionen, dann übt es auf diese eine Anziehung aus, welche die beiden Ionen näher zusammenbringt. Ein solcher Ort wirkt gesamthaft als Anziehung für die übrigen Elektronen des Gases. Dieser Mechanismus bewirkt im Mittel eine Anziehung zwischen je zwei Elektronen des Gases. Sind die Eigenschaften des Metals derart, dass diese Anziehung über die Coulomb-Abstoßung zwischen zwei Elektronen dominiert, dann resultiert aus der Bildung eines Cooper-Paares die Absenkung der Energie des Systems, sagen wir um den Betrag ΔE . Bei genügend tiefer Temperatur – nämlich für $T < T_c(!)$ – werden alle Leitungselektronen Cooper-Paare bilden. Auch die Cooper-Paare sind räumlich ausgedehnt, weshalb sie die Gitterfehlstellen im Kristall "übersehen". Die Situation nach Bildung der Cooper-Paare ist in Abb. 7.28 dargestellt.

Dieser Prozess der Besetzung des Grundzustandes durch die Elektronen (als Cooper-Paare) ist wiederum eine *Bose-Einstein-Kondensation*; die Cooper-Paare sind Bosonen mit Spin Null (die Spins der beiden Elektronen des Paares koppeln zum Gesamtspin Null).

Die Bildung der Cooper-Paare aus den Elektronen (Fermionen) ist physikalisch völlig analog zur Bildung der Bosonen aus den ³He-Atomen (Fermionen) im flüssigen ³He.

Im letzten Schritt geht es darum, aus der Konstellation der Leitungselektronen der Abb. 7.28 den Prozess der Supraleitung zu erklären. Man muss zeigen: Ist das System in einem stromleitenden Zustand, dann kann sich der



Abb. 7.28. Besetzung des Grundzustandes durch die Leitungselektronen (als Cooper-Paare) eines supraleitenden Metalls (schematisch).

Zustand ohne äußere Einwirkung nicht mehr ändern. Ein elektrischer Strom bedeutet hier, dass sich die Cooper-Paare (beispielsweise längs eines geraden Leiterstücks) in einem Eigenzustand des Impulses (Eigenwert **p**) befinden. Alle Cooper-Paare sind im Grundzustand und bewegen sich *kollektiv* in **p**-Richtung (entgegengesetzt der Stromrichtung). Wegen der Energielücke ΔE (Abb. 7.28) können die Bosonen diesen Zustand ohne äußere Energieeinwirkung nicht verlassen: Der Strom fließt weiter.

Die Begründung der Supraleitung von Metallen hat eine genaue Entsprechung in der Begründung der Suprafluidität von flüssigem ⁴He bei $T \to 0.$

Wir müssen betonen, dass von der hier präsentierten vereinfachten Erklärung der Supraleitung bis hin zum Verständnis der BCS-Theorie, welche u. a. vorhersagen kann, *welche* Metalle supraleitend sind und welche nicht, noch ein langer gedanklicher Weg zu beschreiten ist!

Aufgabe 67 Zwei Quantonen im Kastenpotential. Zwei Quantonen mit Spin Null (Masse m) befinden sich im unendlich tiefen Kastenpotential der Breite a (Abschn. 5.1.1). Die Wechselwirkung zwischen den Quantonen sei vernachlässigbar. Zuerst nehmen wir an, die beiden Quantonen seien unterscheidbar, d. h. verschieden.

1. Bestimme die Energie und die örtliche Wellenfunktion des Grundzustandes des Gesamtsystems.

Der erste angeregte Zustand des Gesamtsystems ist zweifach entartet.

2. Bestimme die Energie und die beiden örtlichen Wellenfunktionen des ersten angeregten Zustandes.

Nun nehmen wir an, die beiden Quantonen seien identisch.

- 3. Bestimme wiederum Energie und Wellenfunktion des Grundzustandes.
- 4. Bestimme Energie und Wellenfunktion des ersten angeregten Zustandes. Ist der Zustand entartet?

Hinweis: Die Gesamtwellenfunktion eines Systems von identischen Quantonen mit Spin Null ist symmetrisch.

Aufgabe 68 Abstand zweier Quantonen. Zwei identische Quantonen mit Spin Null (Masse m) befinden sich im unendlich tiefen Kastenpotential der Breite a (Abschn. 5.1.1). Die Wechselwirkung zwischen den Quantonen sei vernachlässigbar. Das System sei im Grundzustand.

- 1. Berechne die Wurzel aus dem Mittelwert des Abstandsquadrates der beiden Quantonen, d. h. die Größe $\sqrt{\langle (x_1 x_2)^2 \rangle}$. Hinweis: Wähle als Koordinatenursprung (x = 0) die Mitte des Kastens.
- Ändert sich der Abstand der Quantonen, falls diese unterscheidbar und somit verschieden sind?

Aufgabe 69 Austauschkraft. Zwei Quantonen mit Spin Null befinden sich in verschiedenen Ein-Quanton-Zuständen A, B, die durch die örtlichen Wellenfunktionen $\psi_A(x)$ und $\psi_B(x)$ charakterisiert sind. Die Wechselwirkung zwischen den Quantonen sei vernachlässigt.

1. Berechne den Mittelwert des Abstandsquadrates der beiden Quantonen, d. h. die Größe

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x_1^2 \rangle + \langle x_2^2 \rangle - 2 \langle x_1 x_2 \rangle \quad ;$$

falls die beiden Quantonen verschieden sind. Das Resultat soll durch die Mittelwerte bezüglich der Einteilchen-Wellenfunktionen $\psi_A(x)$, $\psi_B(x)$ ausgedrückt werden.

2. Berechne den Mittelwert des Abstandsquadrates, falls die beiden Quantonen *identisch* sind. Das Resultat soll durch die Mittelwerte bezüglich der Einteilchen-Wellenfunktionen sowie das Überlappungsintegral

$$\langle x \rangle_{AB} \equiv \int x \, \overline{\psi_A(x)} \, \psi_B(x) \, dx$$

ausgedrückt werden.

Hinweis: Die Gesamtwellenfunktion eines Systems von identischen Quantonen mit Spin Null ist symmetrisch.

Aufgabe 70 Drei identische Quantonen. Drei Quantonen befinden sich in einem gemeinsamen äußeren Potential. Die Wechselwirkung unter ihnen sei vernachlässigbar. Wir betrachten drei stationäre Einteilchenzustände A, B, C mit den örtlichen Wellenfunktionen $\psi_A(x)$, $\psi_B(x)$, $\psi_C(x)$. Die drei Zustände sind im Allgemeinen verschieden voneinander.

Zuerst setzen wir Quantonen voraus, die voneinander unterscheidbar sind; die Quantonen sind also *verschieden*.

1. Konstruiere alle örtlichen Wellenfunktionen $\psi(x_1, x_2, x_3)$ des Drei-Quanton-Systems, für welche die drei Quantonen in den Zuständen A, B, C sind.

Nun setzen wir voraus, dass die drei Quantonen *identisch* sind und suchen die entsprechenden Wellenfunktionen des Drei-Quanton-Systems.

2. Konstruiere die örtliche Wellenfunktion $\psi^{(a)}(x_1, x_2, x_3)$ des Drei-Quanton-Systems, welche *antisymmetrisch* ist unter der Vertauschung der Rolle von je zwei der Zustände A, B, C. (Die Einteilchenzustände A, B, C seien verschieden voneinander.)

Hinweis: Wir lassen uns anhand des Zwei-Quanton-Systems inspirieren. Die antisymmetrische Lösung (7.11) lässt sich schreiben als Determinante

$$\psi^{(a)}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \begin{array}{c} \psi_A(x_1) \ \psi_B(x_1) \\ \psi_A(x_2) \ \psi_B(x_2) \end{array} \right|$$

Wir vermuten, dass die gesuchte Wellenfunktion die Form der so genannten Slater-Determinante hat:

$$\psi^{(a)}(x_1, x_2, x_3) = rac{1}{\sqrt{6}} egin{pmatrix} \psi_A(x_1) \ \psi_B(x_1) \ \psi_C(x_1) \ \psi_A(x_2) \ \psi_B(x_2) \ \psi_C(x_2) \ \psi_A(x_3) \ \psi_B(x_3) \ \psi_C(x_3) \ \end{pmatrix}$$

Zeige, dass die Wellenfunktion $\psi^{(a)}(x_1, x_2, x_3)$ normiert ist und unter Vertauschung der Rolle von je zwei Einteilchenzuständen in $-\psi^{(a)}(x_1, x_2, x_3)$ übergeht.

- 3. Wie lautet die entsprechende symmetrische örtliche Wellenfunktion $\psi^{(s)}(x_1, x_2, x_3)$ des Drei-Quanton-Systems? (Die Einteilchenzustände A, B, C seien verschieden voneinander.)
- 4. Welches ist die örtliche Wellenfunktion des Grundzustandes des Drei-Quanton-Systems?

Aufgabe 71 Zwei Quantonen mit Spin 1/2. Zwei Quantonen mit Spin 1/2 bilden ein Zwei-Quanton-System mit Eigendrehimpuls (Gesamtspin)

$$\stackrel{\rightarrow}{\mathbf{S}}=\stackrel{\rightarrow}{\mathbf{s}}^{(1)}+\stackrel{\rightarrow}{\mathbf{s}}^{(2)}$$

wobei $\stackrel{\rightarrow}{\mathbf{s}}^{(i)}$ die Eigendrehimpulse der beiden Quantonen sind.

Berechne die Größen $\langle S_x \rangle$, $\langle S_y \rangle$, $\langle S_z \rangle$, $\langle S_x^2 \rangle$, $\langle S_y^2 \rangle$, $\langle S_z^2 \rangle$, $\langle S_z^2 \rangle$, $\langle S_\perp^2 \rangle \equiv \langle S_x^2 + S_y^2 \rangle$, $\Delta S_x, \Delta S_y$ und ΔS_z für die Eigenzustände der z-Komponente M_z des Gesamtspins:

Aufgabe 72 Wasserstoffatom I. Die (nicht-relativistische) Spin-Bahn-Kopplung der Feinstrukturaufspaltung im Wasserstoffatom ist proportional zum Mittelwert $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl}$.

- 1. Berechne $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{21}$ für den 2*p*-Zustand.
- 2. Bestimme daraus die Energieaufspaltung des 2p-Zustandes durch die Spin-Bahn-Kopplung und vergleiche das Resultat mit der vollständigen Feinstrukturaufspaltung (in eV).

Aufgabe 73 Wasserstoffatom II. Berechne die magnetische Hyperfeinaufspaltung des 2s-Zustandes des Wasserstoffatoms (in eV). *Hinweis*: Verwende das Resultat (7.100)

Aufgabe 74 Pionischer Wasserstoff. Negativ geladene Pionen (Masse m_{π} = $139.57 \,\mathrm{MeV}/c^2$; Spin Null) können das Elektron eines Wasserstoffatoms ersetzen und ein pionisches Atom, d. h. einen gebundenen Zustand des (p, π^{-}) -Systems bilden $(m_p = 938.27 \,\mathrm{MeV}/c^2).$

- 1. Berechne die Energien und die Wellenfunktionen der stationären Zustände.
- 2. Skizziere das Energiespektrum der stationären Zustände mit den zugehörigen Quantenzahlen und zeichne die elektrischen Dipolübergänge ein.
- 3. Wie groß ist die Spin-Bahn-Kopplung?

Aufgabe 75 Kopplung zweier Drehimpulse. Die Drehimpulse \vec{j}_1 und \vec{j}_2 zweier unabhängiger Teilsysteme, mit den Drehimpulsquantenzahlen j_1, j_2 $(j_1 \ge j_2)$, werden zum Drehimpuls des Gesamtsystems

$$\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{j}}_1 + \vec{\mathbf{j}}_2$$

zusammengesetzt. Die möglichen Werte der DrehimpulsquantenzahlJdes Gesamtsystems sind

$$J = j_1 + j_2, \ j_1 + j_2 - 1, \ j_1 + j_2 - 2, \ \dots, \ j_1 - j_2 \quad (j_1 \ge j_2) \quad .$$
(7.164)

Zeige, dass das Resultat (7.164) bedeutet, dass die Gesamtzahl der Zustände des zusammengesetzten Systems in der Basis der j_1 -, j_2 -Zustände identisch ist mit der Gesamtzahl in der Basis aller *J*-Zustände.

Aufgabe 76 Heliumatom I. Berechne die Energie E_{22} des angeregten Zustandes, für welchen beide Elektronen im ersten angeregten Einteilchenzustand $(n_1 = n_2 = 2)$ sind, unter Vernachlässigung der Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen. Vergleiche E_{22} mit der Energie $E_{1\infty}$ des einfach ionisierten Heliumatoms im Grundzustand.

Ist der Zustand (2,2) ein gebundener Zustand des Heliumatoms?

Aufgabe 77 Heliumatom II. Berechne die Energie E_{11} des Grundzustandes von Helium im Bohrschen Atommodell der Abb. 7.16 und vergleiche das Resultat mit dem experimentellen Wert $E_{11}^{(exp.)} = -78.975 \text{ eV}.$

Hinweis: Behandle die Coulomb-Abstoßung als Zusatzpotential.

Aufgabe 78 Zwei Elektronen im Kastenpotential. Zwei Elektronen (Masse m) befinden sich im unendlich tiefen Kastenpotential der Breite a (Abschn. 5.1.1). Zunächst vernachlässigen wir die Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen.

- 1. Bestimme die Energie, die örtliche Wellenfunktion und den Drehimpuls des Grundzustandes des Gesamtsystems.
- 2. Bestimme Energie, örtliche Wellenfunktion und Drehimpuls des ersten angeregten Zustandes. Ist der Zustand entartet?

Nun schalten wir die Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen ein.

3. Gib eine grobe Abschätzung an für die Energieverschiebung ΔE als Folge der Coulomb-Abstoßung (auf der Basis der Störungsrechnung). Welche Bedingung muss erfüllt sein, damit ΔE klein ist gegenüber den Energiewerten ohne Coulomb-Abstoßung?

Aufgabe 79 *Heliumatom III.* Zeige, dass die Gesamtwellenfunktionen der stationären Zustände von Parahelium und Orthohelium unter Vertauschung der Ein-Quanton-Zustände (Ort und Spin!) ins Negative übergehen. **Aufgabe 80** Fermion oder Boson. Sind die folgenden zusammengesetzten Systeme Fermionen oder Bosonen?

Positronium (e^+, e^-) ; Wasserstoffatom (p, e^-) ; Wasserstoffmolekül (H₂); Pionischer Wasserstoff (p, π^-) ; Müonischer Wasserstoff (p, μ^-) ; Antiwasserstoff (\overline{p}, e^+) ; Deuteron (Atomkern) (²₁D); Deuterium (Atom) (²₁D, e^-); α -Teilchen (⁴₂He); Heliumion (⁴₂He, e^-); Heliumatom (⁴₂He, $2e^-$); Lithium 7 (³₃Li); Lithiumatom (⁵₃Li, $3e^-$).

Aufgabe 81 Lithium. Ist ein Festkörper aus Lithiumatomen (Z = 3) ein Metall, ein Isolator oder ein Halbleiter?

8 Materie, Antimaterie und Strahlung

Inhalt: Im Kap. 6 wurden elektromagnetische Prozesse im Rahmen der halbklassischen Theorie von Strahlung und Materie behandelt. In der *Quantenfeldtheo*rie steht uns ein allgemeines (rein quantenphysikalisches) Verfahren zum Studium der dynamischen Eigenschaften quantenphysikalischer Systeme zur Verfügung. Die Komplexität des Verfahrens entzieht sich einer allgemeinen Darstellung im Rahmen einer Einführung. Wir präsentieren hier eine phänomenologische Behandlung von Prozessen und Zerfällen der Teilchenphysik, die auf einer graphischen Darstellung des zeitlichen Ablaufs der Umwandlungen beruht.

Im ersten Abschnitt führen wir das Phänomen der Antimaterie anhand der Entdeckung des Positrons ein.

Anschließend präsentieren wir die elementaren Quantonen der Materie (die Quarks und Leptonen), die zur Erklärung der zahlreichen Prozesse und Zerfälle der Teilchenphysik erforderlich sind, sowie die (aus Quarks) zusammengesetzten Quantonen der Materie (die Baryonen und Mesonen).

Schließlich beschäftigen wir uns mit den *Quantonen der Strahlung* im Rahmen des Standardmodells der Teilchenphysik und diskutieren einfache Prozesse und Zerfälle, die durch die *elektromagnetische*, die *starke* bzw. die *elektroschwache* Wechselwirkung erzeugt werden.

Alle unsere bisherigen quantenphysikalischen Berechnungen materieller Systeme sind beschränkt auf *nicht-relativistische* Quantonen, denn sie basieren auf der Schrödinger-Wellengleichung (*Kap. 5*). Wir kennen zwar hoch relativistische Quantonen, beispielsweise das Photon (Masse Null). In der Behandlung der Prozesse mit Photonen (*Kap. 6*) haben wir diese jedoch nur in der Näherung des klassischen Strahlungsfeldes behandelt.

Im Zusammenhang mit der *relativistischen Beschreibung des Elektrons* wurde – zu einem frühen Zeitpunkt in der Entwicklung der Quantenphysik – eine Entdeckung gemacht, die unser Verständnis der Materie radikal verändert hat.

8.1 Dirac's Entdeckung

Paul Adrien Maurice Dirac hat 1928 eine Wellengleichung für relativistische Quantonen mit Spin 1/2 gefunden, die nach ihm benannte **Dirac-Gleichung**¹. Genauso wie für jeden Eigenzustand des Impulses p der Schrödinger-Gleichung freier Quantonen die (nicht-relativistische) Energie-Impuls-Beziehung

$$E = \frac{p^2}{2m} \tag{8.1}$$

gelten muss, ist für die entsprechene Lösung der Dirac-Gleichung die relativistische Energie-Impuls-Relation [KP-1-8.9.3]

$$E = \pm \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \tag{8.2}$$

erfüllt.

Was bedeutet das negative Vorzeichen in Gl. (8.2)? Es war eine große Leistung von *Dirac*, zu erkennen, dass man die Lösungen seiner Gleichung mit negativen Energien mit berücksichtigen muss, denn nur so erhält man einen vollständigen Satz von Lösungen. Seine kühne Interpretation der Lösungen negativer Energie führte ihn dazu, das "*Antiquanton*" des Elektrons, das *Positron* vorherzusagen. Einige Jahre später (1932) hat Carl Anderson das Positron in der kosmischen Strahlung entdeckt!

Wir denken uns ein Elektron (Masse m) in einem (großen) Kasten eingeschlossen und suchen die Energien der stationären Zustände als Lösungen der Dirac-Gleichung. Für p = 0 sind die Einteilchenenergien nach (8.2) $E = \pm mc^2$, und für |p| > 0 liegen sie außerhalb der Energielücke $\Delta E = 2mc^2$ (Abb. 8.1). Im großen Kasten ist der Abstand benachbarter Energien beliebig klein.

Dirac argumentierte, dass normalerweise alle Zustände negativer Energie durch Elektronen voll besetzt sind (Abb. 8.1(a) ohne γ -Quant). Wegen des Pauli-Prinzips ist dann jedes Energieniveau negativer Energie durch zwei Elektronen besetzt (Spin 1/2). Falls das System keine Energie, die größer ist als $\Delta E = 2mc^2$, aufnehmen kann, ist die Konfiguration fest und die Elektronen sind unbeweglich; sie sind "eingefroren"– ähnlich dem Zustand des Isolators (Abb. 7.22(b)). Dirac postuliert, dass dieser "Normalzustand" dem **quantenphysikalischen Vakuum** entspricht.

Falls sich nun ein γ -Quant der Energie $E = \hbar \omega > \Delta E$ im Kasten befindet (Abb. 8.1(a)), kann das γ -Quant von einem Elektron negativer Energie absorbiert werden: Das Elektron wird in einen Zustand positiver Energie E_{e^-} gehoben (Abb. 8.1(b)). Der "Loch-Zustand" hat – relativ zum Vakuum – die elektrische Ladung +e. Dieser Lochzustand ist nun beweglich, denn es können Elektronenübergänge unter den Zuständen negativer Energie stattfinden, ohne das Pauli-Prinzip zu verletzen. Dirac interpretiert diesen Lochzustand

¹ Siehe z. B. O. Nachtmann, Elementary Particle Physics, Springer-Verlag (1990), chapter 4.



Abb. 8.1. Energien der stationären Zustände eines relativistischen Elektrons im Kasten (schematisch). (a) Anfangszustand der Elektron-Positron-Paarbildung; (b) entsprechender Endzustand.

als Teilchen der Ladung +e, nämlich als das **Positron**. Der Gesamtprozess (Abb. 8.1) entspricht also der **Paarbildung**

$$\gamma \to e^- + e^+ \quad . \tag{8.3}$$

Aus der Energieerhaltung folgt die Energie des Positrons

$$E_{e^+} = \hbar \,\omega - E_{e^-}$$
 . (8.4)

Das Positron ist das **Antiquanton** (Antiteilchen) des Elektrons; beide haben die gleiche Masse (m).

Nun betrachten wir den umgekehrten Prozess. Wir gehen von dem in Abb. 8.1(b) dargestellten Zustand aus, der aus einem Elektron und einem Positron besteht. Das Elektron kann – unter Emission von γ -Strahlung – den Zustand des Lochs einnehmen: Das Positron verschwindet (zusammen mit dem Elektron). Dies entspricht dem Prozess der **Annihilation**. Ein bekanntes Beispiel ist die Annihilation von Positronium, etwa aus dessen Grundzustand (Abschn. 7.1.5)².

Die theoretische Vorhersage von **Antimaterie** durch *Dirac* ist ein Höhepunkt unter den physikalischen Entdeckungen des 20. Jahrhunderts. Die Entwicklung der Teilchenphysik hat gezeigt:

Zu jedem Quanton der Materie existiert ein **Antiquanton** mit gleicher Masse und der negativen elektrischen Ladung des Quantons.

 $^{^2}$ Wegen der Impulserhaltung müssen mindestens zwei $\gamma\text{-}Quanten entstehen.$

Dirac's Entdeckung war zudem ein wichtiger Schritt hin zur Entwicklung der Quantenfeldtheorie, welche die Basis zur Behandlung aller Umwandlungen von Quantonen darstellt.

8.2 Die Struktur der Materie

Aus der Sicht des Standardmodells der Teilchenphysik gibt es heute zwei Gruppen von *elementaren Quantonen der Materie* (Elementarteilchen), die Leptonen (die "Leichten") und die Quarks. Sie unterscheiden sich hinsichtlich der starken Wechselwirkung: Die *Quarks* sind der *starken Wechselwirkung* unterworfen, die Leptonen sind es nicht.

Die elementaren Quantonen und ihre wichtigsten Eigenschaften sind in Tabelle 8.1 (Quarks) und Tabelle 8.2 (Leptonen) aufgeführt. Sie sind jeweils nach den *drei Generationen* geordnet, die sich durch die Größenordnungen der Massen der Quantonen unterscheiden.

Zu jedem elementaren Quanton der Materie existiert das entsprechende **Antiquanton** (Antiteilchen) mit derselben Masse und entgegengesetzter elektrischer Ladung. Jedes Quanton-Antiquanton-Paar zeigt den Prozess der *Annihilation*, d.h. es kann durch den Umkehrprozess der *Paarbildung* vernichtet werden. Alle elementaren Quantonen (Antiquantonen) sind *Fermionen* mit *Spin 1/2*.

Im Gegensatz zu den Leptonen wurde noch nie ein isoliertes Quark beobachtet (trotz intensiver Suche):

Die Quarks existieren nicht als freie Teilchen.

Die einzigen direkt beobachtbaren, "elementaren" Quantonen, die der starken Wechselwirkung unterworfen sind, sind die so genannten **Hadronen** (die

Tabelle 8.1. Die drei Generationen von *Quarks* (u, d), (c, s) und (t, b) (Spin 1/2). $(1 \text{ GeV} = 10^9 \text{ eV})$

	\boldsymbol{u}	d	с	8	t	b
	(up)	(down)	(charmed)	(strange)	(top)	(bottom)
Elektr. Ladung $[e]$	2/3	-1/3	2/3	-1/3	2/3	-1/3
Masse $[\text{GeV}/c^2]$	0.005	0.010	1.5	0.15	175	4.5

Tabelle 8.2. Die drei Generationen von Leptonen (e, ν_e) , (μ, ν_{μ}) und (τ, ν_{τ}) (Spin 1/2).

	е	ν_e	μ	$ u_{\mu} $	au	$ u_{ au} $
	Elektron	e-Neutrino	Müon	μ -Neutrino	Tau	τ -Neutrino
Elektr. Ladung $[e]$	-1	0	-1	0	-1	0
Masse $[\text{GeV}/c^2]$	0.0005	pprox 0	0.106	pprox 0	1.78	pprox 0

"Sperrigen"). Dazu gehören beispielsweise das Nukleon (Proton und Neutron) und das Pion, welches in den drei Ladungszuständen π^+ , π^- und π^0 vorkommt.

Insgesamt sind weit über hundert Hadronen bekannt. Wir wissen heute, dass die Hadronen keine elementaren Quantonen sind:

Alle Hadronen bestehen aus Quarks.

Diese Erkenntnis kann – in Anbetracht der Tatsache, dass die Quarks zeitlebens im hadronischen Gefängnis eingeschlossen sind – als Triumph der Teilchenphysik gewertet werden. Denn die übliche Methode, die Zusammensetzung eines Objekts zu erforschen, nämlich die Zerlegung in seine Bestandteile, beispielsweise durch Beschuss mit einem energiereichen Projektil, funktioniert hier nicht mehr. (Die übliche Methode ist als "Spielzeugprinzip" bekannt!)

Man hat weiterhin gefunden, dass die Hadronen in zwei streng getrennte Gruppen unterteilt werden können, in die **Baryonen** (die "Schweren") und die **Mesonen** (die "Unbeständigen). Die Baryonen sind aus drei Quarks zusammengesetzt, sie haben also die Struktur (qqq). Die Mesonen dagegen bestehen aus Quark-Antiquark-Konfigurationen ($q\overline{q}$).

Die bekanntesten Baryonen sind die Bausteine der Atomkerne, also das *Proton* mit der Quarkstruktur (*uud*) und das *Neutron* mit der Struktur (*udd*). Beide Nukleonen haben Spin 1/2. In Abb. 8.2 sind die (einzigen) Spinkonfigurationen dargestellt, die den Nukleonzustand (J = 1/2; $m_J = +1/2$) ergeben und mit dem Pauli-Prinzip verträglich sind.

Das Nukleon hat die kleinste Masse aller Baryonen ($m_p = 938.27 \text{ MeV}/c^2$; $m_n = 939.57 \text{ MeV}/c^2$) und kann deshalb als "Grundzustand" der Baryonen bezeichnet werden.

Das Proton ist das einzige stabile Hadron. Auch das *freie* Neutron ist instabil; es zerfällt entsprechend der Reaktion des β -Zerfalls

$$n \to p + e^- + \overline{\nu_e}$$
 , (8.5)

mit einer mittleren Lebensdauer von $\tau_n = 887$ s. (Mit dem Querstrich bezeichnen wir immer das Antiquanton.) Das Neutron, das in den Grundzuständen



Abb. 8.2. Quark- und Spinkonfiguration von Proton (a) und Neutron (b).

der Atomkerne gebunden ist, dagegen ist stabil! Begründung: Das gebundene Neutron hat eine kleinere Energie als das freie Neutron und kann aus energetischen Gründen die Reaktion (8.5) nicht ausführen.

Das Meson mit der kleinsten Masse ist das *Pion* mit den drei Zuständen π^+ , π^- und π^0 ($m_{\pi^\pm} = 139.57 \,\mathrm{MeV}/c^2$; $m_{\pi^0} = 134.98 \,\mathrm{MeV}/c^2$). Das Pion ist der "Grundzustand" der Mesonen. Alle drei Ladungszustände des Pions haben Spin Null. Das π^+ hat dann offensichtlich die Quarkkonfiguration ($u\overline{d}$), die in Abb. 8.3(a) dargestellt ist. Begründung: Als energetisch tiefst liegendes Meson ist es aus den Quarks der 1. Generation (u, d) oder deren Antiteilchen aufgebaut, hat elektrische Ladung +e und Spin Null. Das π^- ist das Antiquanton des π^+ und hat die Quarkkonfiguration ($d\overline{u}$) (Abb. 8.3(b)). Das π^0 schließlich ist aufgebaut aus den Konfigurationen ($u\overline{u}$) und ($d\overline{d}$) (Abb. 8.3(c)) und hat die Struktur $\frac{1}{\sqrt{2}} [(u\overline{u}) - (d\overline{d})].$

Alle Pionen sind instabil, sie zerfallen (dominant) nach den folgenden Reaktionen:

$$\pi^{+} \rightarrow \mu^{+} + \nu_{\mu}$$

$$\pi^{-} \rightarrow \mu^{-} + \overline{\nu_{\mu}}$$

$$\pi^{0} \rightarrow 2\gamma \quad (\text{Annihilation}) \quad . \tag{8.6}$$

Der Zerfall des π^0 erinnert uns an die Annihilation von Positronium im Grundzustand in zwei γ -Quanten – beides sind Quanton-Antiquanton-Systeme!



Abb. 8.3. Quark- und Spinkonfigurationen des Pions (Spin Null); (a) π^+ , (b) π^- , (c) $\pi^0: \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(u\overline{u}) - (d\overline{d}) \right]$.



Abb. 8.4. Das Ω^- -Baryon (Spin 3/2); (a) ohne Farbladung, (b) mit Farbladung.

Ein besonders interessantes Baryon ist das Ω^- (Omega-minus), das aus drei *s*-Quarks zusammengesetzt ist und Spin 3/2 hat (Abb. 8.4).

Um den Spinzustand $(J = 3/2; m_J = +3/2)$ zu erzeugen (wir beschränken uns auf Zustände mit Bahndrehimpuls L = 0), müssen alle drei s-Quarks im Spinzustand (1/2; +1/2) sein (Abb. 8.4(a)). Diese Konfiguration stellt aber eine klare Verletzung des Pauli-Prinzips dar – vorausgesetzt, das s-Quark hat keine zusätzlichen inneren Eigenschaften! Um das Pauli-Prinzip zu retten, müssen wir eine *neue Quantenzahl* für das s-Quark einführen, welche drei Werte annimmt. Wir nennen diese zusätzliche Eigenschaft der Quarks die "*Farbe*" oder **Farbladung** und wählen beispielsweise die Werte "rot", "grün" und "blau" (Abb. 8.4(b)).

Die Farbladung ist eine generelle Eigenschaft aller Quarks.

8.3 Materie und Strahlung

Das Photon oder γ -Quant fehlt unter den elementaren Quantonen des vorangegangenen Abschnitts – warum? Das Photon ist kein Quanton der Materie, sondern ein Quanton der Strahlung. Wir erinnern uns an die elektromagnetischen Strahlungsprozesse (Kap. 6), in denen Photonen in Reaktionen mit Materie umgewandelt, vernichtet oder erzeugt werden. Im Kap. 6 wurde das Strahlungsfeld klassisch behandelt. Die vollständige quantenphysikalische Theorie der Strahlungsprozesse ist die Quantenfeldtheorie. Darin wird auch das Strahlungsfeld durch Quantonen beschrieben. Im Fall der elektromagnetischen Prozesse ist das Photon das Quanton des Strahlungsfeldes. Das Photon hat auch einen völlig anderen Charakter als die elementaren Quantonen der Materie: Es ist kein Fermion, sondern ein Boson mit Spin Eins.

Im Rahmen der Quantenfeldtheorie ist das Photon allgemein verantwortlich für alle so genannten *elektromagnetischen Prozesse*, in denen Quantonen der Materie ineinander umgewandelt werden als Folge der elektromagnetischen Wechselwirkung. Zudem lassen sich alle *elektromagnetischen Kräfte*, die wir in der Regel durch entsprechende Potentiale beschrieben haben, als Wechselwirkung zwischen dem Photon und den Quantonen der Materie darstellen. Damit sind im Prinzip alle elektromagnetischen Eigenschaften zusammengesetzter Quantonen berechenbar.

Wir glauben heute, dass sich grundsätzlich *alle* Reaktionen zwischen Quantonen und *alle* Eigenschaften zusammengesetzter Quantonen mit den Methoden der Quantenfeldtheorie behandeln lassen – nicht nur die elektromagnetischen.

8.3.1 Die vier fundamentalen Kräfte

Bevor wir auf die verschiedenen Wechselwirkungen näher eingehen, wollen wir die Eigenschaften der in der Natur vorkommenden Kräfte zwischen den elementaren Quantonen phänomenologisch diskutieren. Die phänomenologischen Charakteristika der Kräfte betreffen ihre *Reichweite* und ihre *Stärke*. In diesem Sinn existieren vier fundamentale Kräfte in der Natur: Die Gravitationskraft und die elektromagnetische Kraft – beide langreichweitig – sowie die starke und die schwache Kraft, die kurze Reichweiten haben und deshalb in der makroskopischen Physik nicht direkt beobachtbar sind.

Die vier Kräfte sind – am Beispiel des Protons – in Abb. 8.5 quantitativ dargestellt.

Auf der rechten Seite $(r > 10^{-15} \text{ m})$ ist die potentielle Energie U(r) des Proton-Proton-Systems – für die vier verschiedenen Kräfte – als Funktion des Protonenabstandes r aufgetragen. Auf der linken Seite $(r < 10^{-15} \text{ m})$ sehen wir die (approximative) potentielle Energie U(r) eines Quark-Quark-Systems (innerhalb des Protons) – wiederum für die vier Kräfte – als Funktion des Quark-Quark-Abstandes r. Dieser Darstellung entnehmen wir interessante Eigenschaften der vier fundamentalen Kräfte:

- 1. Sowohl für das Protonsystem als auch für das Quarksystem ist die Gravitationskraft um den Faktor $\sim 10^{36}$ (!) schwächer als die Coulomb-Kraft unabhängig vom Abstand.
- 2. Der atomare Bereich $(r \sim 10^{-10}\,{\rm m})$ ist dominiert durch die elektromagnetische Kraft.
- 3. Für $r \stackrel{<}{\sim} 10^{-18}\,{\rm m}$ ist die schwache Kraft praktisch gleich groß wie die Coulomb-Kraft.
- 4. Für sehr kleine Abstände $(r < 10^{-20} \,\mathrm{m})$ sind die starke, die elektromagnetische und die schwache Wechselwirkung ähnlich.

8.3.2 Die Vektorbosonen

Der heutige Stand der Theorie der Wechselwirkungen ist im so genannten *Standardmodell der Teilchenphysik* repräsentiert. Die Gravitation kommt dabei nicht vor, denn bis heute existiert noch keine Quantenfeldtheorie der Gravitationskraft.

Die *elektrische Ladung* markiert die elementaren Quantonen, die der elektromagnetischen Wechselwirkung unterworfen sind. Dieses sind die geladenen Leptonen (Tabelle 8.2) und die Quarks (Tabelle 8.1) sowie die entsprechenden Antiquantonen. Die Quantenfeldtheorie der elektromagnetischen Wechselwirkung heißt **Quantenelektrodynamik (QED)**. Die QED enthält sowohl die klassische Version der Elektrodynamik, nämlich die Maxwellschen Gleichungen, als auch die Dirac-Gleichung im äußeren elektromagnetischen Feld als Spezialfälle. Das Photon als Strahlumsquanton der QED hat Masse Null und Spin Eins. Da das Strahlungsfeld ein Vektorfeld ist, nennt man das Photon *Vektorboson* (Tabelle 8.3). Im Hinblick auf Aussagekraft und Präzision der Vorhersagen ist die QED wohl die perfekteste Theorie der Physik überhaupt.

Die Markierung der elementaren Quantonen, die der starken Wechselwirkung unterworfen sind, ist die *Farbladung* (Abschn. 8.2); die Quantonen sind die Quarks. Die Quantenfeldtheorie der starken Wechselwirkung ist der QED nachgebildet und heißt **Quantenchromodynamik (QCD)**. Die Quantonen der Strahlung sind ebenfalls Vektorbosonen; sie heißen **Gluonen** (Tabelle 8.3). Im Gegensatz zum elektrisch neutralen Photon tragen die Gluonen (wie die Quarks) *Farbladung*; sie kommen in acht Zuständen der Farbladung vor. Die Gluonen (genau wie die Quarks) existieren nicht als freie Quantonen.



Abb. 8.5. Potentielle Energie des Proton-Proton-Systems $(r > 10^{-15} \text{ m})$ und des Quark-Quark-Systems $(r < 10^{-15} \text{ m})$ für die vier Wechselwirkungen [aus KP-2-Einleitung].

We chselwirkung	Vektorbosonen (Spin 1)
elektromagnetische (QED)	Photon: γ (0)
starke (QCD)	8 Gluonen: \boldsymbol{g} (0)
elektroschwache (GSW)	$\boldsymbol{\gamma}~(0)~;~ \boldsymbol{Z^{0}}~(91)~;~ \boldsymbol{W^{\pm}}~(80)$

Tabelle 8.3. Die Vektorbosonen (Massen in Einheiten GeV/c^2 in Klammern) der QED, QCD und der elektroschwachen Wechselwirkung.

Alle elementaren Quantonen der Materie (die Leptonen und die Quarks) sind der schwachen Wechselwirkung unterworfen. Sheldon Lee Glashow, Abdus Salam und Steven Weinberg haben eine allgemeine Theorie entwickelt, die die schwache und die elektromagnetische Wechselwirkung gemeinsam beschreibt. Die **GSW-Theorie** ist die Vereinheitlichung der beiden Wechselwirkungen ("Unified Theory") und wird als Theorie der **elektroschwachen** Wechselwirkung bezeichnet. Die Quantonen der Strahlung sind – neben dem Photon – zwei massive Vektorbosonen, nämlich das elektrisch neutrale **Z**-**Boson** und das **W-Boson**, das in zwei Zuständen der elektrischen Ladung $\pm e$ vorkommt (Tabelle 8.3). Die Massen des Z- und W-Bosons wurden von der GSW-Theorie vorhergesagt und anschließend in der Proton-Antiproton-Streuung erfolgreich experimentell nachgewiesen.

Zusammenfaßend halten wir fest:

Die elementaren Quantonen sind Fermionen (mit Spin 1/2), die Quantonen der Strahlung sind Bosonen (mit Spin 1).

Dies ist eine neue, grundlegende Qualität der Andersartigkeit von Fermionen und Bosonen.

8.3.3 Die elementaren Prozesse

Alle Umwandlungen zwischen Quantonen (Reaktionen, Zerfälle) sowie alle Wechselwirkungen (Kräfte) in zusammengesetzten Quantonen sind durch die *elementaren Prozesse* festgelegt, in denen im Allgemeinen ein Vektorboson (B) als Quanton der Strahlung und die entsprechenden elementaren Fermionen (F, F') beteiligt sind (Abb. 8.6).

Die graphische Darstellung der elementaren Prozesse hat zwei alternative Interpretationen. Einmal als Impulserhaltung: Die Pfeile sind die Impulsvektoren der entsprechenden (elementaren) Quantonen. Zum anderen als Bewegungsablauf der Prozesse (Trajektorien in der Reaktionsebene): Die x-Achse entspricht dem Ort und die y-Achse der Zeit. Jeder elementare Prozess kann im Allgemeinen die Art des beteiligten Fermions ändern (F, F'). Absorption und Emission (Abb. 8.6(a) (b)) können auch am Antifermion (\overline{F}) auftreten. In den folgenden Graphen werden wir uns in der Regel auf den Bewegungsablauf beziehen.



Abb. 8.6. Elementare Prozesse zwischen Vektorboson (B) der Strahlung und den entsprechenden elementaren Fermionen (F, F'). (a) Absorption; (b) Emission; (c) Paarbildung; (d) Annihilation.

Die Graphen der Abb. 8.6 sind paarweise untereinander verbunden durch die Operation der *Zeitumkehr*. Die Zeitumkehr eines Ablaufs erreichen wir durch Spiegelung des entsprechenden Graphen an einer Parallelen zur x-Achse, die den Reaktionspunkt (Vertex) enthält. Die Zeitumkehr der Absorption führt zur Emission und umgekehrt. Genau so sind Paarbildung und Annihilation miteinander verknüpft.

Die QCD ist insofern ein Spezialfall, als (neben den Quarks) auch alle Vektorbosonen (Gluonen) Farbladung tragen: Die Gluonen treten mit anderen Gluonen in Wechselwirkung. Deshalb existiert in der QCD, zusätzlich zu den elementaren Prozessen der Abb. 8.6, ein elementarer Prozess, dessen Graph mehrere Gluonen enthält.

Für freie Quantonen kommen die vier elementaren Prozesse der Abb. 8.6 in der Natur *nicht* vor, denn Impuls- und Energieerhaltung sind im Allgemeinen nicht gleichzeitig erfüllbar. Betrachten wir beispielsweise die Absorption (Abb. 8.6(a)) im Schwerpunktsystem des Anfangszustandes. Die Impulserhaltung verlangt Impuls Null im Endzustand; die Energie im Endzustand müsste also gleich der (festen) Ruheenergie von F' sein – für beliebige Gesamtenergie im Anfangszustand. Das ist unmöglich. Die elementaren Prozesse sind also *fiktiv*.

8.3.4 Elektromagnetische Prozesse

Die elementaren Prozesse der QED haben die Eigenschaft, dass die beteiligten Fermionen identisch sind ($F' \equiv F$ in Abb. 8.6). Wir versuchen die physikalischen Prozesse aus den elementaren Prozessen zusammenzusetzen, zunächst am Beispiel der $e^-\mu^-$ -Streuung

$$e^- + \mu^- \to e^- + \mu^-$$
 . (8.7)

Die einfachste Art der Darstellung des Prozesses (8.7) ist eine Kombination aus elementarer Emission und elementarer Absorption. Dabei gibt es zwei Möglichkeiten: Die Emission am Elektron, gefolgt von der Absorption am Müon (Abb. 8.7(a)), oder Emission am Müon und Reabsorption am Elektron (Abb. 8.7(b)).

Die beiden Möglichkeiten sind physikalisch ununterscheidbar. Wir bezeichnen den Gesamtprozess (vereinfachend) durch den Graphen Abb. 8.7(c) mit horizontaler Photonlinie.

Wie ist es um die Energie- und Impulserhaltung des in Abb. 8.7 dargestellten Streuprozesses bestellt? Die Betrachtung im Schwerpunktsystem des Anfangszustandes zeigt, dass die Energie- und Impulserhaltung für den Gesamtprozess und beliebigen Anfangszustand erfüllt ist. Während der Zeit Δt des so genannten virtuellen Zwischenzustandes ist unklar, ob das System noch im Anfangszustand oder schon im Endzustand ist; Δt ist die charakteristische Zeit, während der sich das System wesentlich ändert. Nach der Heisenbergschen Ungleichung in Energie und Zeit gehört dazu die typische Breite des Energiespektrums (2.183)

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\Delta t} \quad . \tag{8.8}$$

Diese Energieunschärfe wird ausgenutzt, um die Energieerhaltung auch im Zwischenzustand sicherzustellen. Wir bezeichnen den Graphen der Abb. 8.7(c) als *"virtuellen Photonaustausch"* zwischen Elektron und Müon.

Die Graphen vom Typ der Abb. 8.7 beschreiben den zeitlichen Ablauf der Umwandlungen und liefern damit die *physikalische Erklärung* der Prozesse. In der QED werden zudem die mathematischen Strukturen entwickelt, um



Abb. 8.7. Graphen der Elektron-Müon-Streuung.



Abb. 8.8. Graphen des Compton-Effekts.

aufgrund der Graphen die Eigenschaften der Prozesse (beispielsweise deren Wirkungsquerschnitt) exakt zu berechnen³. Im Rahmen der Quantenfeldtheorie sind die Graphen der Schlüssel zum Verständnis aller Umwandlungen von Quantonen. Es ist ein Resultat der QED, dass alle elektromagnetischen Prozesse durch die einfachsten Graphen (z.B. die der Abb. 8.7) dominiert sind. In der Präzisionsphysik müssen kompliziertere Graphen mit berücksichtigt werden.

Der virtuelle Photonaustausch in Abb. 8.7 ist die *quantenphysikalische* Darstellung der Coulomb-Kraft. (Die Kraft ist ein Begriff der klassischen Physik!)

Als zweites Beispiel eines physikalischen Prozesses der elektromagnetischen Wechselwirkung wählen wir den *Compton-Effekt*, also die $e^--\gamma$ -Streuung. Auch hier ist die einfachste Art, die Streuung aus den elementaren Prozessen zusammenzusetzen, eine Kombination von Absorption und Emission. Es gibt wiederum zwei mögliche Graphen, die physikalisch ununterscheidbar sind, denn sie führen aus dem identischem Anfangszustand zum identischen Endzustand (Abb. 8.8).

Die mathematische Beschreibung des Prozesses ($Fu\betanote 3$) führt auf je eine Quantenamplitude für die Graphen der Abb. 8.8. Der Wirkungsquerschnitt entspricht der Projektionswahrscheinlichkeit und enthält, wegen der Ununterscheidbarkeit der beiden Graphen, auch einen Interferenzterm. (Interferenz und fehlende Weginformation gehen zusammen!)

(Für weitere Beispiele elektromagnetischer Prozesse siehe Aufgabe 82.)

8.3.5 Die Pion-Nukleon-Streuung

Alle physikalischen Prozesse der *starken* Wechselwirkung – im Gegensatz zu jenen der elektroschwachen Wechselwirkung – betreffen Umwandlungen *zusammengesetzter* Quantonen, d. h. Reaktionen mit Hadronen. (Quarks und

³ Siehe z. B. *F. Halzen* and *A.D. Martin*, Quarks and Leptons: An Introductory Course in Modern Particle Physics, John Wiley (1984)

Gluonen existieren nicht als freie Teilchen!) Die elementaren Prozesse der QCD haben die Eigenschaft (wie diejenigen der QED), dass die beteiligten Quarks identisch sind ($F' \equiv F$ in Abb. 8.6). Da die Gluonen aber Farbladung tragen (im Gegensatz zum elektrisch neutralen Photon der QED), ändern Quarks bei den elementaren Prozessen der Abb. 8.6 ihre Farbe.

Als repräsentatives Beispiel physikalischer Prozesse der starken Wechselwirkung behandeln wir die Pion-Nukleon-Streuung, die durch die Delta-Resonanz geprägt ist (Abschn. 2.3.2).

Wir betrachten konkret die Reaktion (2.98) (Abb. 2.31)

$$\pi^+ + p \to \Delta^{++} \to \pi^+ + p \quad , \tag{8.9}$$

und versuchen, deren zeitlichen Ablauf graphisch darzustellen. Dieser Prozess ist viel komplizierter als die bisher betrachteten elektromagnetischen Prozesse, denn alle Reaktionspartner (Hadronen) sind (aus Quarks) zusammengesetzt. Da die Gluonen die Hadronen nicht verlassen (genauso wenig wie die Quarks) und die Quarks ihre Identität behalten $(F' \equiv F)$, beschreiben wir die Bewegungen der Hadronen durch parallele Linien, die ihren Quarkinhalt repräsentieren und lassen die Gluonen weg (Abb. 8.9(a)). Wegen der Erhaltung der elektrischen Ladung zwischen dem Anfangszustand (π^+, p) und dem Zwischenzustand hat der Zwischenzustand die Ladung $2e (\Delta^{++})$. Wir erhalten diesen Ladungszustand durch Annihilation des \overline{d} -Quarks aus dem π^+ und dem d-Quark aus dem Proton. Somit ist das Δ^{++} ein Baryon mit dem Quarkinhalt (uuu). Aus Symmetriegründen gelangen wir vom Zwischenzustand Δ^{++} zum Endzustand (π^+, p) durch die Paarbildung (d, \overline{d}).

Die elastische Streuung (8.9) ist nicht der einzige π^+ -*p*-Prozess. Anstelle der (d, \overline{d}) -Paarbildung beim Übergang vom Zwischenzustand (Δ^{++}) in den



Abb. 8.9. Graphische Darstellung der π^+ -*p*-Streuung. (a) $\pi^+ + p \to \pi^+ + p$; (b) $\pi^+ + p \to K^+ + \Sigma^+$.

Endzustand kann beispielsweise ein (s, \overline{s}) -Paar entstehen (Abb. 8.9(b)). Dadurch wird das Meson K^+ der Quarkkonfiguration $(u\overline{s})$ (anstelle des π^+) und das Baryon Σ^+ der Konfiguration (uus) (anstelle des Protons) gebildet. Wir haben also den Prozess

$$\pi^+ + p \to \Delta^{++} \to K^+ + \Sigma^+ \tag{8.10}$$

als Alternative zur elastischen Streuung. Der Prozess ist energetisch möglich, falls die Schwerpunktsenergie des π^+ -*p*-Anfangszustandes mindestens gleich der Summe der Ruheenergien von K^+ (494 MeV) und Σ^+ (1189 MeV) ist.

8.3.6 Elektroschwache Prozesse und Zerfälle

Die elementaren Prozesse der GSW-Theorie haben die Eigenschaft, dass die beteiligten Fermionen (Abb. 8.6) entweder Leptonen oder Quarks sind. Ist das Boson elektrisch geladen (W^+ oder W^-), dann verlangt die Erhaltung der (elektrischen) Ladung eine Änderung des Fermions am Vertex (von Fnach F' bzw. von \overline{F} nach $\overline{F'}$). Diese Änderung vollzieht sich für Leptonen immer innerhalb derselben Generation (z. B. von e^- nach ν_e). Für Quarks sind Übergänge zwischen den Generationen (z. B. von u nach s) möglich – aber stark unterdrückt.

Die Abb. 8.10 zeigt die einfachsten Graphen folgender *leptonischer Streuprozesse*:

$$\nu_{\mu} + e^{-} \rightarrow \nu_{\mu} + e^{-}$$

 $\nu_{e} + e^{-} \rightarrow \nu_{e} + e^{-}$

 $e^{+} + e^{-} \rightarrow \mu^{+} + \mu^{-}$
(8.11)

Die einzelnen Graphen folgen aus den elementaren Prozessen der Abb. 8.6 (verifiziere!).

Die drei ersten der fünf Graphen in Abb. 8.10 repräsentieren einen virtuellen Vektorbosonaustausch (Z, W) zwischen den Leptonen, ähnlich dem virtuellen Photonaustausch in Abb. 8.7. Jeder dieser Graphen ist wiederum eine Zusammenfaßung der beiden Prozesse: Emission-links-Absorption-rechts bzw. Emission-rechts-Absorption-links. (Das W-Boson in Abb. 8.10(b) hat unterschiedliche Ladung in den beiden Prozessen!) Diese Graphen sind die quantenphysikalische Darstellung der schwachen Kraft zwischen den Leptonen. Ein wesentlicher Unterschied zum Photonaustausch der Abb. 8.7 ist die Reichweite der Kräfte. Die kurze Reichweite der schwachen Wechselwirkung ist ein direkte Folge der großen Massen des Z- und W-Bosons.

Die GSW-Theorie beinhaltet die mathematischen Gesetze, die es gestatten, aus der Graphenstruktur der Abb. 8.10 die Eigenschaften der entsprechenden Streuprozesse präzis zu berechnen (*Fußnote 3*).

Wir kehren noch einmal zur einfachen $e^{-}\mu^{-}$ -Streuung (8.7) zurück. Behandeln wir diesen Prozess im Rahmen der GSW-Theorie, dann existiert,



Abb. 8.10. Graphen leptonischer Prozesse. (a) $\nu_{\mu} + e^{-} \rightarrow \nu_{\mu} + e^{-}$; (b) $\nu_{e} + e^{-} \rightarrow \nu_{e} + e^{-}$; (c) $e^{+} + e^{-} \rightarrow \mu^{+} + \mu^{-}$.

zusätzlich zum Photonaustausch (Abb. 8.7(c)), ein analoger Graph mit dem Z^0 als Austauschboson. Ist dieser Zusatzterm wichtig? Um die Frage zu beantworten, müssen wir wissen, wie groß die De-Broglie-Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{\sqrt{E^2 - m^2 c^4}} \tag{8.12}$$

des Projektils ist, denn diese legt nach der λ -Regel (Abschn. 2.2.2) den örtlichen Bereich fest, auf den die Streuung empfindlich ist. Je größer die Energie, desto kleiner die Wellenlänge, und umso wichtiger ist der kurzreichweitige Z^0 -Graph der schwachen Wechselwirkung. Bei sehr kleinen Abständen ist der elektromagnetische und der schwache Anteil der Wechselwirkung von gleicher Größenordnung (siehe z. B. Abb. 8.5; 3. Eigenschaft). Bei großen Abständen (kleinen Energien) dagegen wird der (kurzreichweitige) Z^0 -Graph "überse-



Abb. 8.11. Graphen von Zerfällen in Leptonen. (a) $\mu^+ \to e^+ + \nu_e + \overline{\nu_{\mu}}$; (b) $n \to p + e^- + \overline{\nu_e}$; (c) $\pi^+ \to \mu^+ + \nu_{\mu}$.

hen" und die elektroschwache Wechselwirkung ist durch den (langreichweitigen) elektromagnetischen Teil dominiert.

Schließlich wenden wir uns einigen Zerfällen von instabilen Quantonen zu, die auf Leptonen im Enzustand führen:

$$\mu^{+} \rightarrow e^{+} + \nu_{e} + \overline{\nu_{\mu}}$$

$$n \rightarrow p + e^{-} + \overline{\nu_{e}}$$

$$\pi^{+} \rightarrow \mu^{+} + \nu_{\mu} \quad . \tag{8.13}$$

Es handelt sich um den μ^+ -Zerfall, den β -Zerfall des Neutrons und den π^+ -Zerfall (keine Unbekannten!). Die Abb. 8.11 zeigt die einfachsten Graphen der drei Zerfälle, die wiederum aus den elementaren Prozessen gewonnen sind (verifiziere!).

Alle Graphen sind mit der Erhaltung der elektrischen Ladung verträglich. Der μ -Zerfall ist ein rein leptonischer Prozess. Die Darstellung der anderen beiden Zerfälle verwendet das Hadronenbild, wie wir es in der π -N-Streuung eingeführt haben. Der β -Zerfall des Neutrons basiert auf der Emission des W⁻-Bosons, gefolgt von einer Lepton-Antilepton-Paarbildung. Der $\pi^+\mathchar`-$ Zerfall ist die Annihilation des π^+ in ein $W^+\mathchar`-$ Boson mit anschließender Paarbildung.

Alle Zerfälle (8.13) sind Prozesse der *schwachen* Wechselwirkung, denn sie werden durch das W-Boson vermittelt. Die mathematischen Gesetze der GSW-Theorie zusammen mit den Graphen erlauben auch hier, die detaillierten Eigenschaften der Zerfälle (u. a. ihre mittlere Lebensdauer) zu berechnen (*Fußnote 3*).

8.3.7 Offene Fragen der Teilchenphysik

Die *Teilchenphysik* ist die Wissenschaft von der Ergründung der Struktur der Materie und ihrer fundamentalen Wechselwirkungen. Man möchte verstehen, "was die Welt im Innersten zusammenhält". Die Teilchenphysik ist aufs Engste mit der Physik der Entstehung des Universums verbunden⁴.

In diesem Kapitel haben wir versucht, einen (stark vereinfachten) Einblick in das faszinierende Gebiet zu geben – nicht zuletzt als Anregung zum Einstieg in ein vertieftes Studium.

Zum Abschluss wollen wir die Frage stellen: Wo stehen wir heute in der Teilchenphysik, hundert Jahre nach *Plancks* Entdeckung? Welches Verständnis der "Welt" haben wir bis jetzt (im Jahre 2000) erreicht?

Das Standardmodell der Teilchenphysik hat freie Parameter (18 an der Zahl⁵), deren Werte von der Theorie her *nicht* festgeschrieben sind. Solche Parameter sind beispielsweise die Massen der Quarks (Tabelle 8.1; sechs) und die Massen der geladenen Leptonen⁶ (Tabelle 8.2; drei). Wir kennen heute die wichtigsten dieser Parameter und erwarten, dass im Prinzip alle Eigenschaften unserer Welt aus den Theorien des Standardmodells berechenbar sind. Dies stellt zweifellos einen gewaltigen Schritt des Verstehens dar.

Es gibt aber eine Reihe von offenen Fragen. Eine davon lautet: Warum gibt es genau *drei* Generationen von Quarks und Leptonen? Diese drei Generationen von elementaren Quantonen brauchen wir, um alle Eigenschaften, Zerfälle und Reaktionen der über hundert beobachteten Hadronen zu erklären. Das ist an sich ein enormer Erfolg des Standardmodells gegenüber der Situation in den Sechzigerjahren des 20. Jahrhunderts. Trotzdem fragen wir uns: Warum genügt eine Generation nicht – warum brauchen wir nicht vier Generationen? Die Theorie gibt keinerlei Anhaltspunkte zur Beantwortung dieser Frage.

⁴ Siehe z. B. *S. Weinberg*, Die ersten drei Minuten – Der Ursprung des Universums, Deutscher Taschenbuch Verlag (1980).

⁵ R.N. Cahn, "The eighteen arbitrary parameters of the standard model in your everyday life", Rev. Mod. Phys. 68 (1996) 951.

⁶ Im Standardmodell sind die Neutrinomassen null. Neue Experimente geben Hinweise dafür, dass die Massen zwar klein, aber ungleich null sind. Solche Phänomene kann das Standardmodell nicht erklären. Wir haben also Hinweise auf "neue Physik".

Eine der großen Herausforderungen der Teilchenphysik heute ist die allgemeine Frage: Warum haben die Parameter des Standardmodells die Werte, die sie haben?

Wir wollen die Bedeutung dieser Frage an einem Beispiel erläutern. Die Ruheenergie des Neutrons (939.57 MeV) ist um 1.29 MeV größer als die des Protons. Dieser Wert ist größer als die Ruheenergie des Elektrons (0.51 MeV) und deshalb ist der β -Zerfall des Neutrons (Abb. 8.11(b)) energetisch möglich. Warum sind die Massen der beiden Nukleonen fast gleich? Wäre $m_u = m_d$ und würden wir den Beitrag der elektrischen Ladung zur Masse vernachlässigen, dann wären die Massen der beiden Nukleonen gleich. Die Masse des Protons ist deshalb kleiner, weil $m_u < m_d$ (Tabelle 8.1). Eine geringfügige Änderung der Massen m_u und m_d (z. B. in Werte mit $m_u > m_d$), kann zum Vorzeichenwechsel der Massendifferenz führen. Mit $m_p - m_n > m_e$ wäre das (freie) Proton dem β -Zerfall

$$p \to n + e^+ + \nu_e \tag{8.14}$$

unterworfen, und das Wasserstoffatom würde durch Elektroneinfang

$$p + e^- \to n + \nu_e \tag{8.15}$$

zerfallen. Die kleine Parameteränderung würde unsere Welt radikal verändern! Solange wir also nicht wissen, warum die Parameter m_u und m_d die Werte der Tabelle 8.1 annehmen, können wir kaum behaupten, unsere Welt zu verstehen.

Man kann an vielen Beispielen konkret zeigen, dass die unabhängige Änderung der Parameter des Standardmodells auf Welten führt, die von unserer radikal verschieden sind ($Fu\betanote\ 5$). Deshalb können wir nicht behaupten, dass das Standardmodell unsere Welt erklärt.

Wir vermuten, dass die scheinbar "freien" Parameter des Modells zusätzlichen Bedingungen unterworfen sind, die die Vielfalt der möglichen – unrealistischen – Lösungen einschränken.

Eine Möglichkeit, weiter zu kommen, wäre die Vereinheitlichung *aller* Kräfte des Standardmodells, d. h. eine gemeinsame Theorie der elektroschwachen und der starken Wechselwirkung ("Grand Unification"). Die Darstellung der Kräfte in Abb. 8.5 enthält tatsächlich einen Hinweis in diese Richtung. Als Charakteristikum der GSW-Theorie hatten wir erkannt, dass die Coulomb-Kraft und die schwache Kraft bei kleinen Abständen praktisch identisch sind (3. Eigenschaft). Bei noch kleineren Abständen (4. Eigenschaft) sind alle drei Kräfte fast identisch. Dies ist ein deutlicher Hinweis für die Möglichkeit einer Vereinheitlichung der GSW-Theorie und der QCD.

Zusammenfaßend können wir die offenen Fragen der Teilchenphysik folgendermaßen formulieren: *Was unterscheidet unsere Welt von allen möglichen Welten?* Ist die Welt mit existierendem Leben einzigartig – und falls ja, worin besteht ihre Einzigartigkeit?

378 8 Materie, Antimaterie und Strahlung

Als Beiträge zur Klärung dieser existentialen Fragen sehen wir mit Spannung den neuen Resultaten von Experimenten bei höchsten Energien entgegen. Im theoretischen Sektor zeichnet sich eine neue, viel versprechende Entwicklung ab, die so genannte "String"-Theorie, die eine Vereinheitlichung der Quantenphysik mit der allgemeinen Relativitätstheorie verspricht⁷. Damit würde sich Einsteins Traum, nämlich die Vereinheitlichung aller Kräfte in einer einzigen Theorie, verwirklichen - ein aufregendes Szenario für die Physik des 21. Jahrhunderts!

Aufgabe 82 Elektromagnetische Prozesse. Zeichne die einfachsten Graphen folgender Streuprozesse:

 $\begin{array}{ll} 1. \ e^- + e^+ \rightarrow \mu^- + \mu^+ \\ 2. \ e^- + e^+ \rightarrow e^- + e^+ \end{array}$ 3. $e^+ + e^- \rightarrow 2\gamma$ (Annihilation)

Aufgabe 83 Elektroschwache Zerfälle. Zeichne die einfachsten Graphen folgender Zerfälle instabiler Quantonen:

1. μ^{-} -Zerfall 2. π^{-} -Zerfall

Aufgabe 84 Elektroschwacher Prozess. Wir betrachten die elastische Elektron-Positron-Streuung

$$e^+ + e^- \rightarrow e^+ + e^-$$

im Rahmen der GSW-Theorie.

- 1. Zeichne die einfachsten Graphen.
- 2. Welche Graphen sind wichtig bei sehr hohen Energien?

Aufgabe 85 Protonzerfall. Wäre $m_p - m_n > m_e$, dann würde das Proton in ein Neutron und ein Positron zerfallen und das Wasserstoffatom in ein Neutron.

Zeichne die Graphen der beiden Zerfälle.

⁷ Nathan Seiberg, Wolfgang-Pauli-Vorlesungen der ETH Zürich, Sommersemester 2002.

Lösungen der Aufgaben

$$\begin{aligned}
\mathbf{1} \quad s(\nu,T) &= \frac{c}{4} \,\rho(\nu,T) = \frac{2\pi \,\nu^2}{c^2} \,\frac{h\nu}{e^{h\nu/kT}-1} \\
\mathbf{2} \quad S(T) &= \sigma \,T^4 \quad ; \quad \sigma = \frac{2\pi^5}{15} \,\frac{k^4}{c^2h^3} = 5.67 \times 10^{-8} \,\mathrm{W \,m^{-2} \,K^{-4}} \\
\mathbf{3} \quad E &= 4.35 \times 10^{-19} \,\mathrm{J} = 2.72 \,\mathrm{eV} \\
\mathbf{4} \quad E_n &= -\frac{1}{2} \,\mu c^2 \,\frac{\alpha^2}{n^2} \\
\mathbf{5} \quad E_\gamma &= 2875 \,\mathrm{eV}
\end{aligned}$$

6 1.
$$I(\theta) = I_0 \frac{\sin^2(k\frac{a}{2}\sin\theta)}{(k\frac{a}{2}\sin\theta)^2}$$
; $0 \le \theta \le \frac{\pi}{2}$



3.
$$\lambda \stackrel{\leq}{\sim} a$$
 (λ -Regel!)
7. $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = \frac{R^2}{4}$ (isotrop!) ; $\sigma = \pi R^2$

8 -
9
$$I(\theta) = I_0 \cos^2(\pi \frac{d}{\lambda} \sin \theta)$$

10 1. $\lambda' - \lambda = \lambda_C (1 - \cos \theta)$
2. $T = \frac{E^2 (1 - \cos \theta)}{mc^2 + E(1 - \cos \theta)}$
11 $E_{\gamma_1} = E_{\gamma_2} = mc^2 = 511 \text{ keV}$
12 1. $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$
2. $\omega = kc$
13 1. $\lambda = \lambda_C [(\frac{T}{mc^2})^2 + 2\frac{T}{mc^2}]^{-1/2}$
2. $\lambda = \lambda_C (\frac{2T}{mc^2})^{-1/2}$
3. $\lambda = \lambda_C \frac{mc^2}{T}$
14 1. $E_r(s,t) = E_0 \cos(ks - \omega t)$; $E_z = E_\phi = 0$
 $B_z(s,t) = -\frac{E_0}{c} \cos(ks - \omega t)$; $B_r = B_\phi = 0$
2. $m = 0, \pm 1, \pm 2, ...$; $k = k_m = \frac{m}{r_0}$; $\omega = \omega_m = \frac{c}{r_0} m$
15 -

16 1.
$$\mathbf{J}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$$
 ; $J_\perp = \frac{1}{\sqrt{2}}\hbar$



2.
$$E_{\pm 1/2} = \pm \mu_B B = \pm 5.79 \times 10^{-5} \text{ eV}$$

3. $M_z = n\mu_B \frac{e^b - e^{-b}}{e^b + e^{-b}} = n\mu_B \tanh(b)$; $M_x = M_y = 0$

4.
$$kT \ll \mu_B B$$
 : $M_z = n\mu_B$
 $kT \gg \mu_B B$: $M_z = n\mu_B b = \frac{n\mu_B^2 B}{kT}$
17 1. $N(E_{\gamma}, v) = N_0 \frac{(\Gamma/2)^2}{[E_{\gamma} - E_0(1 - \frac{w}{v})]^2 + (\Gamma/2)^2}$
2. $R(v) = N_0 n d\sigma_0 \frac{v}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(r/2)^2}{[(r + \frac{2E_0v}{T_T v})^2 + 1](x^2 + 1)}$; $x = \frac{E_{\gamma} - E_0}{\Gamma/2}$
18 1. $N_1(E_1) = \frac{2}{\pi \Gamma_1} \frac{1}{4(\frac{E_1 - E_0}{\Gamma_1})^2 + 1}$
2. $N(E) = \frac{4}{\pi T_1 \Gamma_2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{[4(\frac{E_1 - E_0}{\Gamma_1})^2 + 1][4(\frac{E_1 - E}{\Gamma_2})^2 + 1]}$
3. $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$
19 1. $\tau = \frac{1}{\lambda_1 + \lambda_2}$; $\Gamma = \hbar(\lambda_1 + \lambda_2)$
2. $\tau = 1.40 \times 10^{-7} \text{ s}$; $\Gamma = 4.70 \times 10^{-9} \text{ eV}$
20 1. $\langle t \rangle = \tau$; $\Delta t = \tau$
2. $\langle E \rangle = E_0$; $\Delta E = \to \infty$
21 $\Delta \tau \simeq 4.6 \times 10^{-20} \text{ s}$
22 $(\Delta x)_0 \simeq (\frac{\hbar}{m\omega_0})^{1/2}$; $E_0 \simeq \hbar \omega_0$
23 $B = 33.2 \text{ T}$
24 1. $z = \frac{d(D + d/2)}{v_y^2} \frac{F_1}{M}$
2. $g = \frac{2ZkT}{v_y^2} = 0.738 \pm 0.016$; $P(f \leftarrow i) = 0.750$
 $\frac{Z_f(45^0)}{Z_1} = 0.738 \pm 0.016$; $P(f \leftarrow i) = 0.500$
26 1. $\Delta F = \sqrt{Z_1 Z_2} \sqrt{Z_1 + Z_2}$
2. $\Delta F = 2Z_1 \sqrt{Z_1} \neq Z_1 \sqrt{Z_2T}$ (!)
27 1. $(\frac{E_y}{E_{0y}} - \frac{E_{0x}}{E_{0x}} \cos e^2 = (1 - (\frac{E_{0x}}{E_{0x}})^2) \sin^2 \epsilon$; Ellipse: quadratische Gleichung in E_x , E_y ; $|E_x| \leq E_{0x}$, $|E_y| \leq E_{0y}$ (beschränkt) Im Hauptachsensystem: $(\frac{E_{y}}{E_{0y}})^2 + (\frac{E_{y'}}{E_{0y'}})^2 = 1$
2. $\epsilon = 0$, π (oder $E_{0x} = 0$, oder $E_{0y} = 0$)

3.
$$E_{0x} = E_{0y}$$
; $\epsilon = \frac{\pi}{2}$: linkszirkular; $\epsilon = \frac{3\pi}{2}$: rechtszirkular



4. Basis
$$(x, y)$$
:

 $x : E_x(z,t) = E_{0x}\cos(kz - \omega t) , \quad E_y(z,t) \equiv 0$ $y : E_x(z,t) \equiv 0 , \quad E_y(z,t) = E_{0y}\cos(kz - \omega t + \epsilon)$ Basis (R, L):

$$R: E_{x'}(z,t) = \frac{E_{0x'} + E_{0y'}}{2} \cos(kz - \omega t)$$
$$E_{y'}(z,t) = \frac{E_{0x'} + E_{0y'}}{2} \sin(kz - \omega t)$$

$$L: E_{x'}(z,t) = \frac{E_{0x'} - E_{0y'}}{2} \cos(kz - \omega t) ,$$

$$E_{y'}(z,t) = -\frac{E_{0x'} - E_{0y'}}{2} \sin(kz - \omega t)$$

- 5. $P(x \leftarrow p) = \frac{E_{0x}^2}{E_{0x}^2 + E_{0y}^2}$; $P(y \leftarrow p) = \frac{E_{0y}^2}{E_{0x}^2 + E_{0y}^2}$; $P(x \leftarrow p) + P(y \leftarrow p) = 1$ $P(R \leftarrow p) = \frac{1}{2} \frac{(E_{0x'} + E_{0y'})^2}{E_{0x'}^2 + E_{0y'}^2}$; $P(L \leftarrow p) = \frac{1}{2} \frac{(E_{0x'} - E_{0y'})^2}{E_{0x'}^2 + E_{0y'}^2}$ $P(R \leftarrow p) + P(L \leftarrow p) = 1$
- $\mathbf{28}$
- 1. $\sum_{m} P(m \leftarrow u) = 1$; m = -1, 0, 1 ; u: beliebiger Zustand des Drehimpulses

2.
$$P(m \leftarrow m') = \delta_{mm'}$$
; $m' = -1, 0, 1$

3. Stern-Gerlach-Experiment der Abb. 3.8, mit drei Teilstrahlen.

29
$$d \simeq 300 \,\mathrm{km} \,(!)$$

30 1. $d = 0.856 \times 10^{-6} \,\mathrm{m}$; linkszirkular

2. Orientierung der optischen Achse in y-Richtung (Abb. 3.17).

3.
$$\langle R|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{\pi}{4}}$$
; $\langle L|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\pi}{4}}$

- 4. Rechtszirkular polarisiert
- 5. In *i*-Richtung linear polarisiert
- 6. $\langle R|i\rangle = \overline{\langle i|R\rangle}$

31 1. Der untere Strahl muss ausgeblendet werden.

2.
$$\frac{I(m_z=1/2)}{I_0} = \frac{1}{2}\cos^2\frac{\theta}{2}$$
; $\frac{I(m_z=-1/2)}{I_0} = \frac{1}{2}\sin^2\frac{\theta}{2}$
32 1. $\langle J_z(t) \rangle = 0$
2. $\omega = 5.11 \times 10^8 \, \text{s}^{-1}$

33

34 1.
$$Z(t) = Z_0 e^{-t/\tau_{\mu}} \left[1 + \frac{1}{3} \sin\left(\frac{geB}{2m_{\mu}}t\right) \right]$$

 $\tau_{\mu} = 2.20 \times 10^{-6} \,\mathrm{s} \quad ; \quad g = 2.00 \quad ; \quad m_{\mu} = 105.7 \,\mathrm{MeV}/c^2$
2. $P(E) = 1 + \frac{1}{3} \frac{2E}{\Gamma} \frac{1}{(\frac{2E}{\Gamma})^2 + 1} \quad ; \quad \Gamma = \hbar/\tau_{\mu}$



 $\begin{aligned} \mathbf{35} \quad & 1. \ N(E;0,\tau) = Z_0 \, \frac{\hbar}{\Gamma} \left[\left(1 - \frac{1}{e} \right) - \frac{1}{3} \, \frac{1}{1 + \left(\frac{2E}{T}\right)^2} \left(1 - \frac{1}{e} F\left(\frac{2E}{T}\right) \right) \right] \\ & F(x) \equiv \cos x - x \sin x \\ & N(E;\tau,\infty) = Z_0 \, \frac{\hbar}{\Gamma} \, \frac{1}{e} \, \left[1 - \frac{1}{3} \, \frac{1}{1 + \left(\frac{2E}{T}\right)^2} F\left(\frac{2E}{T}\right) \right] \\ & 2. \ P(E;0,\tau) = 1 - \frac{1}{3(1 - \frac{1}{e})} \, \frac{1}{1 + \left(\frac{2E}{T}\right)^2} \left[1 - \frac{1}{e} \, F\left(\frac{2E}{T}\right) \right] \\ & P(E;\tau,\infty) = 1 - \frac{1}{3} \, \frac{1}{1 + \left(\frac{2E}{T}\right)^2} \, F\left(\frac{2E}{T}\right) \end{aligned}$

384 Lösungen der Aufgaben

36 1.
$$\langle J_x(t) \rangle = -\frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \left(\frac{\Delta E_B}{\hbar} t \right) \quad ; \quad \langle J_y(t) \rangle = -\frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \left(\frac{\Delta E_B}{\hbar} t \right) \\ \langle J_z(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \theta$$



2.
$$\omega = \frac{\Delta E_B}{\hbar}$$
: unabhängig von θ
37 $P(d) = \cos^2\left(\frac{|g|eB\lambda}{4\hbar 2\pi}d\right)$; Periode $\delta = 5.65 \,\mathrm{cm}$



38 1. $\rho_p(x) \propto \left[1 + \cos\left(\frac{p}{\hbar} \frac{d}{z_0} x\right)\right]$



2.
$$\Delta x = 73.2 \,\mu\text{m}$$

39 1. (a) $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} e^{-\frac{|x|}{\lambda}}$
(b) $\psi(x) = (\frac{2}{\pi})^{1/4} \frac{1}{\sqrt{\lambda}} e^{-\frac{x^2}{\lambda^2}}$
2. (a) $\hat{\psi}(p) = \sqrt{\frac{2\lambda}{\pi\hbar}} \frac{1}{1+(\frac{\hbar}{\hbar})^2 p^2}$
(b) $\hat{\psi}(p) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} \sqrt{\frac{\hbar}{\hbar}} e^{-(\frac{\lambda}{2\hbar})^2 p^2}$
3. $a = a' = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$
4. $\Delta X = \frac{\lambda}{2}$; $\Delta P = \frac{\hbar}{\lambda}$; $\Delta X \,\Delta P = \frac{\hbar}{2}$: Minimum (!)
40 $\langle u_p | u_{p'} \rangle = 0$ für $p \neq p'$
41 $\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0$; $\Delta J_x = \Delta J_y = \frac{\hbar}{2}$
42 1. $\int \int \int \overline{\psi_E(\mathbf{r})} \psi_{E'}(\mathbf{r}) \, d^3r = \delta_{EE'}$
2. $-$
43 1. $C = \frac{1}{\sqrt{2}}$
2. $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin(\frac{\pi}{a} x) e^{-i\omega t} [1 + 2\cos(\frac{\pi}{a} x) e^{-i3\omega t}]$
 $\rho(x, t) = \frac{1}{a} \sin^2(\frac{\pi}{a} x) [1 + 4\cos^2(\frac{\pi}{a} x) + 4\cos(\frac{\pi}{a} x)\cos(3\omega t)]$
3. $\int_{0}^{a} \rho(x, t) \, dx = 1$
4. $\langle X(t) \rangle = \frac{a}{2} - \frac{16a}{9\pi^2} \cos(3\omega t)$
5. $T = 0.92 \times 10^{-15} \text{ s}$
44 $t_0 = \sqrt{3} \frac{m\lambda^2}{2\hbar} = 4.54 \text{ s}$
45 $-$
46 $-$
47 $x_0 = \frac{\hbar}{2} [2m(U_0 - E)]^{-1/2} = 0.59 \times 10^{-15} \text{ m} = 0.59 \text{ fm}$
48 $U_C = 24 \text{ MeV}$
49 $U_C = 0.72 \text{ MeV}$ (> 0.19 MeV)
50 $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega_0$; $\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a\sqrt{\pi}}} (\frac{x}{a}) e^{-\frac{x^2}{2\pi^2}}$; $a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$
51 1. $\Delta X = \frac{a}{\sqrt{2}}$; $\Delta P = \frac{\hbar}{a} \frac{1}{\sqrt{2}}$; $\Delta X \,\Delta P = \frac{\hbar}{2}$ (Minimum)
2. $\Delta X = \sqrt{\frac{3}{2}} a$; $\Delta P = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\hbar}{a}$; $\Delta X \Delta P = \frac{3}{2} \hbar$ (> $\frac{\hbar}{2}$)

386 Lösungen der Aufgaben

52
$$\psi_2^{(+)}(x)$$
: Bereich I, III: $\frac{\lambda_2^{(+)}}{a} = 1.245$; Bereich II: $\kappa_2^{(+)}a = 2.186$
 $\psi_2^{(-)}(x)$: Bereich I, III: $\frac{\lambda_2^{(-)}}{a} = 1.215$; Bereich II: $\kappa_2^{(-)}a = 1.873$



53 1.
$$\sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon-1}} = \tan(\gamma\sqrt{\epsilon}) \tan(\frac{\gamma}{2}\sqrt{\epsilon-1})$$

2. $\epsilon_0 = 1.32$
54 1. $-(\frac{d}{2}+a) \le x \le -\frac{d}{2} : \psi_n^{(+)}(x) = -\frac{1}{\sqrt{a}} \sin[n\frac{\pi}{a}(x+\frac{d}{2})]$; $\psi_n^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin[n\frac{\pi}{a}(x+\frac{d}{2})]$
 $-\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2} : \psi_n^{(+)}(x) = \psi_n^{(-)}(x) \equiv 0$
 $\frac{d}{2} \le x \le (\frac{d}{2}+a) : \psi_n^{(+)}(x) = \psi_n^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin[n\frac{\pi}{a}(x-\frac{d}{2})]$
 $E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, n = 1, 2, 3, ...$; $P_l = P_r = \frac{1}{2}$ (!)
2. $\frac{d}{2} \le x \le (\frac{d}{2}+a) : \psi_n^{(r)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin[n\frac{\pi}{a}(x-\frac{d}{2})]$; $\psi_n^{(r)}(x) \equiv 0$
überall sonst.
 $-(\frac{d}{2}+a) \le x \le -\frac{d}{2} : \psi_n^{(l)}(x) = -\sqrt{\frac{2}{a}} \sin[n\frac{\pi}{a}(x+\frac{d}{2})]$; $\psi_n^{(l)}(x) \equiv 0$
überall sonst.
 $E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$
388 Lösungen der Aufgaben

2.
$$E_{12} = \frac{5}{2} \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}$$
; $\psi_{12}(x_1, x_2) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a} x_2\right)$
 $\psi_{21}(x_1, x_2) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{2\pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} x_2\right)$

3. identisch mit 1.

4.
$$E_{12} = \frac{5}{2} \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}$$
; $\psi_{12}(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{2}}{a} \left[\sin\left(\frac{\pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a} x_2\right) + \sin\left(\frac{\pi}{a} x_2\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a} x_1\right) \right]$

Entartung aufgehoben

68 1.
$$\sqrt{\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle} = \frac{a}{\sqrt{6}} \sqrt{1 - \frac{6}{\pi^2}}$$

2. Nein

$$\begin{aligned} \mathbf{69} \quad 1. \ \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle^{(\text{versch.})} &= \langle x^2 \rangle_A + \langle x^2 \rangle_B - 2 \, \langle x \rangle_A \, \langle x \rangle_B \\ 2. \ \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle^{(\text{ident.})} &= \langle x^2 \rangle_A + \langle x^2 \rangle_B - 2 \, \langle x \rangle_A \, \langle x \rangle_B - 2 \, |\langle x \rangle_{AB}|^2 \end{aligned}$$

70 1.
$$\psi_{ABC}(x_1, x_2, x_3) = \psi_A(x_1) \psi_B(x_2) \psi_C(x_3)$$

 $\psi_{ACB}(x_1, x_2, x_3) = \psi_A(x_1) \psi_C(x_2) \psi_B(x_3)$
 $\psi_{BAC}(x_1, x_2, x_3) = \psi_B(x_1) \psi_A(x_2) \psi_C(x_3)$
 $\psi_{BCA}(x_1, x_2, x_3) = \psi_B(x_1) \psi_C(x_2) \psi_A(x_3)$
 $\psi_{CAB}(x_1, x_2, x_3) = \psi_C(x_1) \psi_A(x_2) \psi_B(x_3)$
 $\psi_{CBA}(x_1, x_2, x_3) = \psi_C(x_1) \psi_B(x_2) \psi_A(x_3)$

2.
$$\psi^{(a)}(x_1, x_2, x_3)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} \{ \psi_A(x_1) \psi_B(x_2) \psi_C(x_3) - \psi_A(x_1) \psi_B(x_3) \psi_C(x_2) + \psi_A(x_2) \psi_B(x_3) \psi_C(x_1) - \psi_A(x_2) \psi_B(x_1) \psi_C(x_3) + \psi_A(x_3) \psi_B(x_1) \psi_C(x_2) - \psi_A(x_3) \psi_B(x_2) \psi_C(x_1) \}$$

3.
$$\psi^{(s)}(x_1, x_2, x_3)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} \{ \psi_A(x_1) \psi_B(x_2) \psi_C(x_3) + \psi_A(x_1) \psi_B(x_3) \psi_C(x_2) + \psi_A(x_2) \psi_B(x_3) \psi_C(x_1) + \psi_A(x_2) \psi_B(x_1) \psi_C(x_3) + \psi_A(x_3) \psi_B(x_1) \psi_C(x_2) + \psi_A(x_3) \psi_B(x_2) \psi_C(x_1) \}$$

4.
$$\psi^{(s)}(x_1, x_2, x_3) = \psi_A(x_1) \psi_A(x_2) \psi_A(x_3)$$

A: Grundzustand des Einteilchenproblems

71 1.
$$\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$$
; $\langle S_z \rangle = \pm \hbar$; $\langle S_x^2 \rangle = \langle S_y^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2}$
 $\langle S_z^2 \rangle = \hbar^2$; $\langle S^2 \rangle = 2\hbar^2$; $\langle S_\perp^2 \rangle = \hbar^2$
 $\Delta S_x = \Delta S_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}$; $\Delta S_z = 0$

Lösungen der Aufgaben

2.
$$\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = \langle S_z \rangle = 0$$
 ; $\langle S_x^2 \rangle = \langle S_y^2 \rangle = \hbar^2$; $\langle S_z^2 \rangle = 0$
 $\langle S^2 \rangle = \langle S_{\perp}^2 \rangle = 2\hbar^2$; $\Delta S_x = \Delta S_y = \hbar$; $\Delta S_z = 0$
3. $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = \langle S_z \rangle = \langle S_x^2 \rangle = \langle S_y^2 \rangle = \langle S_z^2 \rangle \langle = \langle S^2 \rangle = \langle S_{\perp}^2 \rangle$
 $= \Delta S_x = \Delta S_y = \Delta S_z = 0$
72 1. $\langle \frac{1}{r^3} \rangle_{21} = \frac{1}{24a_0^3}$
2. $\Delta E^{(sl)} = \frac{1}{16} m_e c^2 \alpha^4$; $\Delta E^{(fs)} = \frac{1}{32} m_e c^2 \alpha^4 = 4.53^{-10} \,\mathrm{eV}$
73 $\Delta E^{(2s)} = \frac{1}{8} \Delta E^{(1s)} = 0.735 \times 10^{-6} \,\mathrm{eV}$

74 1.
$$E_n = -\frac{\mu c^2}{2} \frac{\alpha^2}{n^2} = -\frac{3235}{n^2} \text{ eV}$$
, $n = 1, 2, 3, ...$
 $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (\equiv (5.227))$



3. Null $(\overrightarrow{\mathbf{s}} = 0)$

75
$$N^{(j_1,j_2)} \equiv N^{(J)} = 4j_1j_2 + 2(j_1+j_2) + 1$$

76
$$E_{22} = -2R_{\infty} = -27.2 \text{ eV}$$
; $E_{1\infty} = -4R_{\infty} = -54.4 \text{ eV}$
 $E_{22} > E_{1\infty}$: (2,2)-Zustand nicht gebunden

77
$$E_{11} = -6.125 R_{\infty} = -83.36 \,\mathrm{eV}$$

78 1.
$$E_{11} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}$$
; $\psi_{11}^{(s)}(x_1, x_2) = \frac{2}{a} \sin(\frac{\pi}{a} x_1) \sin(\frac{\pi}{a} x_2)$; $J = S = 0$
2. $\psi^{(s)}(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{2}}{a} [\sin(\frac{\pi}{a} x_1) \sin(\frac{2\pi}{a} x_2) + \sin(\frac{\pi}{a} x_2) \sin(\frac{2\pi}{a} x_1)]$

389

$$J = S = 0$$

$$\psi^{(a)}(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{2}}{a} \left[\sin(\frac{\pi}{a} x_1) \sin(\frac{2\pi}{a} x_2) - \sin(\frac{\pi}{a} x_2) \sin(\frac{2\pi}{a} x_1) \right]$$

$$J = S = 1 \quad ; \quad E_{12} = \frac{5}{2} \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} : \text{ 4-fach entartet}$$

3. $\Delta E \simeq \frac{\alpha \hbar c}{a} \quad ; \quad a \ll \frac{\pi^2 \hbar}{\alpha mc} \simeq 5 \times 10^{-10} \text{ m}$

79

82

80 Fermionen:
$$(p, \pi^{-})$$
, $\binom{2}{1}$ D, e^{-}), $\binom{4}{2}$ He, e^{-}), $\binom{7}{3}$ Li)
Bosonen: (e^{+}, e^{-}) , (p, e^{-}) , (H_{2}) , (p, μ^{-}) , (\overline{p}, e^{+}) , $\binom{2}{1}$ D), $\binom{4}{2}$ He), $\binom{4}{2}$ He, $2e^{-}$), $\binom{7}{3}$ Li, $3e^{-}$)

Metall81 1.

2.







83 1. $\mu^- \rightarrow e^- + \overline{\nu_e} + \nu_{\mu}$

2. $\pi^- \rightarrow \mu^- + \overline{\nu_\mu}$





2. Alle!

392 Lösungen der Aufgaben

85
$$p \rightarrow n + e^+ + \nu_e$$
; $p + e^- \rightarrow n + \nu_e$



A Statistische Fehler

Ein physikalisches Messresultat ohne Fehlerangabe ist bekanntlich kein Resultat, denn jede Messung hat eine Grenze der Genauigkeit, die man kennen muss. Dies gilt insbesondere für die große Klasse von Messungen der Quantenphysik, die auf der Zählung von Ereignissen beruhen, welche statistischen Schwankungen unterworfen sind. Die Unsicherheiten solcher Messungen nennen wir *"statistische Fehler"*.

Als konkrete Situation wählen wir das Demonstrationsexperiment *Pro-jektionswahrscheinlichkeit* (Abschn. 3.2, Abb. 3.6).

Wir vereinfachen zunächst das Messproblem, indem wir den Winkel θ zwischen den Polarisationsrichtungen x und *i* speziell wählen, nämlich $\theta = 45^{\circ}$. Damit ist nach (3.20)

$$P_a = P_b = 1/2 \quad , \tag{A.1}$$

d. h. die Wahrscheinlichkeit dafür, ein Photon des einlaufenden Strahls im Ausgangsstrahl *a* bzw. *b* zu finden, ist je 50%. Zudem setzen wir ideale Detektoren voraus (100% Ansprechwahrscheinlichkeit für Photonen und Dunkelzählrate $Z_{\text{dunkel}} = 0$). Wir zählen die Anzahl der Photonen des Strahls *a*, die im Detektor D_a während einer bestimmten Messzeit registriert werden. Das Resultat sei *Z*. Wir stellen die Frage: Wie groß ist der statistische Fehler der Einzelmessung *Z*?

Die physikalische Grundvoraussetzung ist die, dass die Photonen un-abhängig voneinander sind: Das Schicksal jedes Photons (Strahl a oder Strahl b) ist unabhängig vom Schicksal jedes anderen.

Wir denken uns eine feste Photonenzahl N im einlaufenden Strahl, sagen wir N = 30 Photonen. Diesen Photonen ordnen wir 30 identische Münzen zu. Wir schütteln diese kräftig durcheinander, werfen sie auf und schauen nach, wie oft der Kopf oben ist; Kopf oben bedeutet Strahl a, Zahl oben entspricht Strahl b. Dieses Spiel wiederholen wir 100 Mal; das Ergebnis ist als Histogramm in Abb. A.1 dargestellt.

Das Histogramm zeigt (erwartungsgemäß), dass die häufigsten Konfigurationen diejenigen in der Umgebung von n = N/2 = 15 sind. Würden wir die Anzahl der Spiele erhöhen, dann würde die Ordinatenachse anwachsen und die Endpunkte der vertikalen Balken würden sich immer mehr einer glatten



Abb. A.1. Anzahl Spiele mit n Mal Kopf, als Funktion von n, für 100 Spiele mit 30 Münzen. Die Punkte auf der Kurve repräsentiert die wahrscheinlichsten Werte.

Kurve annähern. In der Abb. A.1 beobachten wir *statistische Fluktuationen* relativ zu einem glatten (regulären) Verlauf der Werte.

Die nächste Frage lautet: Können wir den glatten Verlauf bestimmen, d. h. den *wahrscheinlichsten Wert* für jede Konfiguratin n berechnen? Die Idee ist einfach: Wir stellen uns alle möglichen Ergebnisse von Würfen mit 30 Münzen vor, zählen diejenigen mit genau n Köpfen und dividieren diese Zahl durch die Gesamtzahl der möglichen Würfe von 30 Münzen.

Sei $C_N(n)$ die Zahl der Würfe von N Münzen, welche zu genau n Köpfen führen. Dann ist die Wahrscheinlichkeit $P_N(n)$ für die Konstellation n gegeben durch

$$P_N(n) = \frac{C_N(n)}{2^N} \quad . \tag{A.2}$$

Der Nenner 2^N ist die Gesamtzahl der Würfe von N Münzen. Für $C_N(n)$ findet man den allgemeinen Ausdruck

$$C_N(n) = \frac{N!}{n!(N-n)!}$$
 (A.3)

Multiplizieren wir die Wahrscheinlichkeit (A.2) (für N = 30) mit 100 (Zahl der Würfe), dann erhalten wir die in Abb. A.1 eingezeichneten wahrscheinlichsten Werte.

Zur Erläuterung der Resultate (A.2), (A.3) wählen wir das einfache **Bei**spiel mit drei Münzen (N = 3). Die (8) möglichen Würfe sind (K: Kopf, Z: Zahl):

$$KKK, KKZ, KZK, KZZ, ZKK, ZKZ, ZZK, ZZZ$$
. (A.4)

Der Darstellung (A.4) entnehmen wir

$$C_3(3) = 1$$
 , $C_3(2) = 3$, $C_3(1) = 3$, $C_3(0) = 1$, (A.5)

und daraus folgt

$$P_3(3) = \frac{1}{8}$$
, $P_3(2) = \frac{3}{8}$, $P_3(1) = \frac{3}{8}$, $P_3(0) = \frac{1}{8}$, (A.6)

in Übereinstimmung mit den allgemeinen Ausdrücken (A.3) und (A.2).

Im nächsten Schritt verallgemeinern wir das Resultat (A.2), indem wir die Annahme (A.1) aufgeben und *beliebige* Werte der Projektionswahrscheinlichkeiten P_a , P_b zulassen. Die Wahrscheinlichkeit dafür, das Photon des einlaufenden Strahls im Strahl a zu zählen, sei $p (\equiv P_a)$. Entsprechend ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das Photon im Strahl b zu finden, (1-p). Wenn wir verlangen, dass von N Photonen genau n im Strahl a detektiert werden, heißt es, dass die übrigen (N - n) Photonen im Strahl b gezählt werden können. Die allgemeine Wahrscheinlichkeit $P_N(n)$ für die Konstellation n im Strahl aist dann gegeben durch das Produkt der Anzahl der Konstellationen n aller N Photonen $(C_N(n))$ mit der Wahrscheinlichkeit, n Photonen im Strahl aund (N - n) Photonen im Strahl b zu finden. Dies dedeutet

$$P_N(n) = C_N(n) p^n (1-p)^{N-n} \quad , \tag{A.7}$$

denn $p^n \cdot (1-p)^{N-n}$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, genau n Photonen im Strahl a zu finden. (Im Spezialfall p = 1/2 geht (A.7) in (A.2) über.) Wir setzen (A.3) in (A.7) ein und erhalten schließlich

$$P_N(n) = \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n (1-p)^{N-n} \quad . \tag{A.8}$$

Dieses Resultat heißt **Binomialverteilung**.

Fast alle Fälle der Praxis haben mit Messungen großer Zählraten zu tun $(Z\gg 1)$ oder allgemein mit

$$N \gg 1$$
 . (A.9)

Aus diesem Grund werden wir uns – in der Berechnung der statistischen Fehler (und der Fehlerfortpflanzung) – auf den Grenzfall (A.9) beschränken. Die Binomialverteilung lässt sich in diesem Fall mathematisch umformen. Man findet die einfache analytische Verteilungsfunktion¹, genannt **Gauss-Verteilung**:

$$P(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\Delta n} \, e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{n-\overline{n}}{\Delta n}\right)^2} \tag{A.10}$$

¹ Siehe z. B. *F. Reif*, Statistical Physics, Berkeley Physics Course, Vol. 5, McGraw-Hill (1967), Appendix A.1.

396 A Statistische Fehler

Darin bedeutet

$$\overline{n} = Np \tag{A.11}$$

die wahrscheinlichste Zählrate, und Δn ist die spektrale Breite der Verteilung (definiert als $\Delta n = \sqrt{(n-\overline{n})^2}$). Es gilt

$$\underline{\Delta n} = \sqrt{Np(1-p)} \quad . \tag{A.12}$$

Im Gegensatz zur Binomialverteilung (A.8; gültig für beliebige *N*-Werte) können wir die Gauss-Verteilung (A.10) als *kontinuierliche* Funktion von *n* auffassen. Denn für $N \gg 1$ sind im Allgemeinen auch \overline{n} und Δn große Zahlen, und für benachbarte Werte von *n* ändert sich die Funktion P(n) deshalb wenig.

Für *quantitative* Auswertungen ist es zweckmäßig, die (kontinuierliche) Variable

$$z = \frac{n - \overline{n}}{\Delta n} \tag{A.13}$$

einzuführen, welche die Abweichungen vom wahrscheinlichstenWert der Verteilung beschreibt. Aus (A.10) folgt damit

$$P(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}z^2} \quad , \tag{A.14}$$

wobei P(z) die Wahrscheinlichkeitsverteilung – in Einheiten $(\Delta n)^{-1}$ – ausdrückt, mit der Normierung

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(z) dz = 1 \quad . \tag{A.15}$$

Die Verteilung (A.14) ist in Abb. A.2 dargestellt.

Die Gauss-Verteilung in der Form (A.14) ist universell, d. h. gültig für beliebige Werte von $N \gg 1$ und p.

Mit diesem Ergebnis sind wir in der Lage, die eingangs gestellte Frage nach dem statistischen Fehler der Einzelmessung Z zu beantworten, und zwar für beliebige Wahrscheinlichkeiten p und Photonzahlen Z. Die Gauss-Verteilung (A.10) enthält die gesamte mögliche Information über die statistische Natur des Zählexperiments.

Das Ziel des Experiments ist es, die mittlere (wahrscheinlichste) Zählrate \overline{n} (A.11) zu bestimmen. Das Ergebnis Z einer Einzelmessung liegt in der Nähe von \overline{n} , wird aber im Allgemeinen von \overline{n} verschieden sein (statistische Schwankung). Da wir aber den Wert von \overline{n} nicht kennen (– würden wir ihn kennen, wäre das Experiment überflüssig!), können wir natürlich die Abweichung zwischen Z und \overline{n} nicht angeben. Das einzige, das wir tun können, ist eine Schätzung zu geben, welche ein $Ma\beta$ für die statistische Schwankung der Einzelmessung Z darstellt; dieses Maß heißt statistischer Fehler.



Abb. A.2. Gauss-Verteilung in Einheiten der reziproken spektralen Breite Δn , als Funktion der Abweichung z vom wahrscheinlichsten Wert.

Konventionell ist es üblich, die spektrale Breite Δn (A.12) – auch Standardabweichung genannt – als statistischen Fehler von Z einzuführen. Der statistische Fehler ΔZ von Z ist also definiert als

$$\Delta Z \equiv \Delta n = \sqrt{\overline{Z}} \quad , \tag{A.16}$$

wobei $\overline{Z} = Np(1-p)$ die wahrscheinlichste Zählrate im Strahl *a* ist (die wir nicht kennen). Da aber $\sqrt{\overline{Z}} \ll \overline{Z}$ ist, muss der Messwert *Z* der Einzelmessung in der Nähe von \overline{Z} sein, und wir können mit (A.16) in guter Näherung schreiben

$$\Delta Z \simeq \sqrt{Z} \qquad Z \gg 1 \quad . \tag{A.17}$$

Damit sind wir in der Lage, den statistischen Fehler der Einzelmessung in einfachster Weise aus der Einzelmessung selbst zu berechnen. Wir bezeichnen das Messresultat dann mit " $Z \pm \Delta Z$ ".

Die genaue Bedeutung des statistischen Fehlers ΔZ ist aus Abb. A.2 ersichtlich. Die Wahrscheinlichkeit $W(\pm \Delta n)$ dafür, dass der Messwert Z im Intervall zwischen $\overline{Z} - \Delta n$ und $\overline{Z} + \Delta n$ liegt, ist gegeben durch

$$W(\pm \Delta n) = \int_{-1}^{+1} P(z) \, dz = 0.683 \quad . \tag{A.18}$$

Wir erwarten also, dass der Messwert Z in 68 % der Fälle vom wahrscheinlichsten Wert (oder Mittelwert) um weniger als ΔZ abweicht; in 32 % der Fälle wird die Abweichung größer sein als ΔZ !

Anstelle der Relation (A.16) könnten wir den statistischen Fehler auch durch

$$\Delta Z \equiv 2\,\Delta n = 2\sqrt{\overline{Z}} \simeq 2\sqrt{\overline{Z}} \tag{A.19}$$

definieren. Für diesen Fall wäre die Wahrscheinlichkeit

$$W(\pm 2\Delta n) = \int_{-2}^{+2} P(z) \, dz = 0.954 \quad , \tag{A.20}$$

d.h. in 95 % der Fälle würde der Messwert Z vom Mittelwert um weniger als ΔZ abweichen (siehe Abb. A.2).

Die große Bedeutung des einfachen Resultats (A.17) besteht darin, dass die physikalischen Voraussetzungen für seine Gültigkeit sehr allgemein sind. Es ist keineswegs auf das eingangs erwähnte Demonstrationsexperiment der Projektionswahrscheinlichkeit beschränkt.

Wir demonstrieren diesen Sachverhalt an einem scheinbar völlig anders gearteten **Beispiel**: Die Atomkerne einer radioaktiven Quelle emittieren einen bestimmten Typ von Quantonen, die in einem Detektor einzeln gemessen werden. Während einer gewissen Messzeit t zerfallen N Atomkerne, die je ein solches Quanton emittieren, und Z davon werden im Detektor gezählt, wobei $Z \gg 1$. Der statistische Fehler der Messung Z ist wiederum gegeben durch (A.17). Die Wahrscheinlichkeit p ist hier die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein von der Quelle emittiertes Quanton im Detektor gemessen wird. ((1 - p)ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass es nicht gemessen wird.) Die Wahrscheinlichkeit p hängt ab von der Größe des Detektors, seinem Abstand zur Quelle (Raumwinkel) und seiner Ansprechwahrscheinlichkeit. In die Berechnung des statistischen Fehlers von Z geht aber nach (A.17) nur die Zahl Zselbst ein!

Die allgemeinen Voraussetzungen für die Gültigkeit von (A.17) sind:

- Es existiert *ein Messkanal* (Detektor), der Z Ereignisse registriert.
- Die einzelnen Ereignisse sind *unabhängig* voneinander.
- Die Zahl Z ist groß $(Z \gg 1)$.

In den Experimenten ist die physikalisch interessante Größe oft nicht direkt die Messzahl Z, sondern eine Funktion von einer oder mehrerer Messzahlen. Beispiele dafür sind etwa die Ausdrücke (3.19) im Abschn. 3.2, in welchen die Messzahlen Z'_a , Z', Z_{dunkel} und Z'_b auftreten. Um die statistischen Fehler der physikalisch interessanten Größen Z_a/Z , Z_b/Z zu bestimmen, müssen wir die **Gesetze der Fehlerfortpflanzung** kennen. Jeder Messzahl ist eine Gauss-Verteilung zugeordnet und damit ein statistischer Fehler (A.17). Aus den statistischen Fehlern der Messzahlen lassen sich die statistischen Fehler der Funktionswerte bestimmen.

Für die einfachsten Funktionen geben wir nachfolgend die Gesetze der Fehlerfortpflanzung explizit an. Diese gehören zu den unentbehrlichen Hilfsmitteln aller Atom-, Kern- und Teilchenphysiker.

• <u>Summe oder Differenz zweier Messzahlen</u>. Sei $F = Z_1 \pm Z_2$, dann gilt für die entsprechenden Fehler

$$(\Delta F)^2 = (\Delta Z_1)^2 + (\Delta Z_2)^2 = Z_1 + Z_2 \quad , \tag{A.21}$$

oder

$$\Delta F = \sqrt{Z_1 + Z_2} \quad . \tag{A.22}$$

In Worten: Das Quadrat des statistischen Fehlers der Summe (Differenz) ist gleich der Summe der Quadrate der statistischen Fehler der Summanden.

• <u>Produkt oder Quotient zweier Messzahlen</u>. Sei $F = Z_1 Z_2$ bzw. $F = \frac{Z_1}{Z_2}$, dann gilt für die entsprechenden Fehler

$$\left(\frac{\Delta F}{F}\right)^2 = \left(\frac{\Delta Z_1}{Z_1}\right)^2 + \left(\frac{\Delta Z_2}{Z_2}\right)^2 = \frac{1}{Z_1} + \frac{1}{Z_2} \quad , \tag{A.23}$$

 oder

$$\frac{\Delta F}{F} = \sqrt{\frac{1}{Z_1} + \frac{1}{Z_2}}$$
 (A.24)

In Worten: Das Quadrat des relativen statistischen Fehlers eines Produkts (Quotients) ist gleich der Summe der Quadrate der relativen statistischen Fehler der Faktoren (bzw. von Dividend und Divisor).

Durch mehrfache Anwendung von (A.22) und (A.24) wurden beispielsweise die in Abb. 3.7 eingezeichneten statistischen Fehler berechnet.

Abschließend geben wir das allgemeine Fehlerfortpflanzungsgesetz an. Sei $F(Z_1, Z_2, ..., Z_k)$ eine beliebige Funktion der einzelnen, unabhängigen Messzahlnen Z_i (i = 1, ..., k), die alle einer Gauss-Verteilung unterworfen sind. Der statistische Fehler des ΔF des Funktionswertes ist dann gegeben durch

$$\Delta F = \sqrt{\sum_{i=1}^{k} \left(\frac{\partial F}{\partial Z_i}\right)^2 (\Delta Z_i)^2} \quad , \tag{A.25}$$

wobei ΔZ_i die statistischen Fehler der Messzahlen sind und in den Funktionen der Summanden die Messwerte für Z_i einzusetzen sind.

B Die Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms

Wir präsentieren die vollständige Bestimmung der Wellenfunktionen der stationären Zustände von Wasserstoff. Der erste Teil der Herleitung bezieht sich auf ein beliebiges rotationssymmetrisches Potential $U(\mathbf{r}) = U(r)$; die Spezialisierung auf das Coulomb-Potential erfolgt erst im zweiten Teil.

Die örtliche, zeitabhängige Wellenfunktion eines beliebigen stationären Zustandes der Energie ${\cal E}$ hat die Form

$$\Psi(\mathbf{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi(\mathbf{r}) \quad . \tag{B.1}$$

Da das Potential rotationssymmetrisch ist, sind die natürlichen Koordinaten der Wellenfunktion die Kugelkoordinaten (r, θ, ϕ) (Abb. B.1).

Durch Einsetzen von (B.1) in die Schrödinger-Gleichung (5.72) finden wir die Differentialgleichung der ortsabhängigen Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \theta, \phi)$

$$E\psi(r,\theta,\phi) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\psi(r,\theta,\phi) + U(r)\psi(r,\theta,\phi) \quad . \tag{B.2}$$

Wir versuchen, die Gleichung (B.2) durch den Produktansatz

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r) Y(\theta,\phi) \tag{B.3}$$



Abb. B.1. Kugelkoordinaten (r, θ, ϕ) des Ortsvektors **r**.

402 B Die Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms

zu lösen. Dazu setzen wir (B.3) in (B.2) ein und erhalten

$$E R(r) Y(\theta, \phi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 R'(r) \right) Y(\theta, \phi) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \\ \times \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} \right] R(r) \\ + U(r) R(r) Y(\theta, \phi) \quad .$$
(B.4)

Die Gleichung (B.4) kann in den Variablen r bzw. θ, ϕ "separiert" werden. Dies erreichen wir, indem wir (B.4) durch $R(r) Y(\theta, \phi)$ dividieren und gleichzeitig mit dem Faktor $2mr^2/\hbar^2$ multiplizieren:

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 R'(r) \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(E - U(r) \right) = -\frac{1}{Y(\theta,\phi)} \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y(\theta,\phi)}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin\theta^2} \right] \frac{\partial^2 Y(\theta,\phi)}{\partial\phi^2} \quad . \quad (B.5)$$

Da die linke Seite von (B.5) nur *r*-abhängig ist und die rechte Seite nur (θ, ϕ) abhängig, müssen beide Seiten gleich einer Konstanten sein, die wir λ nennen. Damit erhalten wir die Differentialgleichung der Funktion R(r)

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 R'(r)\right) + \left[\frac{2m}{\hbar^2}r^2(E - U(r)) - \lambda\right]R(r) = 0$$
(B.6)

sowie die Differentialgleichung für $Y(\theta, \phi)$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y(\theta,\phi)}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y(\theta,\phi)}{\partial\phi^2} + \lambda Y(\theta,\phi) = 0 \quad . \tag{B.7}$$

Wir versuchen, eine weitere Separation der Gleichung (B.7) zu erreichen durch den Produktansatz

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \Phi(\phi) \quad . \tag{B.8}$$

Einsetzen von (B.8) in (B.7) liefert

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \,\Theta'(\theta) \right) \,\Phi(\phi) + \frac{1}{\sin^2\theta} \,\Phi''(\phi) \,\Theta(\theta) + \lambda \,\Theta(\theta) \,\Phi(\phi) = 0 \quad . \tag{B.9}$$

Nun dividieren wir (B.9) durch $\Theta(\theta) \Phi(\phi)$ und multiplizieren mit $\sin^2 \theta$:

$$\sin\theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \,\Theta'(\theta)\right) \frac{1}{\Theta(\theta)} + \lambda \,\sin^2\theta = -\frac{\Phi''(\phi)}{\Phi(\phi)} \quad . \tag{B.10}$$

Die linke Seite von (B.10) hängt nur von θ ab, die rechte nur von ϕ . Die gemeinsame Konstante der Ausdrücke beider Seiten nennen wir diesmal ν , und damit erhalten wir aus (B.10) einerseits die Differentialgleichung für $\Theta(\theta)$

$$\sin\theta \frac{d}{d\theta} (\sin\theta \,\Theta'(\theta)) + (\lambda \,\sin^2\theta - \nu) \,\Theta(\theta) = 0 \quad , \tag{B.11}$$

und andererseits die Differentialgleichung für $\Phi(\phi)$

$$\Phi''(\phi) + \nu \Phi(\phi) = 0$$
 . (B.12)

Die Gleichung (B.12) hat die allgemeine Lösung

$$\Phi(\phi) = A e^{i\sqrt{\nu}\phi} + B e^{-i\sqrt{\nu}\phi} \quad ; \quad \nu \neq 0$$

$$\Phi(\phi) = A + B \phi \quad ; \quad \nu = 0 \quad , \tag{B.13}$$

wobei A, B Konstanten sind.

Wir müssen immer unterscheiden zwischen den allgemeinen mathematischen Lösungen einer Differentialgleichung und den "physikalisch akzeptablen" Lösungen, d. h. der Lösung, die eine bestimmte physikalische Situation beschreibt. Die physikalisch akzeptable Lösung ist durch Randbedingungen, Anfangsbedingungen usw. festgelegt. Im Fall der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ eines beliebigen (endlichen) Potentials $U(\mathbf{r})$ ist es sinnvoll zu fordern, dass die Wellenfunktion und ihr Gradient in jedem Raumpunkt stetig und eindeutig sind. Dies garantiert, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\mathbf{r})$ und die Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ überall stetig sind.

Die Stetigkeit und Eindeutigkeit der Funktion $\Phi(\phi)$ im Intervall $0 \le \phi \le 2\pi$ bedeutet

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi) \quad . \tag{B.14}$$

Mit (B.13) folgt aus (B.14) (verifiziere!)

$$e^{i\sqrt{\nu}\,2\pi} = 1 \quad ,$$

d.h.

$$\sqrt{\nu} \equiv m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$
 (B.15)

ganzzahlig. Die physikalisch akzeptablen Lösungen sind also (bis auf eine multiplikative Konstante)

$$\Phi_m(\phi) = e^{im\phi} \quad ; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$
(B.16)

Nun wenden wir uns der Winkelfunktion $\Theta(\theta)$ zu, die im Intervall $0 \le \theta \le \pi$ definiert ist (Abb. B.1). Es ist zweckmäßig, die Variable

$$\omega = \cos\theta \quad ; \quad -1 \le \omega \le 1 \tag{B.17}$$

und entsprechend die Funktion

$$P(\omega) \equiv \Theta(\theta) \tag{B.18}$$

einzuführen. Damit geht die Differentialgleichung (B.11) über in (verifiziere!)

$$\frac{d}{d\omega}\left[\left(1-\omega^2\right)P'(\omega)\right] + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-\omega^2}\right)P(\omega) = 0 \quad , \tag{B.19}$$

wobei wir (B.15) verwendet haben¹. Da (B.19) eine Differentialgleichung zweiter Ordnung ist, hat sie zwei linear unabhängige Lösungen. Ausgenommen für spezielle Werte des Parameters λ , sind beide Lösungen für $\omega = \pm 1$ unendlich und deshalb physikalisch nicht akzeptabel. Speziell für

$$\lambda = l(l+1) \quad ; \quad l = 0, 1, 2, \dots \tag{B.20}$$

ist eine der beiden Lösungen für $\omega = \pm 1$ endlich (die andere nicht). Die endliche Lösung ist von der Form $(1 - \omega^2)^{\frac{1}{2}|m|} \times$ Polynom in ω der Ordnung l - |m|.

Speziell für $\underline{m} = 0$ ist die physikalisch akzeptable Lösung also ein Polynom der Ordnung l, genannt **Legendre-Polynom** $P_l(\omega)$. Die Legendre-Polynome sind mit Hilfe der *Rodrigues-Formel*

$$P_l(\omega) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\omega^l} \left(\omega^2 - 1\right)^l \tag{B.21}$$

berechenbar; beispielsweise ist

$$P_0(\omega) = 1$$
; $P_1(\omega) = \omega$; $P_2(\omega) = \frac{1}{2} (3\omega^2 - 1)$ etc. (B.22)

Im allgemeinen Fall $\underline{m} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ hat die Gleichung (B.19) physikalisch akzeptable Lösungen für

$$\lambda = l(l+1) \quad \text{und} \quad |m| \le l \quad . \tag{B.23}$$

Diese Lösungen heißen **assoziierte Legendre-Funktionen** $P_{lm}(\omega)$ und sind darstellbar durch die Legendre-Polynome:

$$P_{l|m|}(\omega) = (1 - \omega^2)^{\frac{1}{2}|m|} \frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}} P_l(\omega) \quad . \tag{B.24}$$

(Speziell ist $P_{l0}(\omega) \equiv P_l(\omega)$.) Wir erhalten aus (B.24) mit (B.17) und (B.22) beispielsweise

$$P_{00}(\cos\theta) = 1 \quad ; \quad P_{10}(\cos\theta) = \cos\theta \quad ; \quad P_{11}(\cos\theta) = \sin\theta$$
$$P_{20}(\cos\theta) = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1) \quad ; \quad P_{21}(\cos\theta) = 3\sin\theta\cos\theta \quad ;$$
$$P_{22}(\cos\theta) = 3\sin^2\theta \quad . \tag{B.25}$$

¹ Die Eigenschaften der Differentialgleichung (B.19) und ihrer Lösungen sind in *E.T. Whittaker* and *G.N. Watson*, "A Course in Modern Analysis", University Press Cambridge (1958) vollständig diskutiert.

Mit (B.16), (B.21) und (B.24) kennen wir die vollständige Winkelabhängigkeit der Wellenfunktion für ein beliebiges rotationssymmetrisches Potential

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = N_{lm} P_{l|m|}(\cos\theta) \Phi_m(\phi) \quad , \tag{B.26}$$

wobei N_{lm} die Normierungskonstante ist. Die Winkelfunktionen (B.26) heißen **Kugelfunktionen**. (In der Literatur treten unterschiedliche Konventionen auf.)

Die Kugelfunktionen haben die wichtige Eigenschaft der **Orthogona**lität. Zunächst folgt aus (B.16) die Orthogonalitätsrelation

$$\int_{0}^{2\pi} \overline{\Phi_{m}(\phi)} \, \Phi_{m'}(\phi) \, d\phi = \int_{0}^{2\pi} e^{i(m'-m)\phi} d\phi = 2\pi \, \delta_{mm'} \quad . \tag{B.27}$$

Das Integral verschwindet also für $m \neq m'$. Für die (reellen) assoziierten Legendre-Funktionen gilt die Orthogonalitätsrelation

$$\int_{-1}^{1} P_{l|m|}(\omega) P_{l'|m|}(\omega) d\omega = \frac{2(l+|m|)!}{(2l+1)(l-|m|)!} \delta_{ll'} \quad . \tag{B.28}$$

Dieses Integral verschwindet für $l \neq l'$. Aus (B.27) und (B.28) folgt die Orthogonalität der Kugelfunktionen (B.26)

$$\int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \overline{Y_{lm}(\theta,\phi)} Y_{l'm'}(\theta,\phi) \sin\theta \, d\theta \, d\phi = |N_{lm}|^2 \, \delta_{ll'} \, \delta_{mm'} \quad . \tag{B.29}$$

Mit den Faktoren der δ -Funktionen in (B.27) und (B.28) gewinnen wir den Normierungsfaktor der Kugelfunktionen. Die normierten Kugelfunktionen sind also

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = \epsilon_m \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)}{(l+|m|)!}\right]^{1/2} P_{l|m|}(\cos\theta) e^{im\phi} \quad . \tag{B.30}$$

Der Phasenfaktor ϵ_m in (B.30) ist konventionell festgelegt² als $\epsilon_m = (-1)^m$ für $m \ge 0$ und $\epsilon_m = 1$ für $m \le 0$. Aus (B.30) und (B.25) erhalten wir

$$Y_{00}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} ; \quad Y_{10}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$
$$Y_{1,-1}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{-i\phi} ; \quad Y_{11}(\theta,\phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\phi}$$
$$etc. \tag{B.31}$$

² Die Kugelfunktionen haben die Eigenschaft $Y_{l,-m} = (-1)^m Y_{lm}$.

406 B Die Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms

Schließlich wenden wir uns der Lösung der radialen Differentialgleichung (B.6) zu für das *Coulomb-Potential des Wasserstoffatoms*

$$U(r) = -\frac{\alpha \hbar c}{r} \quad . \tag{B.32}$$

Mit (B.32) und (B.23) lautet die durch $2mr^2/\hbar^2$ dividierte Gleichung (B.6)

$$ER(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rR(r)) - \frac{\alpha\hbar c}{r} R(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} R(r) \quad .$$
(B.33)

(Den Ableitungsterm haben wir als zweite Ableitung umgeschrieben.) Nun substituieren wir für R(r) die dimensionslose Funktion

$$u(r) \equiv r R(r) \tag{B.34}$$

und erhalten

$$E u(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) - \frac{\alpha \hbar c}{r} u(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} u(r) \quad . \tag{B.35}$$

(Für l = 0 ist (B.35) identisch mit der entsprechenden Gleichung (5.212) im sphärisch symmetrischen Fall.)

Im Grenzübergang $\underline{r \to \infty}$ geht die Differentialgleichung (B.35) wieder über in Gl. (5.213)

$$E u(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) \qquad (r \to \infty) \quad , \tag{B.36}$$

und die mit einer Normierung der Wellenfunktion verträgliche radiale Funktion ist von der Form

$$u(r) = A e^{-\beta r} \quad , \tag{B.37}$$

wobei

$$\beta = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(-E)} \quad . \tag{B.38}$$

Im Grenzübergang $\underline{r} \to 0$ dominieren die letzten beiden Terme in (B.35) gegenüber dem Term auf der linken Seite und wir haben die Gleichung

$$u''(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}u(r) = 0$$
 $(r \to 0)$. (B.39)

Die Differentialgleichung (B.39) hat die allgemeine Lösung (verifiziere!)

$$u(r) = B r^{l+1} + C r^{-l} \quad . \tag{B.40}$$

Aus der Forderung, dass die Wellenfunktion $\psi(r, \theta, \phi)$ überall (also auch für r = 0) endlich sein muss, folgt mit (B.34) $u(r \to 0) = 0$, und damit ist C = 0 in (B.40).

Nun versuchen wir, die Differentialgleichung (B.35) auf eine dimensionslose Form zu bringen. Wir dividieren die Gleichung durch E und drücken die Energieabhängigkeit durch die Größe β (B.38) aus. Man erhält (verifiziere!)

$$\frac{1}{\beta^2} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} = \left[1 - \frac{2m\alpha c}{\beta^2 r\hbar} + \frac{l(l+1)}{\beta^2 r^2} \right] u(r) \quad . \tag{B.41}$$

Die Struktur von (B.41) suggeriert die Substitutionen

$$\rho \equiv \beta r \quad \text{und} \quad \rho_0 = \frac{2m\alpha c}{\hbar\beta} \quad .$$
(B.42)

Damit wird (B.41)

$$u''(\rho) - \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]u(\rho) = 0 \quad . \tag{B.43}$$

Die neue Variable ρ sowie die Größe ρ_0 sind (via β) abhängig von der Energie.

Im Ansatz für die Lösung der Differentialgleichung (B.43) mit festem Wert $l \ (l = 0, 1, 2, ...)$ bauen wir das asymptotische Verhalten (B.37) für $r \to \infty$ $(u \sim e^{-\rho})$ und (B.40) für $r \to 0$ $(u \sim \rho^{l+1})$ ein. Der Ansatz

$$u(\rho) = \rho^{l+1} v(\rho) e^{-\rho} = \rho^{l+1} (\alpha_0 + \alpha_1 \rho + \alpha_2 \rho^2 + \dots) e^{-\rho}$$
(B.44)

ist eine Potenzreihenentwicklung von $u(\rho)$ in der Umgebung von $\rho = 0$ mit dem korrekten Grenzwert für $\rho \to 0$, multipliziert mit dem Verhalten für $\rho \to \infty$. Wir setzen den allgemeinen Ausdruck (B.44) in (B.43) ein und erhalten die Differentialgleichung für die Funktion $v(\rho)$ (verifiziere!)

$$\rho v''(\rho) + 2(l+1-\rho) v'(\rho) + [\rho_0 - 2(l+1)] v(\rho) = 0 \quad . \tag{B.45}$$

Nun setzen wir die Taylor-Reihe

$$v(\rho) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \alpha_{\nu} \, \rho^{\nu} \tag{B.46}$$

in (B.45) ein und erhalten

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \alpha_{\nu} \left[\nu(\nu-1) \,\rho^{\nu-1} + 2(l+1)\nu \,\rho^{\nu-1} - 2\nu \,\rho^{\nu} + (\rho_0 - 2(l+1)) \,\rho^{\nu} \right] = 0 \quad . \tag{B.47}$$

Die Summe der Koeffizienten jeder Potenz von ρ muss null sein. Für die Potenz ρ^{ν} erhalten wir aus (B.47)

$$\alpha_{\nu+1}[(\nu+1)\nu+2(l+1)(\nu+1)] + \alpha_{\nu}[-2\nu+(\rho_0-2(l+1))] = 0 \quad .$$
 (B.48)

Die Relation (B.48) beinhaltet die Rekursionsformel

408 B Die Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms

$$\alpha_{\nu+1} = \frac{2(\nu+l+1) - \rho_0}{(\nu+1)(\nu+2l+2)} \,\alpha_{\nu} \quad , \tag{B.49}$$

die es erlaubt, aus α_{ν} den nachfolgenden Koeffizienten in der Reihe (B.46), $\alpha_{\nu+1}$, zu berechnen.

Wir betrachten zunächst die Funktion $v(\rho)$ für große Werte von ρ . In diesem Fall dominieren die hohen Potenzen ν in der Reihe (B.46) und aus (B.49) folgt für das Verhältnis aufeinanderfolgender Koeffizienten

$$\frac{\alpha_{\nu+1}}{\alpha_{\nu}} \to \frac{2}{\nu} \quad \text{für} \quad \nu \to \infty \quad . \tag{B.50}$$

Wir vergleichen die Eigenschaft (B.50) mit der Potenzreihe der Funktion

$$e^{2\rho} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} (2\rho)^{\nu} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{2^{\nu}}{\nu!} \rho^{\nu} = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \rho^{\nu} \quad . \tag{B.51}$$

Aus (B.51) folgt

$$\frac{a_{\nu+1}}{a_{\nu}} = \frac{2^{\nu+1}\nu!}{(\nu+1)!\,2^{\nu}} \to \frac{2}{\nu} \quad \text{für} \quad \nu \to \infty \quad . \tag{B.52}$$

Für große Werte von ρ verhält sich die Funktion $v(\rho)$ also wie $e^{2\rho}$ und entsprechend $u(\rho)$ nach (B.44) wie $\rho^{l+1} e^{\rho}$. Die zugehörige radiale Wellenfunktion wäre aber nicht normierbar! Daraus schließen wir: Die Potenzreihe für $v(\rho)$ muss nach endlich vielen Gliedern abbrechen; es existiert also eine maximale Potenz ν_{\max} , sodass

$$\alpha_{\nu} = 0 \quad \text{für} \quad \nu \ge \nu_{\max} + 1 \quad ; \quad \nu_{\max} = 0, 1, 2, \dots$$
 (B.53)

Die Abbruchbedingung (B.53) zusammen mit der Rekursionsformel (B.49) bestimmen (via Energieabhängigkeit von ρ_0) die Energieeigenwerte des Wasserstoffatoms! Aus (B.49) und (B.53) folgt nämlich

$$\rho_0 = 2(\nu_{\max} + 1 + l) \tag{B.54}$$

und – zusammen mit (B.42) und(B.38) –

$$E = -\frac{mc^2}{2} \frac{\alpha^2}{(\nu_{\max} + 1 + l)^2} \quad . \tag{B.55}$$

Wir definieren die Hauptquantenzahl n als

$$n \equiv \nu_{\max} + 1 + l$$
; $n = 1, 2, 3,$ (B.56)

Damit lässt sich die Energie (B.55) schreiben als

$$E_n = -\frac{mc^2}{2} \frac{\alpha^2}{n^2} \qquad n = 1, 2, 3....$$
(B.57)

Dies ist (wie schon im Spezialfall l = 0) exakt die Formel des Bohrschen Atommodells (Abschn. 1.4).

Die radiale Wellenfunktion R(r) hängt also von zwei Quantenzahlen ab, nämlich l (l = 0, 1, 2, ...) und n (n = 1, 2, 3, ...) und ist nach (B.34) und (B.44) gegeben durch

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r} \rho^{l+1} v(\rho) e^{-\rho} \quad , \tag{B.58}$$

wobei nach (B.42), (B.38) und (B.57)

$$\rho = \rho_n = \frac{\sqrt{2m(-E_n)}}{\hbar} r = \frac{mc\alpha}{n\hbar} r = \frac{r}{na_0}$$
(B.59)

von der Hauptquantenzahl n abhängt (a_0 ist der Bohrsche Radius). Zu jeder Energie E_n gibt es

$$(\nu_{\max} + 1) = n - l$$
 $(l = 0, 1, 2,)$ (B.60)

verschiedene radiale Wellenfunktionen. Dies folgt aus (B.46) und (B.56).

Zur Bestimmung der Koeffizienten der Potenzen der radialen Wellenfunktionen schreiben wir die Rekursionsformel (B.49) mit $\rho_0 = 2n$ (verifiziere!) als

$$\alpha_{\nu+1} = \frac{2(\nu+l+1-n)}{(\nu+1)(\nu+2l+2)} \,\alpha_{\nu} \quad . \tag{B.61}$$

Aus (B.58) folgt mit $(B.59)^3$

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r} \left(\frac{r}{na_0}\right)^{l+1} v\left(\frac{r}{na_0}\right) e^{-\frac{r}{na_0}} \quad . \tag{B.62}$$

Für l = 0 sind die radialen Wellenfunktionen (B.62) mit (B.44) und (B.61)

$$R_{10}(r) = \frac{\alpha_0}{a_0} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$R_{20}(r) = \frac{\alpha_0}{2a_0} \left[1 - \frac{r}{2a_0} \right] e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$R_{30}(r) = \frac{\alpha_0}{3a_0} \left[1 - 2\frac{r}{3a_0} + \frac{2}{3} \left(\frac{r}{2a_0} \right)^2 \right] e^{-\frac{r}{3a_0}} , \quad etc. \quad (B.63)$$

wobei die Konstanten α_0 durch die Normierung der radialen Wellenfunktionen

$$\int_{0}^{\infty} |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1$$
(B.64)

J

³ Die Funktionen $v(\rho)$ lassen sich auch durch die Laguerre-Polynome darstellen (siehe Fußnote 1).

festzulegen sind. Die normierten radialen Wellenfunktionen der energetisch tiefst liegenden Zustände sind (verifiziere!)

$$R_{10}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$R_{20}(r) = \frac{2}{(2a_0)^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$R_{21}(r) = \frac{2}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}} \frac{r}{2a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$R_{30}(r) = \frac{2}{(3a_0)^{3/2}} \left(1 - 2\frac{r}{3a_0} + \frac{2}{3}\left(\frac{r}{3a_0}\right)^2\right) e^{-\frac{r}{3a_0}}$$

$$R_{31}(r) = \frac{4\sqrt{2}}{3(3a_0)^{3/2}} \frac{r}{3a_0} \left(1 - \frac{1}{2}\frac{r}{3a_0}\right) e^{-\frac{r}{3a_0}}$$

$$R_{32}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{5}(3a_0)^{3/2}} \left(\frac{r}{3a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} .$$
(B.65)

Zusammenfassend halten wir fest, dass die normierten Wellenfunktionen der stationären Zustände von Wasserstoff nach (B.3), mit (B.30) (bzw. (B.31)) und (B.65) gegeben sind durch

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta,\phi) = \epsilon_m \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} R_{nl}(r) P_{l|m|}(\cos\theta) e^{im\phi}$$
(B.66)

wobei die Quantenzahlen n, l, m die Werte annehmen

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm l \quad .$$
(B.67)

Die Energie
eigenwerte (B.57) sind (mit Ausnahme des Grundzustandes
 n = 1) entartet. Die Entartung betrifft im Allgemeinen die Quantenzahlen l und
 m. Für jeden Wert l gibt es nach (B.67) (2l + 1) mögliche m-Werte. Der
 Entartungsgrad der Energie E_n ist also

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad . \tag{B.68}$$

Wir sagen: Die Energie E_n ist für $n \neq 1$ n^2 -fach entartet. (Man spricht auch von der "(2l + 1)-fachen Entartung der *l*-Zustände".)

C Der Zustandsvektor

Das Konzept des Zustandsvektors ist die abstrakt-mathematische Darstellung des reinen Zustandes (Abschn. 3.3.3) eines quantenphysikalischen Systems.

Um dieses Konzept zu finden, fassen wir die im Kap. 3 entwickelten fundamentalen Eigenschaften der Quantenamplituden nochmals zusammen.

Das Superpositionsprinzip der Quantenamplituden (3.64) lautet

$$\langle v|w\rangle = \sum_{n} \langle v|u_n\rangle \langle u_n|w\rangle$$
 . (C.1)

Darin bedeutet w ein beliebiger (reiner) Zustand des Systems (Abschn. 3.3.3); u_n sind die Zustände einer vollständigen Basis, die immer Eigenzustände einer bestimmten physikalischen Größe sind, und v ist der Messzustand d. h. Eigenzustand einer zu messenden physikalischen Größe. Die Orthogonalitätsrelation für Quantenamplituden (3.100) ist

$$\langle u_n | u_{n'} \rangle = \delta_{nn'} \quad . \tag{C.2}$$

Wir suchen eine allgemeine Charakterisierung des beliebigen Zustandes w – unabhängig vom Messzustand v. Deshalb schreiben wir (C.1) in der Form

$$\langle |w\rangle = \sum_{n} \langle |u_n\rangle \langle u_n|w\rangle$$
, (C.3)

wobei v weggelassen ist, oder symbolisch

$$|w\rangle = \sum_{n} |u_n\rangle\langle u_n|w\rangle \tag{C.4}$$

Die Struktur von (C.4) erinnert an die Darstellung eines beliebigen *Einheits*vektors **a** durch Einheitsvektoren \mathbf{e}_n einer orthogonalen Basis in der Linearen Algebra,

$$\mathbf{a} = \sum_{n} \mathbf{e}_{n} a_{n} \quad , \tag{C.5}$$

wobei $a_n = \mathbf{a} \cdot \mathbf{e}_n$ die Komponenten des Vektors \mathbf{a} sind und

$$\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{e}_{n'} = \delta_{nn'} \quad . \tag{C.6}$$

Der Vergleich von (C.4) mit (C.5) und (C.2) mit (C.6) liefert folgende Interpretation des allgemeinen Zustandes und der Quantenamplitude:

412 C Der Zustandsvektor

Der allgemeine (reine) Zustand w eines quantenphysikalischen Systems wird durch den **Zustandsvektor** $|\mathbf{w}\rangle$ (Einheitsvektor) dargestellt. Die Quantenamplitude $\langle u_n | w \rangle$ entspricht dem **Skalarprodukt** ("Richtungskosinus") des Zustandsvektors mit dem Einheitsvektor des Basiszustandes u_n .

Zur Erinnerung: Die Quantenamplituden sind im Allgemeinen komplexe Zahlen.

Die Gleichung (C.4) gilt für diskrete (im Allgemeinen unendlich viele) Basiszustände, beispielsweise für die Eigenzustände der Energie. Das Konzept des Zustandsvektors gilt sehr allgemein und kann auch für Basiszustande mit *kontinuierlichen* Eigenwerten formuliert werden¹, etwa für die Basiszustände des Ortes und des Impulses, deren Wellenfunktionen formal nicht normierbar sind.

Das zeitabhängige Verhalten eines Quantons im beliebigen (zeitunabhängigen) Potential (Abschn. 4.1) wird durch den zeitabhängigen Zustandsvektor $|\mathbf{w}(\mathbf{t})\rangle$ beschrieben. Aus (4.65) folgt

$$|w(t)\rangle = \sum_{E} |u_E\rangle \langle u_E | w(0) \rangle e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$
(C.7)

Die Quantenamplituden $\langle u_E | w(0) \rangle$ sind das Skalarprodukt zwischen dem Zustandsvektor des Systems z. Zt. t = 0 und den Vektoren $|u_E\rangle$ der Eigenzustände der Energie. Die Projektionswahrscheinlichkeit zwischen dem allgemeinen Zustand w(t) des Quantons und dem Messzustand v ist gleich dem Betragsquadrat des Skalarprodukts zwischen dem Zustandsvektor $|w(t)\rangle$ und dem Vektor $|v\rangle$ des Messzustandes:

$$P(v \leftarrow w(t)) = |\langle v|w(t)\rangle|^2$$
(C.8)

¹ Siehe z. B. A. Messiah, Quantenmechanik Bd. 1, Walter de Gruyter (1991).

D Schrödinger-Gleichung des Zwei-Quanton-Systems

Das Ziel ist es, eine partielle Differentialgleichung für die (örtliche) zeitabhängige Wellenfunktion¹ $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ eines Zwei-Quanton-Systems, bestehend aus nicht-relativistischen Quantonen mit **Spin Null**, zu finden (analog zur Schrödinger-Wellengleichung für Ein-Quanton-Systeme (*Kap. 5*)). Dabei beschränken wir uns auf Systeme, die aus zwei **verschiedenen** Quantonen bestehen.

Zunächst vereinfachen wir das Problem, indem wir die Wechselwirkung zwischen den beiden Quantonen vernachlässigen. Jedes der beiden Quantonen 1 und 2 soll sich unter dem Einfluss eines (im Allgemeinen verschiedenen) äußeren, zeitunabhängigen Potentials $U^{(1)}(\mathbf{r}_1)$ bzw. $U^{(2)}(\mathbf{r}_2)$ befinden. Bei abwesender Wechselwirkung genügt jedes Quanton – unabhängig vom anderen – einer Schrödinger-Wellengleichung (5.72). Für Quanton 1 lautet die Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi^{(1)}(\mathbf{r}_1, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta^{(1)} \Psi^{(1)}(\mathbf{r}_1, t) + U^{(1)}(\mathbf{r}_1) \Psi^{(1)}(\mathbf{r}_1, t) \quad , \qquad (D.1)$$

wobei $\Psi^{(1)}(\mathbf{r},t)$ die (zeitabhängige) Einteilchen-Wellenfunktion ist und m_1 die Masse von Quanton 1. Entsprechend genügt die Wellenfunktion $\Psi^{(2)}(\mathbf{r},t)$ von Quanton 2 der Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi^{(2)}(\mathbf{r}_2, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_2} \,\Delta^{(2)} \Psi^{(2)}(\mathbf{r}_2, t) + U^{(2)}(\mathbf{r}_2) \Psi^{(2)}(\mathbf{r}_2, t) \quad . \tag{D.2}$$

Wir multiplizieren (D.1) mit $\Psi^{(2)}(\mathbf{r}_2, t)$, (D.2) mit $\Psi^{(1)}(\mathbf{r}_1, t)$, addieren die beiden Gleichungen und erhalten

$$i\hbar \left[\frac{\partial \Psi^{(1)}}{\partial t} \Psi^{(2)} + \frac{\partial \Psi^{(2)}}{\partial t} \Psi^{(1)} \right]$$
(D.3)

$$= -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m_1} \left(\varDelta^{(1)} \Psi^{(1)} \right) \Psi^{(2)} + \frac{1}{m_2} \left(\varDelta^{(2)} \Psi^{(2)} \right) \Psi^{(1)} \right] + \left(U^{(1)} + U^{(2)} \right) \Psi^{(1)} \Psi^{(2)} \quad .$$

Diese Gleichung können wir schreiben als Differentialgleichung für das Produkt der Wellenfunktionen:

¹ Darin ist $\mathbf{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ die Position von Quanton **1** und $\mathbf{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$ die Position von Quanton **2**.

414 D Schrödinger-Gleichung des Zwei-Quanton-Systems

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\Psi^{(1)} \Psi^{(2)} \right)$$

= $-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\Delta^{(1)}}{m_1} + \frac{\Delta^{(2)}}{m_2} \right) \left(\Psi^{(1)} \Psi^{(2)} \right) + \left(U^{(1)} + U^{(2)} \right) \Psi^{(1)} \Psi^{(2)}$ (D.4)

 oder

$$\underbrace{\frac{i\hbar}{\partial t}\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2},t)}{=-\frac{\hbar^{2}}{2}\left(\frac{\Delta^{(1)}}{m_{1}}+\frac{\Delta^{(2)}}{m_{2}}\right)\Psi(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2},t)+\left(U^{(1)}+U^{(2)}\right)\Psi(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2},t)} \quad (D.5)$$

wobei

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \equiv \Psi^{(1)}(\mathbf{r}_1, t) \Psi^{(2)}(\mathbf{r}_2, t)$$
 . (D.6)

Die Funktion (D.6) interpretieren wir als die *Wellenfunktion des Gesamtsystems*, denn die entsprechende Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|^2 = |\Psi^{(1)}(\mathbf{r}_1, t)|^2 \cdot |\Psi^{(2)}(\mathbf{r}_2, t)|^2$$
(D.7)

ist gleich dem Produkt der Wahrscheinlichkeitsdichten der beiden Ein-Quanton-Systeme. Die Teilsysteme sind also unabhängig voneinander – genau was wir erwarten für ein System ohne Wechselwirkung zwischen den Quantonen. Somit ist (D.5) – für den Fall des vereinfachten Problems – die gesuchte Differentialgleichung.

Sind die Quantonen ${\bf 1}$ und ${\bf 2}$ je in einem stationären Zustand, dann haben die Wellenfunktionen der Teilsysteme die Form

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E^{(1)}t} \psi^{(1)}(\mathbf{r}_1) \quad ; \quad \psi^{(2)}(\mathbf{r}_2, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E^{(2)}t} \psi^{(2)}(\mathbf{r}_2) \quad , \quad (D.8)$$

wobei $\psi^{(i)}$ die ortsabhängigen Wellenfunktionen sind und $E^{(i)}$ die entsprechenden Energien. Aus (D.8) folgt mit (D.6) für die Wellenfunktion des Gesamtsystems

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \left(E^{(1)} + E^{(2)} \right) t} \psi^{(1)}(\mathbf{r}_1) \psi^{(2)}(\mathbf{r}_2) \quad . \tag{D.9}$$

Das Gesamtsystem ist (wie erwartet) auch stationär und

$$E = E^{(1)} + E^{(2)} \tag{D.10}$$

ist seine Energie.

Nun verallgemeinern wir das vereinfachte Problem, indem wir zulassen, dass das (zeitunabhängige) Potential in beliebiger Weise von den sechs Variablen $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ abhängig sein kann. Die potentielle Energie des Gesamtsystems ist dann

$$U = U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad . \tag{D.11}$$

Im vereinfachten Problem zerfällt U in eine Summe:

D Schrödinger-Gleichung des Zwei-Quanton-Systems 415

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \to U^{(1)}(\mathbf{r}_1) + U^{(2)}(\mathbf{r}_2)$$
 . (D.12)

Es ist deshalb naheliegend, zu postulieren, dass die verallgemeinerte Differentialgleichung aus (D.5) hervorgeht durch die Ersetzung

$$U^{(1)}(\mathbf{r}_1) + U^{(2)}(\mathbf{r}_2) \to U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$
 . (D.13)

Damit ist die gesuchte partielle Differentialgleichung für die Wellenfunktion des Zwei-Quanton-Systems

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\Delta^{(1)}}{m_1} + \frac{\Delta^{(2)}}{m_2}\right) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) + U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$$
(D.14)

Dies ist die Schrödinger-Gleichung des Zwei-Quanton-Systems. Die zahlreichen Anwendungen der Schrödinger-Gleichung auf konkrete Zwei-Quanton-Systeme (und der Vergleich der Resultate mit den Experimenten) zeigt, dass (D.14) die korrekte Grundgleichung ist. Eine tiefere theoretische Begründung der Schrödinger-Gleichung findet man im Anhang E.

Für eine wichtige Klasse von Zwei-Quanton-Problemen hängt die potentielle Energie U nur ab von der *Differenz* der Ortskoordinaten \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 , also

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad . \tag{D.15}$$

(Bespiele dafür sind im Abschn. 7.1.4 behandelt.) In diesem Fall führt die Einführung geeigneter neuer Variablen zu einer wesentlichen Vereinfachung der Schrödinger-Gleichung (D.14). Wir führen die Relativkoordinaten

$$\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \qquad (\mathbf{r} = (x, y, z)) \tag{D.16}$$

und die Schwerpunktskoordinaten ein:

$$\mathbf{R} \equiv \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{M}$$
 ($\mathbf{R} = (X, Y, Z)$) , (D.17)

wobei $M = m_1 + m_2$ die Gesamtmasse des Systems ist. Wir denken uns Ψ in (D.14) als Funktion von **r** und **R** ausgedrückt und wollen die Differentialoperatoren $\Delta^{(1)}$, $\Delta^{(2)}$ durch solche bezüglich **r** und **R** darstellen. Aus (D.16) und (D.17) folgt

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial X} \frac{m_1}{M} \quad ; \quad \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial X^2} \frac{m_1^2}{M^2} \quad , \tag{D.18}$$

und daraus

$$\Delta^{(1)} = \Delta^{(r)} + \frac{m_1^2}{M^2} \Delta^{(R)} \quad . \tag{D.19}$$

Analog ist

$$\Delta^{(2)} = \Delta^{(r)} + \frac{m_2^2}{M^2} \Delta^{(R)} \quad . \tag{D.20}$$

Aus (D.19) und (D.20) erhalten wir

$$\frac{\Delta^{(1)}}{m_1} + \frac{\Delta^{(2)}}{m_2} = \frac{\Delta^{(r)}}{\mu} + \frac{\Delta^{(R)}}{M} \quad , \tag{D.21}$$

wobei

$$\mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \tag{D.22}$$

die reduzierte Masse des Systems ist. Mit (D.15) und (D.21) lässt sich (D.14) schreiben als

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},\mathbf{R},t) = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\Delta^{(r)}}{\mu} + \frac{\Delta^{(R)}}{M}\right) \Psi(\mathbf{r},\mathbf{R},t) + U(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r},\mathbf{R},t) \quad .$$
(D.23)

Wir versuchen, die Gleichung (D.23) durch den Produktansatz

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t) = \phi(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{R}) f(t) \quad , \tag{D.24}$$

zu lösen. Einsetzen von (D.24) in (D.23) und dividieren der Gleichung durch das Produkt (D.24) ergibt

$$\frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{\Delta^{(r)}\phi}{\mu\phi} + \frac{\Delta^{(R)}\Phi}{M\Phi}\right) + U \quad . \tag{D.25}$$

Die linke Seite von (D.25) hängt nur von t ab, die rechte Seite nur von den Ortsvariablen. Beide Seiten sind deshalb gleich einer gemeinsamen Konstanten, die wir E nennen. Die Gleichung

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{df(t)}{dt} = E \tag{D.26}$$

hat die Lösung

$$f(t) = C e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad , \tag{D.27}$$

wobe
i ${\cal C}$ eine beliebige Konstante ist. Die Gleichung

$$E = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\Delta^{(r)} \phi(\mathbf{r})}{\mu \phi(\mathbf{r})} + \frac{\Delta^{(R)} \Phi(\mathbf{R})}{M \Phi(\mathbf{R})} \right) + U(\mathbf{r})$$
(D.28)

lässt sich wiederum separieren in

$$E + \frac{\hbar^2}{2} \frac{\Delta^{(R)} \Phi(\mathbf{R})}{M \Phi(\mathbf{R})} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\Delta^{(r)} \phi(\mathbf{r})}{\mu \phi(\mathbf{r})} + U(\mathbf{r}) \quad . \tag{D.29}$$

Die Separationskonstante nennen wir hier $\varepsilon,$ und damit erhält man aus (D.29) die Differentialgleichungen,

$$\varepsilon \phi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta^{(r)} \phi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r})$$
(D.30)

für die Wellenfunktion $\phi(\mathbf{r})$ der Relativkoordinaten und

$$(E - \varepsilon) \Phi(\mathbf{R}) = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta^{(R)} \Phi(\mathbf{R})$$
(D.31)

für die Wellenfunktion $\Phi(\mathbf{R})$ der Schwerpunktskoordinaten.

Dieses Resultat hat folgende Interpretation: Die Gleichung (D.30) beschreibt die *Relativbewegung* der beiden Quantonen, die Gleichung (D.31) die *Schwerpunktsbewegung* des Sytems. Beide Gleichungen haben die Struktur der (ortsabhängigen) Schrödinger-Gleichung *eines* Quantons. Die Relativbewegung ist die effektive Bewegung eines Quantons mit der reduzierten Masse μ im Potential entsprechend dem relativen Abstand **r** der beiden Quantonen. Die Schwerpunktsbewegung ist die effektive Bewegung eines freien Quantons der Gesamtmasse M des Systems. Die Summe der Energien beider Bewegungen entspricht der Gesamtenergie des Systems.

Im Schwerpunktsystem ($\mathbf{R} = 0$) verschwindet der effektive Impuls \mathbf{P} der Schwerpunktsbewegung. Die Wellenfunktion des Impulseigenzustandes (5.3) ist Lösung der Gl. (D.31) mit

$$(E - \varepsilon) = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} \quad . \tag{D.32}$$

Da **P** verschwindet, folgt aus (D.32) $E = \varepsilon$, d. h. die Gesamtenergie des Sytems ist gleich der Energie der Relativbewegung (D.30). Das Zwei-Quanton-System verhält sich also im Schwerpunktsystem wie das Ein-Quanton-System der Masse μ im Potential $U(\mathbf{r})$.

Da die Differentialgleichungen (D.30) und (D.31) linear sind, ist die *allgemeinste Bewegung* des Zwei-Quanton-Systems mit (D.15) die Überlagerung seiner stationären Lösungen

$$\Psi_E(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t) = \phi(\mathbf{r}) \, \Phi(\mathbf{R}) \, e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad . \tag{D.33}$$

In der mathematischen Formulierung der Quantenphysik ist jeder *physikalischen Größe* ein so genannter *Operator* zugeordnet. Wir wollen den Operatorbegriff am Beispiel der Quantenmechanik nicht-relativistischer Quantonen mit Spin Null, die durch die Schrödinger-Wellengleichung beschrieben werden (*Kap. 5*), einführen.

Die zeitabhängige (normierte) Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ als Lösung der Schrödinger-Wellengleichung bestimmt alle Eigenschaften des Quantons. Beispielsweise ist der **Erwartungswert** des Ortes \mathbf{r} (zeitabhängiger Mittelwert)

$$\langle \mathbf{R}(t) \rangle = \int d^3 r \,\overline{\Psi(\mathbf{r},t)} \,\mathbf{r} \,\Psi(\mathbf{r},t) \quad ; \qquad (E.1)$$

die Gleichung (E.1) ist äquivalent zu den drei Gleichungen

$$\langle X \rangle = \int d^3 r \,\overline{\Psi} \, x \,\Psi \quad , \quad \langle Y \rangle = \int d^3 r \,\overline{\Psi} \, y \,\Psi \quad , \quad \langle Z \rangle = \int d^3 r \,\overline{\Psi} \, z \,\Psi \quad .$$
(E.2)

Wir stellen die Frage: Wie groß ist der *Erwartungswert* $\langle \mathbf{P}(t) \rangle$ des *Impulses* (**p**) des Quantons, ausgedrückt durch die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ im Ortsraum? Analog zu (E.1) gilt

$$\langle \mathbf{P}(t) \rangle = \int d^3 p \,\overline{\hat{\Psi}(\mathbf{p},t)} \,\mathbf{p} \,\hat{\Psi}(\mathbf{p},t) \quad , \tag{E.3}$$

wobe
i $\hat{\Psi}(\mathbf{p},t)$ die (normierte) Wellenfunktion im Impulsraum ist, die der Wellenfunktion
 $\Psi(\mathbf{r},t)$ entspricht. Wir drücken $\hat{\Psi}(\mathbf{p},t)$ durch die Fourier-Transformierte

$$\hat{\Psi}(\mathbf{p},t) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3r \, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \,\Psi(\mathbf{r},t) \tag{E.4}$$

aus (die Zeit t ist ein fester Parameter), setzen (E.4) in (E.3) ein und erhalten

$$\langle \mathbf{P}(t) \rangle = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 r' \, e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}'} \overline{\Psi(\mathbf{r}',t)} \int d^3 r \, \mathbf{p} \, e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r},t) \quad .$$
(E.5)

Wir schreiben das dritte Integral in (E.5) mit partieller Integration als

$$\int d^3 r \,\mathbf{p} \, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r},t) = -\int d^3 r \, \frac{\hbar}{i} \, \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}\right) \Psi(\mathbf{r},t)$$
$$= \frac{\hbar}{i} \int d^3 r \, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \, \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r},t) \quad . \tag{E.6}$$

In (E.6) wurde angenommen, dass $\Psi(\mathbf{r}, t)$ genügend rasch abklingt, sodass das Oberflächenintegral am Rand des Gebietes verschwindet. Diese Bedingung ist beispielsweise für gebundene Zustände erfüllt. Wir setzen (E.6) in (E.5) ein und finden

$$\langle \mathbf{P}(t) \rangle = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \cdot \mathbf{p}} \int d^3 r' \,\overline{\Psi(\mathbf{r}', t)} \int d^3 r \, \frac{\hbar}{i} \, \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \, \Psi(\mathbf{r}, t) \quad .$$
(E.7)

Das Integral über p in (E.7) lässt sich durch die dreidimensionale Delta-Funktion ausdrücken¹:

$$\int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\cdot\mathbf{p}} = \delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r}) \quad . \tag{E.8}$$

Mit (E.8) folgt aus (E.7)

$$\langle \mathbf{P}(t) \rangle = \int d^3 r \,\overline{\Psi(\mathbf{r},t)} \,\frac{\hbar}{i} \,\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \,\Psi(\mathbf{r},t) \quad .$$
 (E.9)

Wir definieren einen Differentialoperator,

$$\vec{\mathbf{P}}_{\mathrm{op}} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \quad ,$$
 (E.10)

und schreiben das Resultat (E.9) als

$$\langle \mathbf{P}(t) \rangle = \int d^3 r \,\overline{\Psi(\mathbf{r},t)} \,\overrightarrow{\mathbf{P}}_{\mathrm{op}} \,\Psi(\mathbf{r},t) \quad .$$
 (E.11)

Die Gleichung (E.11) hat die Struktur von (E.1) und ist äquivalent zu den drei Relationen

$$\langle P_x \rangle = \int d^3 r \,\overline{\Psi} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi \quad , \quad \langle P_y \rangle = \int d^3 r \,\overline{\Psi} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi \quad , \\ \langle P_z \rangle = \int d^3 r \,\overline{\Psi} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right) \Psi \quad . (E.12)$$

Der Schlüssel zur Berechnung des Erwartungswerts $\langle \mathbf{P}(t) \rangle$ aus $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ist also der Operator (E.10), der auf die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ wirkt. Wir bezeichnen (E.10) als **Impulsoperator** *im Ortsraum*.

Entsprechend interpretieren wir \mathbf{r} in (E.1) als **Ortsoperator** im Ortsraum (Tabelle E.1).

¹ Siehe z. B. G. Arfken, Mathematical Methods for Physicists, Academic Press (1985), p. 800.

$Physikalische\ Gr{o}\beta e$	Operator
Ort	r
Impuls	$-i\hbarrac{\partial}{\partial {f r}}$
Energie	$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{r}} + U(\mathbf{r})$
Drehimpuls	$-i\hbar {f r} imes {\partial \over \partial {f r}}$

Tabelle E.1. Die Operatoren der physikalischen Größen im Ortsraum.

Der Operator einer physikalischen Größe hat eine besondere Bedeutung im Zusammenhang mit den Eigenzuständen der entsprechenden Größe. Die Wellenfunktion des Impulseigenzustandes mit Eigenwert **p** beispielsweise ist von der Form (5.54)

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t) = A \, e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m}t)} \quad , \tag{E.13}$$

wobei A eine Konstante und m die Masse des Quantons ist. Wir lassen den Operator (E.10) auf $\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)$ wirken und erhalten

$$\dot{\mathbf{P}}_{\mathrm{op}} \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p} \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$$
 (E.14)

Dieses Resultat sagt aus, dass die Wellenfunktion des Impulseigenzustandes die Lösung des Eigenwertproblems des Impulsoperators mit Eigenwert \mathbf{p} ist.

Die Beziehung (E.14) gilt allgemein:

 \rightarrow

$$\boldsymbol{Q}_{\rm op}\boldsymbol{\Psi}_Q(\mathbf{r},t) = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{\Psi}_Q(\mathbf{r},t) \tag{E.15}$$

In Worten:

Die Wellenfunktion des Eigenzustandes einer physikalischen Größe ist die Lösung des Eigenwertproblems des entsprechenden Operators.

Ein bekanntes Beispiel ist die Größe *totale Energie* E des Quantons. Wir kennen die entsprechende Wellenfunktion als Lösung der Schrödinger-Wellengleichung (5.72), die wir als Operatorgleichung schreiben wollen:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{r}} + U(\mathbf{r})\right)\Psi(\mathbf{r},t) \quad . \tag{E.16}$$

Die Wellenfunktion eines Eigenzustandes der Energie E hat nach (5.2), (4.7) und (4.41) die Form

$$\Psi_E(\mathbf{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi_E(\mathbf{r}) \quad . \tag{E.17}$$

Wir setzen (E.17) in (E.16) ein und erhalten

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{r}} + U(\mathbf{r})\right)\Psi_E(\mathbf{r},t) = E\Psi_E(\mathbf{r},t) \quad . \tag{E.18}$$

Der Vergleich von (E.18) mit (E.15) zeigt, dass

$$\boldsymbol{E}_{\rm op} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + U(\mathbf{r})$$
(E.19)

der **Energieoperator** ist. Der Ausdruck (E.19) wird oft auch als *Hamilton-Operator* (H_{op}) bezeichnet, denn er hat die Struktur der Hamilton-Funktion der klassischen Mechanik,

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \quad . \tag{E.20}$$

Der erste Term des Energieoperators entspricht der "kinetischen Energie" des Quantons, denn er geht aus dem ersten Term von (E.20) hervor, in welchem **p** durch den Impulsoperator (E.10) ersetzt wird.

Der **Drehimpulsoperator** schließlich hat ebenfalls die Struktur des klassischen Ausdrucks für den Bahndrehimpuls,

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} \quad . \tag{E.21}$$

Wir ersetzen \mathbf{r} und \mathbf{p} in (E.21) durch den Orts- bzw. Impulsoperator und erhalten

$$\vec{\mathbf{L}}_{\rm op} = -i\hbar\,\mathbf{r} \times \frac{\partial}{\partial\mathbf{r}} \quad . \tag{E.22}$$

Die drei Komponenten von (E.22) sind mit (E.21)

$$\boldsymbol{L}_{xop} = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad , \quad \boldsymbol{L}_{yop} = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad ,$$
$$\boldsymbol{L}_{zop} = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad . \text{ (E.23)}$$

Anhand der bekannten Drehimpulseigenschaften der gebundenen Zustände des Wasserstoffatoms (Abschn. 5.2.7, Anhang B) wollen wir die Richtigkeit des Ausdrucks (E.22) überprüfen. Zu dem Zweck müssen wir L_{zop} (E.23) in Kugelkoordinaten,

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad , \quad \theta = \arccos\left(\frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}\right) \quad , \quad \phi = \operatorname{arc} \operatorname{tg}\left(\frac{y}{x}\right) \quad , \quad (E.24)$$

ausdrücken. Die Ableitungen in L_{zop} können wir schreiben als

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \phi} \quad , \quad \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \phi} \quad .$$
(E.25)

Aus (E.25) folgt mit (E.23)

$$\boldsymbol{L}_{zop} = -i\hbar \left\{ \left(x \frac{\partial r}{\partial y} - y \frac{\partial r}{\partial x} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \left(x \frac{\partial \theta}{\partial y} - y \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \frac{\partial}{\partial \theta} + \left(x \frac{\partial \phi}{\partial y} - y \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \frac{\partial}{\partial \phi} \right\} \quad .$$
(E.26)

Aus (E.24) erhalten wir durch Differentiation (verifiziere!)

$$\left(x\frac{\partial r}{\partial y} - y\frac{\partial r}{\partial x}\right) = \left(x\frac{\partial \theta}{\partial y} - y\frac{\partial \theta}{\partial x}\right) = 0 \quad , \quad \left(x\frac{\partial \phi}{\partial y} - y\frac{\partial \phi}{\partial x}\right) = 1 \qquad (E.27)$$

und damit hat die z-Komponente des Drehimpulsoperators die einfache Struktur

$$L_{zop} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$
 . (E.28)

Wir lassen (E.28) auf die Wellenfunktionen $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ (B.66) der gebundenen Zustände des Wasserstoffatoms wirken und erhalten die Relation

$$\boldsymbol{L}_{zop}\left[R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\phi)\right] = m\hbar\left[R_{nl}(r)\,Y_{ml}(\theta,\phi)\right] \quad . \tag{E.29}$$

Der Eigenwert des Operators L_{zop} entspricht somit dem bekannten Resultat $L_z = m\hbar$. Der Operator (E.28) ist also im Einklang mit der allgemeinen Beziehung (E.15).

Eine entspechende Relation gilt auch für das Betragsquadrat des Drehimpulses,

$$\overset{\rightarrow^2}{\mathbf{L}_{\rm op}} = \boldsymbol{L}_{x \rm op}^2 + \boldsymbol{L}_{y \rm op}^2 + \boldsymbol{L}_{z \rm op}^2 \quad . \tag{E.30}$$

Man findet

$$\overset{\rightarrow}{\mathbf{L}}_{\rm op}^2 \left[R_{nl}(r) \, Y_{lm}(\theta, \phi) \right] = l \, (l+1) \hbar^2 \left[R_{nl}(r) \, Y_{lm}(\theta, \phi) \right] \quad . \tag{E.31}$$

Der Eigenwert von $\overrightarrow{\mathbf{L}}_{op}^2$ ist $l(l+1)\hbar^2$, wie wir aufgrund der Drehimpulseigenschaften der Zustände des Wasserstoffatoms erwarten.

Die Relationen (E.29) und (E.31) weisen darauf hin, dass der aus dem klassischen Ausdruck (E.21) gewonnene Operator (E.22) der physikalisch korrekte Drehimpulsoperator ist.

Eine wichtige allgemeine Frage der Quantenphysik lautet: Unter welchen Bedingungen existieren Zustände eines quantenphysikalischen Systems, die gleichzeitig Eigenzustände zweier oder mehrerer physikalischer Größen sind? Wir können diese Bedingungen als Eigenschaften der entsprechenden Operatoren formulieren – unabhängig vom System!

Wir betrachten einen Zustand, der gleichzeitig Eigenzustand irgendwelcher physikalischer Größen P und Q ist; die entsprechende Wellenfunktion sei $\Psi(\mathbf{r}, t)$. Dann gilt mit (E.15) einerseits

$$\boldsymbol{P}_{\rm op}\boldsymbol{\Psi}(\mathbf{r},t) = P\boldsymbol{\Psi}(\mathbf{r},t) \tag{E.32}$$

und andererseits

$$\boldsymbol{Q}_{\rm op}\boldsymbol{\Psi}(\mathbf{r},t) = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{\Psi}(\mathbf{r},t) \quad , \tag{E.33}$$

wobei P und Q die Eigenwerte der beiden physikalischen Größen für den betrachteten Zustand sind. Nun lassen wir $Q_{\rm op}$ auf beide Seiten von (E.32) einwirken und $P_{\rm op}$ auf beide Seiten von (E.33) und erhalten damit

$$\boldsymbol{Q}_{\rm op}\boldsymbol{P}_{\rm op}\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{Q}_{\rm op}(P\,\boldsymbol{\Psi}) = P\,\boldsymbol{Q}_{\rm op}\boldsymbol{\Psi} = PQ\,\boldsymbol{\Psi} \tag{E.34}$$

bzw.

$$\boldsymbol{P}_{\rm op}\boldsymbol{Q}_{\rm op}\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{P}_{\rm op}(\boldsymbol{Q}\boldsymbol{\Psi}) = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{P}_{\rm op}\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Psi} \quad . \tag{E.35}$$

Wir bilden die Differenz der Gleichungen (E.35) und (E.34) und finden

$$[\boldsymbol{P}_{\rm op}\boldsymbol{Q}_{\rm op} - \boldsymbol{Q}_{\rm op}\boldsymbol{P}_{\rm op}]\boldsymbol{\Psi} = (\boldsymbol{Q}\boldsymbol{P} - \boldsymbol{P}\boldsymbol{Q})\boldsymbol{\Psi} = 0 \quad , \tag{E.36}$$

denn die Eigenwerte P und Q sind *reelle Zahlen* (mit den Dimensionen der entsprechenden physikalischen Größen).

Aus (E.36) folgt: Damit Zustände existieren, die gleichzeitig Eigenzustände physikalischer Größen P und Q sind, müssen die entsprechenden Operatoren *vertauschbar* sein, d. h. die Kombination (E.36) muss identisch verschwinden:

$$[\boldsymbol{P}_{\rm op}\boldsymbol{Q}_{\rm op} - \boldsymbol{Q}_{\rm op}\boldsymbol{P}_{\rm op}] \equiv 0 \tag{E.37}$$

oder

$$\boldsymbol{P}_{\mathrm{op}}\boldsymbol{Q}_{\mathrm{op}}\equiv\boldsymbol{Q}_{\mathrm{op}}\boldsymbol{P}_{\mathrm{op}}$$
 . (E.38)

Die Größe (E.37) wird als *Kommutator* der beiden Operatoren bezeichnet. Das allgemeine Resultat lautet somit folgendermaßen:

Damit Zustände existieren, die gleichzeitig Eigenzustände mehrerer physikalischer Größen sind, müssen die Kommutatoren der Paare aller entsprechenden Operatoren (identisch) verschwinden.

Als Beispiel erinnern wir uns an die gebundenen, stationären Zustände des Wasserstoffatoms. Man kann zeigen, dass die Kommutatoren von je zwei der folgenden drei Operatoren verschwinden: Energieoperator E_{op} , Operator einer beliebigen Komponente des Drehimpulses ($L_{x_i op}$) und Operator des Betragsquadrats $\overrightarrow{\mathbf{L}}_{op}^2$ des Drehimpulses. Deshalb gibt es Zustände, die gleichzeitig Eigenzustände der drei physikalischen Größen sind (konventionell wählt man die z-Komponente L_z). Diese Aussage ist auch richtig für ein beliebiges, nur von r abhängiges Potential (siehe Anhang B). Die Umkehrung der obigen Aussage lautet:

Falls der Kommutator der Operatoren zweier physikalischer Größen nicht verschwindet, dann existieren im Allgemeinen keine Zustände, die gleichzeitig Eigenzustände beider Größen sind. Wir illustrieren diese Gesetzmäßigkeit am wichtigen Beispiel der Ortskoordinate X und der Impulskoordinate P_x . Dazu lassen wir die entsprechenden Operatoren (Tabelle E.1) nacheinander auf die Wellenfunktion Ψ eines beliebigen Zustandes wirken und erhalten

$$\begin{aligned} \boldsymbol{X}_{\rm op} \boldsymbol{P}_{x \rm op} \boldsymbol{\Psi} &= -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \boldsymbol{\Psi} = -i\hbar x \frac{\partial \boldsymbol{\Psi}}{\partial x} \\ \boldsymbol{P}_{x \rm op} \boldsymbol{X}_{\rm op} \boldsymbol{\Psi} &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} x \boldsymbol{\Psi} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x \boldsymbol{\Psi}) = -i\hbar \left(\boldsymbol{\Psi} + x \frac{\partial \boldsymbol{\Psi}}{\partial x} \right) \quad . \text{ (E.39)} \end{aligned}$$

Aus der Differenz der beiden Ausdrücke (E.39) folgt

$$[\boldsymbol{X}_{\rm op}\boldsymbol{P}_{\rm xop} - \boldsymbol{P}_{\rm xop}\boldsymbol{X}_{\rm op}] = i\hbar \quad . \tag{E.40}$$

Der Kommutator der beiden Operatoren verschwindet also *nicht*. Diese Eigenschaft liefert die Begründung für die *Heisenbergsche Ungleichung im Impuls und Ort* (Abschn. 2.3.3), in der Sprache der Operatoren!

Ein weiteres Beispiel sind die Operatoren von je zwei Komponenten des Drehimpulses, z. B. L_{xop} und L_{yop} . Wir erhalten mit (E.23) einerseits

$$\boldsymbol{L}_{xop}\boldsymbol{L}_{yop}\boldsymbol{\Psi} = -\hbar^2 \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(z \frac{\partial \boldsymbol{\Psi}}{\partial x} - x \frac{\partial \boldsymbol{\Psi}}{\partial z} \right)$$
$$= -\hbar^2 \left(y \frac{\partial \boldsymbol{\Psi}}{\partial x} + yz \frac{\partial^2 \boldsymbol{\Psi}}{\partial x \partial z} - yx \frac{\partial^2 \boldsymbol{\Psi}}{\partial z^2} - z^2 \frac{\partial^2 \boldsymbol{\Psi}}{\partial x \partial y} + zx \frac{\partial^2 \boldsymbol{\Psi}}{\partial z \partial y} \right) \quad , \quad (E.41)$$

und andererseits

$$\boldsymbol{L}_{yop}\boldsymbol{L}_{xop}\boldsymbol{\Psi} = -\hbar^2 \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(y \frac{\partial \boldsymbol{\Psi}}{\partial z} - z \frac{\partial \boldsymbol{\Psi}}{\partial y} \right)$$
$$= -\hbar^2 \left(zy \frac{\partial^2 \boldsymbol{\Psi}}{\partial z \partial x} - z^2 \frac{\partial^2 \boldsymbol{\Psi}}{\partial y \partial x} - xy \frac{\partial^2 \boldsymbol{\Psi}}{\partial z^2} + x \frac{\partial \boldsymbol{\Psi}}{\partial y} + xz \frac{\partial^2 \boldsymbol{\Psi}}{\partial y \partial z} \right) \quad . \quad (E.42)$$

Aus der Differenz von (E.41) und (E.42) folgt für den Kommutator

$$\left[\boldsymbol{L}_{x \text{op}} \boldsymbol{L}_{y \text{op}} - \boldsymbol{L}_{y \text{op}} \boldsymbol{L}_{x \text{op}}\right] = \hbar^2 \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}\right) = i\hbar \boldsymbol{L}_{z \text{op}} \quad . \tag{E.43}$$

Die Operatoren L_{xop} , L_{yop} (oder Operatoren irgend eines Paares von Komponenten des Drehimpulses) sind *nicht* vertauschbar. Somit existieren im Allgemeinen keine Zustände, die gleichzeitig Eigenzustände zweier Komponenten des Drehimpulses sind. Diese Aussage entspricht genau dem <u>2. Satz</u> der Drehimpulseigenschaften (Abschn. 2.3.4).

Abschließend weisen wir darauf hin, dass die *Schrödinger-Wellengleichung* (E.16) ein Spezialfall einer **allgemeinen Schrödinger-Gleichung** darstellt. Die Bewegungsgleichung eines Systems von beliebig vielen Quantonen lässt sich allgemein schreiben als
426 E Die Operatoren der Quantenmechanik

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \boldsymbol{H}_{\rm op}\Psi \tag{E.44}$$

Hier ist H_{op} der Hamilton-Operator, der aus der Hamilton-Funktion der klassischen Physik hervorgeht: Die Variablen werden durch die entsprechenden Operatoren ersetzt. Die zeitabhängige Wellenfunktion Ψ des Gesamtsystems hängt im Allgemeinen von den Orts- und Spinvariablen der Quantonen ab. Das einfachste Beispiel einer Verallgemeinerung der Wellengleichung (E.16) ist die Schrödinger-Gleichung des Zwei-Quanton-Systems (D.14). Der erste Term auf der rechten Seite der Gleichung entspricht der kinetischen Energie der beiden Quantonen, und der zweite Term der potentiellen Energie.

F Einheiten und physikalische Konstanten

F.1 Das SI-System

Zur Kommunikation, Überprüfung and Anwendung physikalischen Wissens ist ein *universelles System von Einheiten* der physikalischen Größen unumgänglich. Das SI-System der Einheiten ("Système International d'Unités") hat sich weltweit etabliert.

Die zentrale Frage für das Einheitensystem (auch Maßsystem genannt) lautet: Wie viele unabhängige konventionelle Festlegungen sind erforderlich, um die Einheiten aller physikalischen Größen eindeutig zu bestimmen? Dabei sind die Relationen zwischen den physikalischen Größen durch die etablierten physikalischen Gesetzte und Definitionen festgeschrieben. Wir schließen hier die gesamte Physik (klassische Physik, Relativitätstheorie und Quantenphysik) ein¹. Anhand der Festlegungen des SI-Systems werden wir sehen, dass fünf Festlegungen erforderlich sind. Eine konventionelle Festlegung kann dadurch erfolgen, dass wir direkt eine Realisation einer physikalischen Größe verwenden, oder aber eine physikalische Realisation, zusammen mit einem etablierten Gesetz bzw. einer Definition heranziehen².

Im Folgenden erinnern wir an die fünf unabhängigen konventionellen Festlegungen, auf denen das SI-Sytems beruht. Sie beziehen sich auf die Einheiten der Größen Masse, Zeit, Länge, elektrischer Strom und thermodynamische Temperatur. Die entsprechenden Einheiten werden als *Basiseinheiten* des SI-Systems bezeichnet.

Die Masseneinheit *Kilogramm* (kg) ist definiert als die Masse des im "Bureau Internationale des Poids et Mesures" in Sèvres bei Paris aufbewahrten Urkilogramms aus Platiniridium.

Zur Realisierung der Zeiteinheit dient der (monochromatische) Strahlungsübergang zwischen den beiden Hyperfeinstrukturniveaus im Grundzustand des Cäsiumatoms. Die Zeiteinheit *Sekunde* (s) ist die Zeit von 9 192 631 770 Schwingungen der Strahlung des Hfs-Übergangs im Cs-Atom.

¹ In diesem Zusammenhang müssen wir die Zeit als eine (messbare) physikalische Größe betrachten.

² U. Feller, A constructional approach to the International System of Units (SI) (May, 1997), Swiss Federal Office of Metrology and Accreditation (METAS), CH-3003 Bern-Wabern.

428 F Einheiten und physikalische Konstanten

Zur Definition der Längeneinheit verwendet man die Realisierung der Lichtemission im Vakuum, zusammen mit der Definition der Geschwindigkeit

$$c = \frac{\Delta L}{\Delta t} \quad , \tag{F.1}$$

wobei ΔL die in der Zeit Δt zurückgelegte Wegstrecke des Lichtes ist. Die Längeneinheit *Meter* (m) ist definiert als der 299 792 458-te Teil der Wegstrecke, die das Licht in 1 Sekunde im Vakuum zurücklegt. Diese Definition der Längeneinheit bedeutet, dass die *Lichtgeschwindigkeit* auf

$$c = 2.997\ 924\ 58 \times 10^8 \,\mathrm{m/s} \tag{F.2}$$

durch Konvention festgelegt wird (F.6).

Mit den drei Definitionen der Einheiten für Masse, Zeit und Länge sind die Einheiten aller mechanischen Größen durch etablierte physikalische Gesetze und Definitionen festgelegt. Das Newtonsche Bewegungsgesetz beispielsweise legt die Krafteinheit fest: Die Krafteinheit Newton (N) ist die Kraft, die einer Masse von 1 kg die Beschleunigung 1 m s^{-2} erteilt. Damit sind u. a. die Einheiten der Größen im Gravitationsgesetz festgelegt; die Proportionalitätskonstante G (Gravitationskonstante) ist somit eine – experimentell zu bestimmende – physikalische Konstante (F.6).

Für die Elektrodynamik braucht es im SI-System eine zusätzliche, konventionell festgelegte Einheit. Die entsprechende Größe ist der elektrische Strom I. Die Einheit des Stroms ist definiert mit Hilfe des Kraftgesetzes zwischen zwei parallelen, geradlinigen, unendlich langen Leitern (kreisförmiger, vernachlässigbar kleiner Querschnitt) [KP-2-10.5]. Die Einheit Ampère (A) ist der Strom, der auf einer Leiterlänge von 1 m die Kraft 2×10^{-7} N erzeugt, falls der Leiterabstand 1 m beträgt. Diese Definition bedeutet, dass wir die magnetische Feldkonstante μ_0 konventionell auf

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \,\mathrm{N} \,\mathrm{A}^{-2} \tag{F.3}$$

festsetzen. Wegen der Relation

$$c^2 = \frac{1}{\mu_0 \,\varepsilon_0} \tag{F.4}$$

und (F.2) ist damit auch die *elektrische Feldkonstante* ε_0 festgelegt (F.6). Das Coulombsche Gesetz definiert dann die Einheit *Coulomb* (C) der elektrischen Ladung, in Übereinstimmung mit

$$I = \frac{\Delta Q}{\Delta t} \quad , \tag{F.5}$$

wobei ΔQ die in der Zeit Δt durch den Querschnitt geflossene Ladung ist.

Auch die Wärmelehre braucht eine zusätzliche konventionelle Festlegung. Man wählt als Größe die thermodynamische Temperatur T. Die Einheit ist definiert mit Hilfe des Gasthermometers; die thermodynamische Temperatur ist proportional zum Volumen des idealen Gases bei konstantem Druck. Die Einheit *Kelvin* (K) ist der 273.16-te Teil der Temperatur des Tripelpunkts von Wasser [KP-2-13.5].

Zur Charakterisierung der **Vielteilchensysteme** der Materie sind grundsätzlich keine weiteren unabhängigen Festlegungen notwendig. Man kann die *Stoffmenge* eines Systems identischer Teilchen im Prinzip durch Abzählen ermitteln. Da die Teilchenzahl makroskopischer Systeme aber so enorm groß ist, muss man sich in der Praxis meistens mit einer approximativen Bestimmung der Teilchenzahl durch Wägen, d. h. mittels einer Massenbestimmung, begnügen. Die entsprechende Einheit der Stoffmenge ist folgendermaßen definiert. Die Einheit *Mol* (mol) ist die Stoffmenge, die aus gleich vielen Einzelteilchen (Atomen, Molekülen etc.) besteht, wie Atome in 12 g Kohlenstoff (Atomkern ${}^{12}_{6}$ C) enthalten sind. Die Anzahl der Atome in 12 g Kohlenstoff wird als *Avogadro-Zahl* N_A bezeichnet (F.6).

Die Masse eines atomaren Vielteilchensytems wird in *atomaren Massen*einheiten (u) gemessen. Diese Einheit ist definiert als 1/12 der Masse des 12 C-Atoms (F.6).

Die Einheitenfestlegung im SI-System beruht auf einem mechanistischen Naturverständnis, das über hundert Jahre zurückreicht. In den letzten Jahrzehnten sind große Anstrengungen unternommen worden, präzise physikalische Realisierungen von Einheiten auszuarbeiten, welche auf Naturkonstanten beruhen. Diese Anstrengungen werden in absehbarer Zeit auch für die letzte mechanistische Einheit, das Kilogramm, zu einer neuen Festlegung führen³.

F.2 Physikalische Konstanten

Wir stellen in (F.6) die wichtigsten Konstanten der klassisch-makroskopischen Physik (in SI-Einheiten) zusammen. Alle numerischen Werte in diesem Anhang sind der statistischen Anpassung der experimentellen Resultate an die Konstanten des SI-Systems von Peter J. Mohr und Barry N. Taylor⁴ entnommen. Die Unsicherheiten der Werte in (F.6) und (F.7) (Zahlen in Klammern) resultieren aus den Unsicherheiten der einzelnen Messungen. Die Unsicherheit von G beispielsweise ist $\Delta G = \pm 0.010 \times 10^{-11} \,\mathrm{N}\,\mathrm{m}^2\,\mathrm{kg}^{-2}$; die Zahl bedeutet eine Standardabweichung (Anhang A).

Vakuumlichtgeschwindigkeit $c = 2.997 \ 924 \ 58 \times 10^8 \ \mathrm{m \, s^{-1}}$ (exakt) Gravitationskonstante $G = 6.673(10) \times 10^{-11} \ \mathrm{N \, m^2 \, kg^{-2}}$

³ J.L. Flowers and B.W. Petley, Rep. Prog. Phys. 64/10 (2001), 1191.

⁴ P.J. Mohr and B.N. Taylor, Physics Today, BG6, August 2000.

430 F Einheiten und physikalische Konstanten

 $\begin{array}{ll} \mbox{Magnetische Feldkonstante} & \mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}\,\mbox{N}\,\mbox{A}^{-2} & (\mbox{exakt}) \\ \mbox{Elektrische Feldkonstante} & \varepsilon_0 = \frac{1}{\mu_0 c^2} = 8.854\ 187\ 817... \times 10^{-12}\,\mbox{F}\,\mbox{m}^{-1} \\ \mbox{Avogadro-Zahl} & N_{\rm A} = 6.022\ 141\ 99(47) \times 10^{23}\,\mbox{mol}^{-1} \\ \mbox{Universelle Gaskonstante} & R = 8.314\ 472(15)\ \mbox{J}\,\mbox{mol}^{-1}\ \mbox{K}^{-1} \\ \mbox{Boltzmann-Konstante} & k = \frac{R}{N_{\rm A}} = 1.380\ 6503(24) \times 10^{-23}\,\mbox{J}\,\mbox{K}^{-1} \\ \mbox{Atomare Masseneinheit} & u = \frac{1}{12}m_{(^{12}{\rm C})} \\ & = 1.660\ 538\ 73(13) \times 10^{-27}\,\mbox{kg} & ({\rm F.6}) \\ \end{array}$

In (F.7) sind die wichtigsten Konstanten der *mikroskopischen* Physik in SI-Einheiten zusammengestellt.

Plancksche Konstante $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054\ 571\ 596(82) \times 10^{-34} \text{Js}$			
Elementarladung $e = 1.602 \ 176 \ 462(63) \times 10^{-19} \mathrm{C}$			
Feinstrukturkonstante $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} = [137.035\ 999\ 76(50)]^{-1}$			
Masse des Elektrons $m_e = 9.109 \ 381 \ 88(72) \times 10^{-31} \text{kg}$			
Rydberg-Energie ⁵ $R_{\infty} = \frac{1}{2}m_ec^2\alpha^2 = 2.179\ 871\ 90(17) \times 10^{-18}\ \mathrm{J}$			
Bohrscher Radius $a_0 = \frac{\hbar}{m_e c \alpha} = 0.529 177 2083(19) \times 10^{-10} \mathrm{m}$			
Masse des Protons $m_p = 1.672\ 621\ 58(13) \times 10^{-27} \mathrm{kg}$			
Masse des Neutrons $m_n = 1.674 \ 927 \ 16(13) \times 10^{-27} \ \text{kg}$			
Masse des Müons $m_{\mu} = 1.883~531~09(16) \times 10^{-28} \mathrm{kg}$			
Bohrsches Magneton $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.274\ 008\ 99(37) \times 10^{-24}\mathrm{Am^2}$			
Kernmagneton $\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} = 5.050\ 783\ 17(20) \times 10^{-27} \mathrm{Am^2}$ (F.7)			

F.3 Umrechnungsfaktoren

Wir erinnern in (F.8) an häufig auftretende Umrechnungsfaktoren, die (mit Ausnahme der letzten beiden Eintragungen) approximativ aufgeführt sind. Genauere Werte können leicht aus (F.6) und (F.7) gewonnen werden.

⁵ Die Größe $2R_{\infty}$ wird als Hartree-Energie bezeichnet.

$1 \mathrm{eV} = 1.602 \times 10^{-19} \mathrm{J}$,	$u = 931.5 \mathrm{MeV}/c^2$	
$m_e=0.5110{\rm MeV}/c^2$,	$R_{\infty} = 13.61 \mathrm{eV}$	
$m_p = 938.27 \mathrm{MeV}/c^2$,	$m_n=939.57{\rm MeV}/c^2$	
$m_{\mu} = 105.66 \mathrm{MeV}/c^2$,	$1\text{\AA}(\text{Angstrøm}) = 10^{-15}\text{m}$	
$1 \mathrm{fm} \mathrm{(Fermi)} = 10^{-15} \mathrm{m}$			(F.8)

Sachverzeichnis

³He 347, 351 ⁴He 347 – He I 348 - He II 348 $-\lambda$ -Punkt 348 – spezifische Wärme 348 Absorption 17, 285, 368, 369 Absorptionsspektrum 21 allgemeinste Bewegung – freies Quanton 202 α -Teilchen 23, 34220 α -Zerfall Ammoniakmaser 244 Ammoniakmolekül NH₃ 233, 234Ampère 428 Analysator 112 Annihilation 361, 369 Antimaterie 361 Antiquanton (Antiteilchen) 361,362 antisymmetrische Gesamtwellenfunktion 332 antisymmetrische Spinwellenfunktion 300, 301 antisymmetrische Wellenfunktion 296, 297 antisymmetrische Zweiteilchen-Gesamtwellenfunktion 304Antiwasserstoff 246 atomare Masseneinheit 429, 430 Atombau 334 – abgeschlossene Schalen 336 - Einelektronkonfigurationen 335 – Einelektronproblem 334 Konfiguration des Grundzustandes 335– Periodenstruktur 336 Atomkerne (Schalenmodell) 342

– Einteilchenpotential 343 Spin-Bahn-Kopplung 343 Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte - zeitabhängig 193 Ausschließungsprinzip 336 Austauschkraft 296Austauschsymmetrie 295,300Austauschwechselwirkung 296 Auswahlregeln 96.271.276 Avogadro-Zahl 429,430azimutale Wellenzahl 56 Balmer-Formel 14, 18 Barvonen 363 BCS-Theorie 352, 354 BEC (Bose-Einstein-Kondensat) 344 β -Zerfall 363 Beugung von Licht am Spalt 28Binomialverteilung 395Bohrscher Radius 16,430 Bohrsches Atommodell 12,23 – Wasserstoff 15 Bohrsches Magneton 93, 430 Boltzmann-Konstante 430 Bose-Einstein-Kondensat 344,345 – kritische Temperatur 344 Bose-Einstein-Kondensat im Gas 343 Bose-Einstein-Kondensation (BEC) 344 Bosonen 332.333Braggsches Gesetz 40, 41

CCD 29 charakteristische Wirkung 22 charakteristische Zeit 102 CNO-Zyklus (Kohlenstoffzyklus) 224 Compton-Effekt 46, 50, 52, 371 Compton-Streuung 47 Cooper-Paar 353 Coulomb 428 Coulomb-Barriere 222 d-Zustand 253Dämpfungskonstante 265Dämpfungskraft 264,265 De-Broglie-Beziehung 39De-Broglie-Wellenlänge 39 Delta-Resonanz 76 differentieller Wirkungsquerschnitt 31Dirac-Gleichung 360 Dispersionsrelation 106 Doppelbrechung 113 doppelter Potentialtopf 233 - "rechts-" und "links"-Zustände 241 – Energiespektrum 239 – stationäre Zustände 235 – Tunneleffekt 243Drehimpuls des Photons 130Drehimpulseigenschaften 57Drehimpulsoperator 422 Drehimpulsquantenzahl 57 Drehimpulsungleichungen 88 Edelgase 336 Eigenwert 82,101 – der Energie 80 – des Ortes 172 Eigenwertproblem 421 Eigenzustand 82,101 - der Energie 80 – des Impulses 174 – des Ortes 172 Eigenzustand der Parität 202 Einstein-Koeffizient – Absorption 286– induzierte Emission 286- spontane Emission 286elektrische Dipolstrahlung 271elektrische Feldkonstante 428, 430 elektrische Leitung 340 elektrische Quadrupolstrahlung 271elektrischer Strom 427 elektrisches Dipolmoment 94, 271, 273 elektrodynamische Prozesse 262elektromagnetische Kraft 366 elektromagnetische Prozesse 370 elektromagnetische Strahlung 38

Elektron relativistische Beschreibung 359Elektron im Metall 217 Elektron-Müon-Streuung 370 elektronischer Wasserstoff 246elektroschwache Prozesse 373 elektroschwache Wechselwirkung 368 elementare Prozesse 368 Elementarladung 430 elliptische Polarisation 153Emission 17, 368, 369 Emissionsspektrum 21 Energie 80 Energie-Zeit-Relation 74,75 Energiebänder 337, 338 Energieeigenzustand 156 – Phasenfunktion 161 Energieerzeugung in den Sternen 2, 223Energiemessung 70Energieoperator (Hamilton-Operator) 422 Energiezustände 16,18 Entartung 243 Entartungsgrad 258.410Entstehung des Universums 376 Erwartungswert 165 Experiment 102

f-Zustand 253 Farbladung 365, 366 Fehlerfortpflanzung 398 Fehlerfortpflanzungsgesetz – allgemein 399 Feinstruktur (fs) 308 Feinstrukturkonstante 16.430Feldemissionsmikroskopie 219Fermionen 332, 333 Ferromagnetismus 2 Festkörper - Grundzustand 339 – Quantentheorie 337 – stationäre Zustände 337 Festkörper N = 2338 Fourier-Transformierte 181 – dreidimensional 185Fraunhofersche Linien 21

g-Faktor

– baryonischer Systeme 93 – elektronischer Systeme 93 *a*-Zustand 253Gauss-Verteilung 395, 397 gedämpfter Oszillator 266– Intensitätsverteilung 267Gemisch 148 Gluonen 367 Grand Unification 377 Gravitationskonstante 428, 429 Gravitationskraft 366 Gruppengeschwindigkeit 62GSW-Theorie 368, 373 gyromagnetisches Verhältnis 92*ħ*-Regel 21, 22 Hadronen 362 Halbleiter 337, 340, 341 Hall-Effekt 2 Hamilton-Operator 426 Hamilton-Operator (Energieoperator) 422 harmonischer Oszillator 3,226 - Energieeigenwerte 230– Wellenfunktionen 230Hartree-Energie 430Hauptquantenzahl 15,408 Heisenbergsche Ungleichung - im Drehimpuls und Winkel 85 – im Impuls und Ort 183 – in Energie und Zeit 64 Heisenbergsche Ungleichungen 60, 103– im Impuls und Ort 80 Heliumatom 319- Energiespektrum 323, 325, 326 – Gesamtdrehimpuls 324– Gesamtwellenfunktion 324– Orthohelium 322 – Parahelium 322 – stationäre Zustände 320 -- Ein-Quanton-Problem 321-- Gesamtsystem 321 – Störungsrechnung 327 -- angeregte Zustände, Parahelium 329-- Grundzustand 328 -- Orthohelium 330 heuristisches Prinzip 11 Hochtemperatur-Supraleitung 352

Huygensches Prinzip 104 Hyperfeinwechselwirkung 75 ideales Bosonengas 349.350 Impulsamplitude 178 – dreidimensional 184 Impulsoperator 420 induzierte Emission 285Innere Konversion 109Interferenz und Weginformation 170Interferenzexperimente – Phasenfunktion 177 inverse Projektion 129.135 inverse Projektionen 145 Inversion 246,288Isolatoren 337, 340, 341 K-Meson 373 Kastenpotential 193- Energieeigenwerte 196 – ħ-Regel 198 – Wellenfunktionen 196 Kelvin 429 Kernmagneton 94,430 Kernresonanzfluoreszenz 67 Kernresonanzstreuung 68 Kilogramm 427 klassische spektrale Ungleichung 60 klassischer Elektronenradius 270Kommutator 424 Komplementaritätsprinzip 36, 103Kontinuitätsgleichung 207, 208Korrespondenzprinzip 24Kugelfunktionen 405– normierte 405 Orthogonalität 405Kugelkoordinaten 401 *l*-Auswahlregel 278, 279 λ -Regel 52, 54 $\lambda/4$ -Plättchen 115Länge 427 Laser 285Legendre-Funktionen 404 Legendre-Polynome 404Leitfähigkeit von Metallen 1 Leptonen 362leptonische Prozesse 374Lichtgeschwindigkeit 428

Lichtquantenhypothese 10 linear polarisierte Welle 112lineare Polarisation 111 linkszirkular polarisierte Welle 115Lyman-Serie 18 m-Auswahlregel 276, 278 Mössbauer-Absorption 69,70 – Wirkungsquerschnitt 73Mössbauer-Effekt 66, 68, 70, 72, 95 – Theorie 69 Mössbauer-Emission 69 Mössbauer-Streuung 71magische Zahlen 342 magnetische Dipolstrahlung 271magnetische Feldkonstante 428,430magnetische Quantenzahl 58magnetisches Moment 91 Malussches Gesetz 112 Masse 427 Masse des Elektrons 430 Masse des Müons 430 Masse des Neutrons 430 Masse des Protons 430 Matrizenmechanik 3 Mesonen 363Metalle 337, 340, 341 Meter 428 Mittelwert 81,101 Mittelwerte 182 mittlere Lebensdauer 65, 274, 275 Mol 429 Multipolstrahlung 271müonischer Wasserstoff 246 μ SR-Experiment 157Nanotechnologie 220natürliche Linienbreite 74 natürliche Phasenwahl 147 Natriumatom 18 363Neutron Newton 428 363 Nukleon Nullpunktsenergie 199Observable (physikalische Größe) 80 Omega-minus (Ω^{-})-Baryon 365 Operatoren der Quantenmechanik

419

optische Aktivität 115Orthogonalität - Wellenfunktionsformalismus 181 Orthogonalitätsrelationen 124, 135, 147 Orthohelium 322 – Austauschkraft 331 Orthopositronium 319Ortsamplitude 171, 172 – dreidimensional 183Ortsoperator 420 p-Zustand 253 Paarbildung 361,369 Parahelium 322 – Austauschkraft 330 Parallelitätsgesetz 91 Parapositronium 319Parität 201Paritätsoperator 201 Paschen-Serie 18 Pauli-Prinzip 100,333periodisches System der Elemente 336 Permutationssymmetrie 295, 297, 300, 331, 332 Phasenkonvention 143Photoeffekt 8.11 Photomultiplier 29 Photon 11 physikalische Größe – unverträgliche 82,102 physikalische Größe (Observable) 80. 81 physikalische Größen verträgliche 90 physikalische Konstanten 429 klassisch–makroskopische 429– mikroskopische 430Pion 363, 364 Pion-Nukleon-Streuung 371pionischer Wasserstoff 25,246 Planck-Einstein-Beziehung 36 Plancksche Konstante 7, 11, 12, 21, 430Plancksches Strahlungsgesetz 3 Polarisation zur Basis (R, L) 127.129 Polarisation zur Basis (x,y) 117, 124 Polarisator 112Positron 360, 361

Positronium 316 – Annihilation 316, 319 – Energiespektrum 317, 318 - Spin und magnetisches Moment 317– stationäre Zustände 316 – Strahlungsübergänge 319Potentialstufe 210 Poynting-Vektor 263 Prinzip der sequentiellen Faktorisierung 141 Projektionswahrscheinlichkeit 117,119, 124, 134 – zeitabhängige 156 Proton 363 Proton-Proton-Kette (P-P-Kette) 225Protonenradius 12 QCD (Quantenchromodynamik) 247. 367 QED (Quantenelektrodynamik) 246,366 Quantenamplitude 135, 140, 412 – zeitabhängige 156Quantenamplitude inverser Projektionen 146Quantenchromodynamik (QCD) 247. 367 Quantenelektrodynamik 3 Quantenelektrodynamik (QED) 246.315, 366 Quantenfeldtheorie 365 Quantenflüssigkeit 347 Quanteninterferenz 138Quanteninterferenzexperiment 135.136quantenphysikalisches Vakuum 360 Quantenpostulat 6 Quantenschwebung 160 Quantisierung des Drehimpulses 15,55.57 Quanton 36,101Quantonbegriff 35 133Quantonfabrik Quantonprinzip 36,103Quarks 362 Röntgenstrahlen 40 rechtszirkular polarisierte Welle 114

reiner Zustand 148 Resonanzfluoreszenz 20, 21 Resonanzfluoreszenzprozess 19 Resonanzfluoreszenzstreuung 268 - differentieller Wirkungsquerschnitt 269– Wirkungsquerschnitt 270 Resonator 246 Richtungsentartung 253Rydberg-Atom 24 Rydberg-Energie 16,430 s-Zustand 253 Schalenmodell mit Spin-Bahn-Kopplung 343 Schrödinger-Gleichung – allgemein 425 – freies Quanton 192 - mit Potential 204, 206 - Zwei-Quanton-System 413, 415 schwache Kraft 366 schwarzer Körper 25Sekunde 427 SI-System der Einheiten 427 Sigma-minus (Σ)-Baryon 373 Singulettzustand 302 spektrale Breite 81, 101 spektrale Breiten 182spektrale Ungleichung – azimutale 63 – räumliche 62 – zeitliche 61 Spektrallinien 13, 18 Spektrum 80, 101 spezifische Wärme 2 Spiegel- oder Inversionssymmetrie 201Spiegelbildkraft 218Spin 60 Spin 1/2149, 185– Quantenamplituden 151 Spin Eins 132 Spinoren 57, 185, 187 Spinquantenzahl 60 spontane Emission 261, 262, 285 Sprungtemperatur (kritische Temperatur) 351Stabilität der Materie 2, 16, 83 Stabilitat der Atome 13

Standardabweichung 397 Standardmodell 362, 376 starke Kraft 366 stationärer Zustand 16,80Stationarität 75statistische Fehler 393 – der Einzelmessung 393 statistische Fluktuationen 394statistischer Fehler 123, 396, 397 statistisches Postulat 6 Stefan-Boltzmann-Gesetz 25Stern-Gerlach-Experiment 94, 97, 99 Stetigkeitsbedingungen 209Störungstheorie 328 Stoßparameter 31 Strahlteiler 116Strahlungsdämpfung 264Strahlungsgesetz 2.4Streuexperimente 134 Streuung von α -Teilchen an Atomkernen 31 Streuung von Röntgenstrahlen an Kristallen 40 String-Theorie 378Superpositionsprinzip der Quantenamplituden 141 Suprafluidität 2.347Supraleitung 2, 347, 351 – Bose-Einstein-Kondensation 353 symmetrische Gesamtwellenfunktion 332 symmetrische Spinwellenfunktion 300,301 symmetrische Wellenfunktion 295.297symmetrische Zweiteilchen-Gesamtwellenfunktion 304 Teilchen-Wellen-Symmetrierelationen 36,37 Teilchenphysik 376 thermische De-Broglie-Wellenlänge 344 thermodynamische Temperatur 427 thermonukleare Fusion 225 Transistor 341 Tripplettzustand 302Tunnel-Raster-Mikroskop 219Tunneleffekt 216, 217

Überlappungsintegral 273, 296 Ultraviolett-Katastrophe 5Umrechnungsfaktoren 430 universelle Gaskonstante 430 Vakuumlichtgeschwindigkeit 429Vektorboson 366 Vektorbosonen 366 Vektormodell 89 Vektorungleichungen 86,88 virtueller Photonaustausch 370 vollständige Basis 125, 127, 129, 134 Vollständigkeitsrelation 124, 135 W-Boson 368 Wahrscheinlichkeitsdichte 171, 172 – dreidimensional 183 – im Impulsraum 178, 185 Wahrscheinlichkeitsstromdichte 208 stationäre Zustände 208 Wasserstoffatom 246,305 - Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten 254 – Elektron- und Protonspin 307 - endliche Protonenmasse 305- Energie 16 – Energieeigenwerte 250,408- Energien 307 – Energieniveauschema 253– Entartung 410 – Feinstruktur (fs) 308 - Feinstruktur-Energiespektrum 311 – Grundzustand 250 – Hauptquantenzahl 251– Hyperfeinstruktur 314– Hyperfeinstruktur (hfs) 312 – Kugelfunktionen 251– Lamb-Shift 315– magnetische Quantenzahl 252 nicht kugelsymmetrische Lösungen 251 Parität 255– Planetenbahnmodell 12 - Quantenzahl des Bahndrehimpulses 252– Quantenzahlen 410 – Quantisierungsachse 255

- radiale Wellenfunktionen 251, 410

 reduzierte Masse 306 relativistische Effekte 311 - s-Zustände 253 – Spektrallinien 13 - sphärisch symmetrische Lösungen 248- Spin-Bahn-Kopplung 311, 314 - stationäre, gebundene Zustände 247– Strahlungskorrekturen 315 – Streuzustände 247 - Wellenfunktionen kugelsymmetrischer Zustände 251 Wellenfunktion 171 – dreidimensional 183 – im Impulsraum 178 -- dreidimensional 185 – im Ortsraum 172 - Impulseigenzustand 177 – zeitabhängig 191 Wellenfunktion im Spinraum 297Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms 401.410 – radiale Differentialgleichung 406 Wellenmechanik 3 Wellenpaket 60 Wirkung 22 Wirkungsquerschnitt

 differentiell 33 - total 33 Z-Boson 368 Zeeman-Effekt 94 - 96– normaler 280 – Wasserstoffatom 280 Zeit 427 Zeitabhängigkeit 155– allgemein 171Zeitmessung 64 Zerfälle in Leptonen 375Zerfallskonstante 66 zerfließendes Wellenpaket 203zirkulare Polarisation 114, 142 Zustand 101 Zustandsbegriff 80 411, 412 Zustandsvektor zeitabhängig 412Zwei-Quanton-System – reduzierte Masse 416 - Relativbewegung 417 – Relativkoordinaten 415 - Schwerpunktsbewegung 417 – Schwerpunktskoordinaten 415Zweiweg-Quanten-Interferenzexperiment 168.175, 177